Diseño de Experimentos - 3007340
DOE - Parte I: Un factor de efectos fijos en un DCA

Nelfi González Alvarez

Profesora Asociada Escuela de Estadística

e-mail: ngonzale@unal.edu.co

Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

Escuela de Estadística

Semestre 02 de 2021

Contenido I

1. Experimentos con un solo factor de efectos fijos y estructuras de diseño
2. Experimento de un factor de efectos fijos en un DCA
3. Ejemplo 3.2.7 de Notas de Clase

Contenido

1 Experimentos con un solo factor de efectos fijos y estructuras de diseño

2 Experimento de un factor de efectos fijos en un DCA

3 Ejemplo 3.2.7 de Notas de Clase

Experimentos con un solo factor de efectos fijos y estructuras de diseño

- **Objetivo:** Comparar dos o más tratamientos, los cuales corresponden a niveles de un mismo factor seleccionados a criterio del investigador (***los tratamientos que son de su interés estudiar***).
  - *Comparar varias máquinas*
  - *Comparar varios procesos diseñados para obtener un producto o resultado específico*
  - *Comparar calidad de varios materiales o proveedores de un mismo material*
  - *Comparar varios empleados.*
  - *etc.*
- **Tipos de comparaciones:**
  - En términos de medias poblacionales (***es la comparación más común***)
  - En términos de varianzas y capacidad actual (***no confundir con experimentos de componentes de varianza, los cuales son de efectos aleatorios***).
- **Estructuras de diseño:**
  - *Completatamente aleatorizadas (DCA)*
  - *En bloques: Completos aleatorizados (DBCA), cuadrados latinos (DCL), cuadrados grecolatinos (DCGL).*

Tabla 1: Estructuras de diseño en experimentos con un sólo factor de efectos fijos, y modelos estadísticos

Diseño	**Factores de bloque**	**Método estadístico**	**Modelo estadístico**
DCA	0	ANOVA con un solo criterio de clasificación	$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij}$
DBCA	1	ANOVA con dos criterios de clasificación	$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ij}$
DCL	2	ANOVA con tres criterios de clasificación	$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + \varepsilon_{ijk}$
DCGL	3	ANOVA con cuatro criterios de clasificación	$Y_{ijkl} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + \delta_l + \varepsilon_{ijkl}$

Notación: Y es la variable respuesta; μ es la media global; α_i es el efecto fijo del i-ésimo tratamiento; β_j, γ_k y δ_l, son los efectos fijos de bloques y ε es el error aleatorio.

Nota 1.1

Recuerde que los bloques restringen la aleatorización de las corridas y de la asignación de las U.E a los tratamientos, como estrategia para reducir los efectos de factores de ruido que pueden enmascarar y confundir los efectos de factores de tratamientos.

Nota 1.2

En el curso consideraremos los experimentos de un solo factor de efectos fijos en estructuras de diseño DCA y DBCA. A continuación veremos el caso DCA.

Contenido

1. Experimentos con un solo factor de efectos fijos y estructuras de diseño
2. Experimento de un factor de efectos fijos en un DCA
   - Propósito y ejecución del experimento
   - Modelo ANOVA
   - Propiedades distribucionales de las respuestas y medias muestrales
   - Estimadores de mínimos cuadrados
   - ANOVA y test ANOVA
   - Distribuciones de los estimadores e I.C para los parámetros
   - Validación de supuestos
   - Funciones R
3. Ejemplo 3.2.7 de Notas de Clase

Propósito y ejecución del experimento

Objetivo

Determinar si los niveles considerados del factor de interés (A) tienen efectos sobre la media de la variable respuesta, o equivalentemente, si al menos para un par de niveles del factor de tratamientos hay diferencia en la media de la respuesta.

