Diseño de Experimentos - 3007340
DOE - Parte III: Experimentos con un factor de efectos aleatorios 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

Contenido

Experimentos unifactoriales con efectos aleatorios

Considere el caso en el cual ***el factor de interés puede tomar un número grande de posibles niveles (al menos 100 veces más grande que el número de niveles experimentales) y que en condiciones normales de operación del proceso no es posible fijar el factor en algún nivel particular.*** Bajo estas condiciones se tiene que

- *No tiene sentido estudiar medias o efectos de tratamientos, ya que los tratamientos varían aleatoriamente durante la operación del proceso.*
- *Por lo anterior, se considera que los efectos del factor son variables aleatorias.*
- *En estas condiciones, la variabilidad de los niveles del factor puede contribuir significativamente a la varianza de la variable respuesta de interés.*
- ***El objetivo por tanto es estudiar las componentes de la varianza total de la respuesta.***

Ejemplo 1.1

Ver ejemplos 1, 2 en Notas de Clase, páginas 114-116.

Propósito y ejecución del experimento

Objetivo

- Determinar si la variabilidad en el factor de interés (A) contribuye significativamente a la varianza total de la respuesta.
- Estimar las proporciones de varianza debidas al factor (variabilidad entre tratamientos) y a causas no asignables de variación (variabilidad dentro de tratamientos).

Ejecución del experimento

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

1. *Seleccionar aleatoriamente los a tratamientos a observar en el experimento.*
2. *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.*
3. *En orden completamente al azar, medir la variable respuesta a cada U.E según tratamiento asignado.*

Modelo ANOVA de efectos aleatorios

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-ésimo tratamiento.
μ	La rta. global promedio.
A_i	El efecto aleatorio del tratamiento i sobre la respuesta media global.
n_i	Tamaño de muestra en el tratamiento i.

Modelo de efectos aleatorios:

$$\begin{aligned} &Y_{ij} = \mu + A_i + \varepsilon_{ij}, \text{ con } A_i \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma_\alpha^2\right),\ \varepsilon_{ij} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma^2\right), \\ &A_i,\ \varepsilon_{ij} \text{ mutuamente independientes.} \end{aligned} \tag{1}$$

Note que $\mu_i = \mu + A_i \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(\mu, \sigma_\alpha^2\right)$, es decir, las medidas de tratamientos son en realidad variables aleatorias y es por esto que no tiene sentido tratar de hacer inferencias sobre éstas.

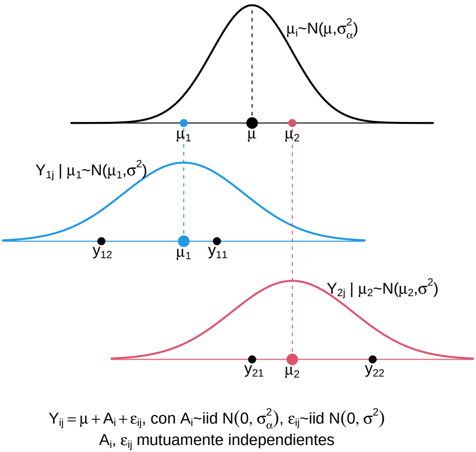

Figura 1: Representación del modelo ANOVA de un factor de efectos aleatorios. Adaptado de Kutner et. al. (2005)

Propiedades distribucionales de las respuestas y medias muestrales

Bajo los supuestos $A_i \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma_\alpha^2\right)$, $\varepsilon_{ij} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma^2\right)$ y las variables A_i, ε_{ij} mutuamente independientes,

1. *Cada respuesta $Y_{ij} \sim N\left(\mu, \sigma_\alpha^2 + \sigma^2\right)$*
2. *Sin embargo, no todas las Y_{ij} son independientes:*
   - *Respuestas en un mismo nivel de tratamientos están correlacionadas, pues*
   $$\text{Cov}\left(Y_{ij}, Y_{is}\right) = \text{Cov}\left(\mu + A_i + \varepsilon_{ij}, \mu + A_i + \varepsilon_{is}\right) = \sigma_\alpha^2 \tag{2}$$
   - *Respuestas en niveles de tratamientos distintos son incorrelacionadas, y bajo normalidad, son independientes,*
   $$\text{Cov}\left(Y_{ij}, Y_{ks}\right) = \text{Cov}\left(\mu + A_i + \varepsilon_{ij}, \mu + A_k + \varepsilon_{ks}\right) = 0,\ \forall i \neq k \tag{3}$$
3. *Las medias muestrales $\bar{Y}_{i\bullet} = \frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i} Y_{ij} = \mu + A_i + \bar{\varepsilon}_{i\bullet}$, son variables aleatorias normales independientes con la siguiente distribución,*
$$\bar{Y}_{i\bullet} \sim N\left(\mu, \sigma_\alpha^2 + \frac{\sigma^2}{n_i}\right) \tag{4}$$

Cuando $n_i = n\ \forall i$, entonces $\bar{Y}_{i\bullet} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(\mu, \sigma_\alpha^2 + \frac{\sigma^2}{n}\right)$.

4. *La media muestral global es una variable aleatoria normal,*

$$\bar{Y}_{\bullet\bullet} \sim N\left(\mu, \frac{\sigma_\alpha^2 \sum_{i=1}^{a} n_i^2 + \sigma^2 N}{N^2}\right) \tag{5}$$

donde

$$\bar{Y}_{\bullet\bullet} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i} Y_{ij} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{a} n_i \bar{Y}_{i\bullet}, \tag{6}$$

es una combinación lineal de variables aleatorias independientes al verla en términos de las medias muestrales de tratamientos. Cuando $n_i = n \; \forall i$, entonces

$$\bar{Y}_{\bullet\bullet} \sim N\left(\mu, \frac{n\sigma_\alpha^2 + \sigma^2}{an}\right) \tag{7}$$

Contenido

Análisis de varianza y test ANOVA

Hacemos la misma descomposición de la variabilidad total como en el caso de un factor de efectos fijos en un DCA, es decir, $SST = SSA + SSE$, sin embargo, observe con cuidado el valor esperado del MSA.

Tabla 1: Tabla ANOVA en un DCA con un sólo factor de efectos aleatorios ▸ Estim. ANOVA

Fuente	g.l	SC	CM	CME	F_0	Valor P
Factor	$a-1$	SSA	$MSA = \frac{SSA}{a-1}$	$\sigma^2 + c \times \sigma_\alpha^2$	$\frac{MSA}{MSE}$	$P\left(f_{a-1,N-a} > F_0\right)$
Error	$N-a$	SSE	$MSE = \frac{SSE}{N-a}$	σ^2		
Total	$N-1$	SST				

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

Nota 2.1

- *Si el diseño es balanceado, $N = na$ y $c = n$ en la expresión del valor esperado del MSA.*
- *Observe que cuando $\sigma_\alpha^2 = 0$, $E[MSA] = E[MSE] = \sigma^2$.*

Test de hipótesis fundamental asociado al ANOVA: *Recuerde que tanto los efectos como las medias de tratamientos son variables aleatorias, luego no tiene sentido probar la igualdad de medias de tratamientos o la nulidad de los efectos de tratamientos. Lo que interesa es determinar si la variabilidad entre tratamientos contribuye significativamente a la varianza total de la respuesta, donde la varianza total es* $\mathrm{Var}\left[Y_{ij}\right] = \sigma_\alpha^2 + \sigma^2$.

$$H_0 : \sigma_\alpha^2 = 0, \text{ vs. } H_1 : \sigma_\alpha^2 > 0 \tag{8}$$

Bajo H_0 y los supuestos $A_i \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma_\alpha^2\right)$, $\varepsilon_{ij} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(0, \sigma^2\right)$ y las variables A_i, ε_{ij} mutuamente independientes, el estadístico de la prueba es $F_0 = \mathrm{MSA}/\mathrm{MSE} \sim f_{a-1,N-a}$. H_0 es rechazada en favor de H_1 para valores estadísticamente grandes de F_0, es decir, cuando $P\left(f_{a-1,N-a} > F_0\right)$ sea pequeña.