Ejecución del experimento

Determinado el número de réplicas para cada tratamiento (los tamaños de muestra en cada nivel, n_i, $i = 1, 2, \ldots, a$, y se suponen a tratamientos o niveles del factor A):

1. *Seleccionar y asignar aleatoriamente las $N = \sum_{i=1}^{a} n_i$ unidades experimentales (U.E) a los a tratamientos, las cuales deben ser homogéneas entre sí.*
2. *En orden completamente al azar, medir la variable respuesta a cada U.E según tratamiento asignado.*

Tabla 2: Tabla de datos experimentales de un DOE en un DCA

	Niveles factor A			
	A_1	A_2	$\dots$	A_a
Datos respuesta	Y_{11}	Y_{21}	$\dots$	Y_{a1}
	Y_{12}	Y_{22}	$\dots$	Y_{a2}
	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
	Y_{1n_1}	Y_{2n_2}	$\dots$	Y_{an_a}
Total	$Y_{1\bullet}$	$Y_{2\bullet}$	$\dots$	$Y_{a\bullet}$
Promedio	$\bar{Y}_{1\bullet}$	$\bar{Y}_{2\bullet}$	$\dots$	$\bar{Y}_{a\bullet}$

- Y_{ij} Rta. de la j-ésima U.E asignada al i-ésimo tratamiento, con $i = 1, 2, \dots, a$, $j = 1, 2, \dots, n_i$
- $Y_{i\bullet}$ La suma de las n_i respuestas en el i-ésimo tratamiento
- $\bar{Y}_{i\bullet}$ promedio muestral de las n_i respuestas en el i-ésimo tratamiento

Modelo ANOVA

Y_{ij}	La rta. de la j-ésima U.E en el tratamiento i, $i = 1, 2, \ldots, a$, $j = 1, 2, \ldots, n_i$.
ε_{ij}	El error aleatorio en la j-ésima réplica del i-esimo tratamiento.
μ	La rta. global promedio.
μ_i	La rta. esperada o media en el tratamiento i.
α_i	El efecto fijo del tratamiento i sobre la respuesta media global.
n_i	Tamaño de muestra en el tratamiento i.

Modelo de medias de tratamientos:

$$Y_{ij} = \mu_i + \varepsilon_{ij},\ \varepsilon_{ij} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma^2\right). \tag{1}$$

Modelo de efectos de tratamientos:

$$Y_{ij} = \underbrace{\mu + \alpha_i}_{=\mu_i} + \varepsilon_{ij},\ \varepsilon_{ij} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma^2\right), \text{ sujeto a } \sum_{i=1}^{a} n_i \alpha_i = 0. \tag{2}$$

Si $n_i = n$, $\forall\ i = 1, \ldots, a$, entonces el modelo (2) queda de la siguiente manera,

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij},\ \varepsilon_{ij} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma^2\right), \text{ sujeto a } \sum_{i=1}^{a} \alpha_i = 0. \tag{3}$$

Propiedades distribucionales de las respuestas y medias muestrales

Bajo los supuestos $\varepsilon_{ij} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma^2\right)$:

1. *Las $Y_{ij} \sim N\left(\mu_i, \sigma^2\right)$, son mutuamente independientes y por tanto incorrelacionadas, aunque no idénticamente distribuidas, excepto las respuestas en un mismo nivel i.*
2. *Las medias muestrales de las respuestas en cada nivel $i = 1, \ldots, a$, $\bar{Y}_{i\bullet} = \frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i} Y_{ij} \sim N\left(\mu_i, \sigma^2/n_i\right)$, son mutuamente independientes.*
3. *La media global muestral, es decir, $\bar{Y}_{\bullet\bullet} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i} Y_{ij} \sim N\left(\mu, \sigma^2/N\right)$, con $N = \sum_{i=1}^{a} n_i$.*

Estimadores de mínimos cuadrados

Consideremos el modelo en (2). Hallar $\boldsymbol{\beta} = (\mu, \alpha_1, \ldots, \alpha_a)^T$ tal que

$$\min_{\boldsymbol{\beta}} \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij}^2 = \min_{\boldsymbol{\beta}} \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{n_i} \left(Y_{ij} - \mu - \alpha_i\right)^2, \text{ sujeto a } \sum_{i=1}^{a} n_i \alpha_i = 0. \qquad (4)$$