Nota 2.2

Bajo los supuestos $A_i \overset{iid}{\sim} N\left(0, \sigma_\alpha^2\right)$, $\varepsilon_{ij} \overset{iid}{\sim} N\left(0, \sigma^2\right)$, *con* A_i, ε_{ij} *mutuamente independientes, tenemos que* $SSA/\left(\sigma^2 + c \times \sigma_\alpha^2\right) \sim \chi^2_{a-1}$ *e independiente de* $SSE/\sigma^2 \sim \chi^2_{N-a}$, *por tanto:*

$$\frac{MSA/\left(\sigma^2 + c \times \sigma_\alpha^2\right)}{MSE/\sigma^2} \sim \frac{\chi^2_{a-1}/(a-1)}{\chi^2_{N-a}/(N-a)} \sim f_{a-1,N-a}, \tag{9}$$

Otro test que puede ser de interés: *Probar si la varianza debida a los efectos aleatorios es menor o igual que alguna proporción de la varianza del error, Dean et. al. (2017):*

$$H_0 : \sigma_\alpha^2 \leq \eta\sigma^2 \text{ vs. } H_1 : \sigma_\alpha^2 > \eta\sigma^2 \tag{10}$$

para alguna constante positiva η. Si H_0 es cierta, entonces:

$$\frac{MSA/\left(\sigma^2 + c\sigma_\alpha^2\right)}{MSE/\sigma^2} = \frac{MSA}{(1 + c\eta)MSE} \sim f_{a-1,N-a}. \tag{11}$$

La regla de decisión: Rechazar H_0 si $F_0 = \frac{MSA}{MSE} > (1 + c\eta)f_{\gamma,a-1,N-a}$, a un nivel de significancia γ dado.

Contenido

Estimaciones mediante el método ANOVA

Es un método de momentos: Iguala estimadores muestrales a sus respectivos valores esperados. De la Tabla 1:

$$\mathrm{E}\left[\mathrm{MSE}\right] = \sigma^2 \implies \widehat{\sigma}^2 = \mathrm{MSE}. \tag{12}$$

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{\mathrm{E}\left[\mathrm{MSA}\right] - \sigma^2}{c} = \frac{\mathrm{E}\left[\mathrm{MSA}\right] - \mathrm{E}\left[\mathrm{MSE}\right]}{c} \implies \widehat{\sigma}_\alpha^2 = \frac{\mathrm{MSA} - \mathrm{MSE}}{c}. \tag{13}$$

De acuerdo a Montgomery (2020), estos estimadores son los mejores estimadores cuadráticos insesgados, *es decir, que de todos los estimadores insesgados definidos como funciones cuadráticas de las observaciones, (12) y (13) tienen la mínima varianza.* Adicionalmente, para la media global,

$$\mathrm{E}\left[\bar{Y}_{\bullet\bullet}\right] = \mu \implies \widehat{\mu} = \bar{Y}_{\bullet\bullet}, \tag{14}$$

es el mejor estimador lineal insesgado para μ, *es decir, de todos los estimadores insesgados para μ que corresponden a combinaciones lineales de las observaciones, $\widehat{\mu}$ es el que tiene la mínima varianza.*

Nota 3.1

Para la estimación de razón de varianzas,

$$\frac{\sigma_\alpha^2}{\sigma^2},$$

y de la proporción de la varianza total debida al factor:

$$\frac{\sigma_\alpha^2}{\sigma^2 + \sigma_\alpha^2},$$

simplemente se sustituye cada varianza por su respectivo estimador puntual en la correspondiente fórmula.

Nota 3.2

En las Notas de Clase, ver Tabla 5.2 para un resumen de los estimadores puntuales por el método ANOVA y sus intervalos de confianza (I.C); además, en el Apéndice A.7 se muestra la deducción de estos I.C.

Estimación mediante (MLE) y (REML)

- ***Máxima verosimilitud:*** Halla $\left(\mu, \sigma^2, \sigma_\alpha^2\right)^t$, en el espacio $\left(\mu \in \mathbb{R},\ \sigma^2 > 0,\ \sigma_\alpha^2 \geq 0\right)$ que maximiza la verosimilitud de $\boldsymbol{Y} = (Y_{11}, Y_{12}, \ldots, Y_{aN})^t$,

$$L\left(\mu, \Sigma|\boldsymbol{Y}\right) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}\left|\Sigma\right|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{Y} - \mu\mathbf{1}_N\right)^t \Sigma^{-1}\left(\boldsymbol{Y} - \mu\mathbf{1}_N\right)\right], \qquad (15)$$

  con $\Sigma = \operatorname{Cov}(\boldsymbol{Y})$ y $\mathbf{1}_N$ un vector de dimensión $N \times 1$ cuyas entradas son todas iguales a 1.