Ecuaciones normales

$$\sum\nolimits_{i=1}^{a} n_i \alpha_i = 0 \qquad (5)$$

$$Y_{\bullet\bullet} - N\mu - \sum\nolimits_{i=1}^{a} n_i \alpha_i = 0 \qquad (6)$$

$$Y_{i\bullet} - n_i \mu - n_i \alpha_i = 0, \; i = 1, \ldots, a \qquad (7)$$

Estimadores resultantes

$$\widehat{\mu} = \bar{Y}_{\bullet\bullet} \qquad (8)$$

$$\widehat{\alpha}_i = \bar{Y}_{i\bullet} - \bar{Y}_{\bullet\bullet}, \; i = 1, \ldots, a \qquad (9)$$

$$\widehat{\mu}_i = \bar{Y}_{i\bullet} \; i = 1, \ldots, a \qquad (10)$$

donde $Y_{\bullet\bullet}$ y $\bar{Y}_{\bullet\bullet}$ son, respectivamente, la suma y el promedio muestral de las N respuestas observadas Y_{ij}, en tanto que $Y_{i\bullet}$ y $\bar{Y}_{i\bullet}$ son, respectivamente, la suma y el promedio muestral de las n_i respuestas observadas en el i-ésimo nivel del Factor de tratamientos.

ANOVA y test ANOVA

De acuerdo a modelo en (2), la rta. estimada y los residuos, son

$$\widehat{Y}_{ij} = \widehat{\mu} + \widehat{\alpha}_i = \bar{Y}_{i\bullet} \text{ (la media muestral del nivel i)} \tag{11}$$

$$\widehat{\varepsilon}_{ij} = Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet} \text{ (desviaciones respecto a la media muestral del nivel i)} \tag{12}$$

Por tanto tenemos la siguiente descomposición de la variabilidad total

$$\begin{array}{ccccc}
\underbrace{\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i}\left(Y_{ij}-\bar{Y}_{\bullet\bullet}\right)^2}_{\textbf{Variabilidad Total}} & = & \underbrace{\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i}(\bar{Y}_{i\bullet}-\bar{Y}_{\bullet\bullet})^2}_{\textbf{Explicada (tratamientos)}} & + & \underbrace{\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i}(Y_{ij}-\bar{Y}_{i\bullet})^2}_{\textbf{No explicada (error)}} \\
\Downarrow & & \Downarrow & & \Downarrow \\
\text{SST} & = & \text{SSA} & + & \text{SSE} \\
\underbrace{\text{g.l (SST)}}_{\boldsymbol{N-1}} & = & \underbrace{\text{g.l (SSA)}}_{\boldsymbol{a-1}} & + & \underbrace{\text{g.l (SSE)}}_{\boldsymbol{N-a}}
\end{array} \tag{13}$$

Tabla 3: Tabla ANOVA un factor de efectos fijos en un DCA

Fuente	g.l	SC	CM	CME	F_0	Valor P
Factor	$a-1$	SSA	$MSA = \dfrac{SSA}{a-1}$	$\sigma^2 + \dfrac{\sum_{i=1}^{a} n_i\alpha_i^2}{a-1}$	$\dfrac{MSA}{MSE}$	$P\left(f_{a-1,N-a} > F_0\right)$
Error	$N-a$	SSE	$MSE = \dfrac{SSE}{N-a}$	σ^2		
Total	$N-1$	SST				

$$SST = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i}\left(Y_{ij} - \bar{Y}_{\bullet\bullet}\right)^2 = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i} Y_{ij}^2 - N\bar{Y}_{\bullet\bullet}^2$$

$$SSA = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i}\left(\bar{Y}_{i\bullet} - \bar{Y}_{\bullet\bullet}\right)^2 = \sum_{i=1}^{a} n_i\bar{Y}_{i\bullet}^2 - N\bar{Y}_{\bullet\bullet}^2$$

$$SSE = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i}\left(Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet}\right)^2 = SST - SSA$$

Nota 2.1

Note que bajo los supuestos del modelo, un estimador insesgado de σ^2 es el MSE. También note que bajo $H_0 : \alpha_i = 0,\ \forall\ i = 1,\ldots,a$, $E[MSA] = \sigma^2$.

MSE como un estimador "pooled" de σ^2

Sea S_i^2 la varianza muestral de las n_i observaciones en el i-ésimo nivel del factor de tratamientos, entonces

$$S_i^2 = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n_i} \left(Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet} \right)^2 \Rightarrow \sum_{j=1}^{n_i} \left(Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet} \right)^2 = (n_i - 1)\, S_i^2. \tag{14}$$

por tanto, el MSE del modelo ANOVA de un factor de efectos fijos en un DCA, es igual a

$$\text{MSE} = \frac{\sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{n_i} \left(Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet} \right)^2}{N - a} = S_p^2 = \frac{\sum_{i=1}^{a} (n_i - 1)\, S_i^2}{\sum_{i=1}^{a} (n_i - 1)}. \tag{15}$$

S_p^2 es el estimador *pooled* de la varianza σ^2, con base en a muestras independientes.

Test de hipótesis fundamental asociado al ANOVA:

$$H_0: \mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_a \text{ vs. } H_1: \text{ algún par } \mu_i \neq \mu_j \tag{16}$$

o de forma equivalente,

$$H_0: \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_a = 0 \text{ vs. } H_1: \text{ algún } \alpha_i \neq 0,\ i = 1, 2 \ldots, a. \tag{17}$$

Nota 2.2

El test en (17) resulta del test en (16) junto con la restricción lineal del modelo en (2): $\sum_{i=1}^{a} n_i \alpha_i = 0$, ya que si las a medias μ_i son iguales, entonces

$$\mu + \alpha_1 = \mu + \alpha_2 = \cdots = \mu + \alpha_a \Rightarrow \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_a$$

de donde haciendo todos los efectos iguales al del nivel a, tenemos que

$$\sum_{i=1}^{a} n_i \alpha_i = \sum_{i=1}^{a} n_i \alpha_a = \alpha_a \sum_{i=1}^{a} n_i = \alpha_a N = 0,$$

y desde que $N > 0$, la última ecuación solo puede ser cierta si $\alpha_a = 0$, de modo que bajo la igualdad de los efectos, entonces H_0: $\alpha_i = 0\ \forall\ i = 1, \ldots, a$.

El estadístico de prueba y su distribución bajo H_0 y supuestos $\varepsilon_{ij} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma^2\right)$, es $F_0 = \text{MSA}/\text{MSE} \sim f_{a-1, N-a}$. Se rechaza H_0 para valores estadísticamente grandes de F_0, es decir si $P\left(f_{a-1,N-a} > F_0\right)$ es pequeño.

Distribuciones de los estimadores e I.C para los parámetros

Tabla 4: Estimadores, errores estándar e I.C para los parámetros del modelo

Parám.	Estim.	Distribución	Std	I.C de $(1-\gamma)\%$
μ	$\bar{Y}_{\bullet\bullet}$	$N\left(\mu, \frac{\sigma^2}{N}\right)$	$S_{\bar{Y}_{\bullet\bullet}} = \sqrt{\frac{MSE}{N}}$	$\bar{Y}_{\bullet\bullet} \pm t_{\gamma/2,N-a} \times S_{\bar{Y}_{\bullet\bullet}}$
μ_i	$\bar{Y}_{i\bullet}$	$N\left(\mu_i, \frac{\sigma^2}{n_i}\right)$	$S_{\bar{Y}_{i\bullet}} = \sqrt{\frac{MSE}{n_i}}$	$\bar{Y}_{i\bullet} \pm t_{\gamma/2,N-a} \times S_{\bar{Y}_{i\bullet}}$
α_i	$\widehat{\alpha}_i$	$N\left(\alpha_i, \sigma^2\left[\frac{1}{n_i} - \frac{1}{N}\right]\right)$	$S_{\hat{\alpha}_i} = \sqrt{MSE\left(\frac{1}{n_i} - \frac{1}{N}\right)}$	$\widehat{\alpha}_i \pm t_{\gamma/2,N-a} \times S_{\widehat{\alpha}_i}$

Nota 2.3

Estimaciones y cualquier inferencia sobre las medias y efectos de los tratamientos tienen sentido realizarlas desde que en el test ANOVA se detecte diferencia de medias (es decir, significancia de efectos).