- ***Máxima verosimilitud restringida o residual:*** Factoriza la verosimilitud de $\boldsymbol{Y}$ (en el caso balanceado) o de una transformación lineal apropiada de $\boldsymbol{Y}$ (en el caso desbalanceado), en dos factores tales que uno de ellos depende de μ y el otro factor (la verosimilitud residual o restringida) solo involucra a las componentes de varianza. luego, estima σ^2, σ_α^2 a partir de la maximización de este segundo factor en el espacio $\sigma^2 > 0$, $\sigma_\alpha^2 \geq 0$. A diferencia de MLE, REML tiene en cuenta los grados de libertad usados en la estimación de μ.

Ver en notas de clase la Sección 5.4.2.

Nota 3.3

1. *A diferencia del método ANOVA, MLE y REML garantizan que las estimaciones de σ_α^2 sean no negativas.*
2. *Aunque numéricamente son más complicados los procedimientos MLE y REML que ANOVA, resultados de normalidad asintótica para el vector de parámetros estimados permiten hallar de forma más fácil los I.C para los parámetros.*
3. *En experimentos balanceados, cuando MSA $\geq$ MSE, los estimadores REML y ANOVA coinciden.*
4. *En R, la función `lmer( )` en las librerías `lme4` y `lmerTest`, permiten obtener los estimadores REML y con esta última librería además, es posible tener valores P para la prueba de significancia de efectos fijos en modelos factoriales con efectos mixtos.*

Contenido

Chequeo de supuestos

Según Dean et. al. (2017):

1. ***Supuestos sobre los errores ε_{ij}:*** **Asumiendo temporalmente que las variables A_i son efectos fijos,** procedemos igual que en el caso de un factor de efectos fijos, usando los residuos $\widehat{\varepsilon_{ij}} = Y_{ij} - \bar{Y}_{i\bullet}$ y sus versiones estandarizadas o estudentizadas, chequeamos, normalidad, varianza constante, independencia.
2. ***Normalidad de los efectos aleatorios A_i:*** Solo cuando se cuente con un número suficiente de niveles a y el diseño sea balanceado, podemos verificar la normalidad, **supuesto muy importante dado que el modelo no es robusto a la no normalidad de los efectos aleatorios,** mediante una versión escalada (estandarizada) de las medias muestrales $\bar{Y}_{i\bullet}$, que bajo los supuestos del modelo ANOVA, cumplen $\bar{Y}_{i\bullet} \overset{\text{iid}}{\sim} N\left(\mu, \sigma_\alpha^2 + \frac{\sigma^2}{n}\right)$.
3. ***La independencia entre los ε_{ij} y las A_i:*** Es difícil de detectar, pero problemas como varianza no constante para los errores, se consideran manifestación de la violación del supuesto de independencia entre efectos aleatorios y error.

Contenido

Ejemplo 5.6 de Notas de Clase

El ejemplo del contenido de "lana limpia", presentado en páginas 115-116, Notas de Clase, tomado de Dean et. al. (2017),

- **Respuesta:** Contenido limpio de lana $= \dfrac{\text{peso de lana limpia}}{\text{peso lana virgen}} \times 100\,\%$
- **Factor de tratamientos y sus niveles:** Fardo de lana, sus niveles es la población de fardos en un embarque particular. Se seleccionan $a = 7$ fardos aleatoriamente de esta población. ***La estructura de tratamientos es de un factor de efectos aleatorios.***
- **Unidades experimentales:** Intervalos de tiempo entre mediciones, estos son asignados aleatoriamente y determinan el orden en que los tratamientos son observados.
- **Factores de bloqueo, de ruido o covariables:** Ninguno fue identificado, ***la estructura de diseño es DCA.***

Los datos

Nota 5.1

Ver páginas 128-133 en Notas de Clase, para el código R y resultados para el análisis.

Contenido limpio (%)						
Fardo						
1	**2**	**3**	**4**	**5**	**6**	**7**
52.33	56.99	54.64	54.90	59.89	57.76	60.27
56.26	58.69	57.48	60.08	57.76	59.68	60.30
62.86	58.20	59.29	58.72	60.26	59.58	61.09
50.46	57.35	57.51	55.61	57.53	58.08	61.45

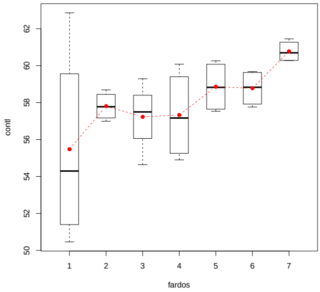

Figura 2: Boxplots según fardo examinado

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.