Validación de supuestos

Tabla 5: Supuestos a evaluar y pruebas correspondientes

Supuesto	Hipótesis	Test estadístico	Gráfico
Normalidad	$H_0 : \varepsilon_{ij} \sim$ Normal vs.. $H_1 : \varepsilon_{ij}$ no son Normales	Shapiro Wilk	Gráfico de probabilidad normal sobre residuales, o residuales estandarizado o estudentizados
Varianza Constante	$H_0 : \sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \cdots = \sigma_a^2$ vs. $H_1 :$ algún par $\sigma_i^2 \neq \sigma_j^2$	Bartlett, Cochran, Levene	Gráfico de residuales vs. valores ajustados, residuales vs. niveles del factor
Independencia	$H_0 : corr\left(\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{i'j'}\right) = 0 \ \forall (i,j) \neq (i',j')$ $H_1 : corr\left(\varepsilon_{ij}, \varepsilon_{i'j'}\right) \neq 0$ para algún $(i,j) \neq (i',j')$	Ljung-Box, ACF, Durbin - Watson de orden 1	Gráfico de residuales comunes vs. orden de corrida

Otros análisis mediante los gráficos de residuos (recordar los diagnósticos con gráficos de residuos vistos en modelos de regresión):

- La forma del modelo: ¿carencia de ajuste?
- Outliers: Con residuos estandarizados o estudentizados

Observaciones

De acuerdo a Dean et. al. (2017),

- *El supuesto de independencia debe verificarse antes de los otros supuestos.*
- *Las pruebas formales sobre igualdad de varianzas tienden a ser poco potentes con pocas réplicas por nivel y muy sensibles a no normalidad.*
- *La violación del supuesto de varianza constante es preocupante en particular cuándo los diseños son desbalanceados.*
- *Pequeñas desviaciones de la normalidad no afectan fuertemente a los niveles de significancia, niveles de confianza o la potencia.*

Funciones R

- `aov(...)`, ajusta el modelo ANOVA.
- `anova(...)`, `summary(...)`, sobre modelos ANOVA obtienen la tabla ANOVA.
- `model.tables(...)`, en experimentos balanceados, permite estimar medias y efectos de tratamientos con sus errores estándar.
- `fit.contrast(...)`, función de la librería `gmodels`, para estimar contrastes de medias de tratamientos y sus I.C.
- `glht(...)`, función de la libería `multcomp`, para pruebas de hipótesis lineales generales y comparaciones múltiples; combinando `confint(glht(...))` también puede obtenerse estimaciones de contrastes de medias de tratamientos con sus intervalos de confianza.
- `bartlett.test(...)`, para test de homogeneidad de varianza de Bartlett.
- `leveneTest(...)`, función de la librería `car` para tests de Levene de homogeneidad de varianza.

Contenido

1. Experimentos con un solo factor de efectos fijos y estructuras de diseño
2. Experimento de un factor de efectos fijos en un DCA
3. Ejemplo 3.2.7 de Notas de Clase

Ejemplo 3.2.7 de Notas de Clase

Se llevó a cabo un experimento para probar los efectos de un fertilizante nitrogenado en la producción de lechuga. Se aplicaron cinco dosis diferentes de nitrato de amonio a cuatro parcelas (las réplicas) en un diseño totalmente aleatorizado. Los datos son el número de lechugas cosechadas de las parcelas.

Tratamiento (lb N/acre)	lechuga/parcela			
0	104	114	90	140
50	134	130	144	174
100	146	142	152	156
150	147	160	160	163
200	131	148	154	163

Ver Código R 3.2.5 y Salidas R 3.2.9 a 3.2.14, páginas 75-81 de Notas de Clase, pero a continuación se ilustra el cálculo paso paso de la ANOVA, y pruebas de varianza constante de Levene y de Bartlett. ir a archivo Calculosvariosenejemplolechugasv02.pdf.

Dean, A., Voss, D., and Draguljić, D. (2017). *Design and Analysis of Experiments*, 2nd Edition. Springer.

Gutiérrez Pulido, H. y de la Vara Salazar, R. (2012). *Análisis y Diseño de Experimentos*, 3ª Edición. McGraw-Hill.

Kuehl, R. O. (2001). *Diseño de Experimentos. Principios Estadísticos de Diseño y Análisis de Investigación*, 2ª Edición. Thomson Learning.

Kutner, M. H., Nachtsheim, C. J., Neter, J., and Li, W. (2005). *Applied Linear Statistical Models*, 5th Edition. McGraw-Hill Irwin.

Montgomery, D. C. (2020). *Design and Analysis of Experiments*, 10th Edition. John Wiley & Sons, Inc.