

# Diseño de Experimentos - 3007340

## DOE - Diseño factoriales $2^k$ - Parte III: $2^k$ con punto al centro

Nelfi González Alvarez

Profesora Asociada Escuela de Estadística

e-mail: [ngonzale@unal.edu.co](mailto: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 Características
- 2 Procedimiento de prueba para detectar curvatura
- 3 Ejemplo

# Contenido

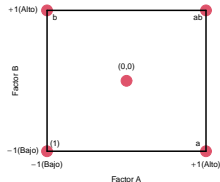
- 1 Características
- 2 Procedimiento de prueba para detectar curvatura
- 3 Ejemplo

# Características

- Aplican cuando todos los factores son cuantitativos
- Los tratamientos son
  - Puntos factoriales del  $2^k$ , donde solo se combinan niveles alto (+1) y bajo (-1) de un factor con niveles alto y bajo de los otros factores.
  - Punto central: Tratamiento donde solo se combina los niveles centrales en los  $k$  factores. El nivel central se representa por 0, de modo que el tratamiento tiene coordenadas

$$\text{Punto central} = \underbrace{(0, 0, 0, \dots, 0)}_{k \text{ ceros}} \quad (1)$$

- Sin embargo, no es un experimento de  $k$  factores cada uno con tres niveles, es decir, un  $2^k$  con punto al centro es diferente a un  $3^k$  donde los factores son observados en los niveles bajo (-1), medio (0), alto (+1) y los tratamientos son todas las combinaciones posibles de niveles entre los  $k$  factores.
- Así el número de tratamientos en un  $2^k$  con punto al centro es solo  $2^k + 1$ .
- El punto al centro replicado  $n_c$  veces permite probar si hay carencia de ajuste por efectos cuadráticos ausentes o curvatura de la superficie de respuesta. Sin embargo, el diseño no permite modelar superficies de respuesta con términos cuadráticos.

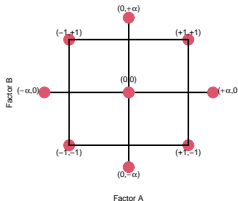
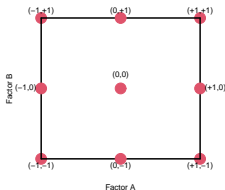


Ejemplo un  $2^2$  con punto al centro. Hay cinco tratamientos pero el modelo con variables codificadas  $X_j \in \{-1, 0, +1\}$ , es

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{12} X_1 X_2 + E, E_i \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, \sigma^2)$$

---

Ejemplos diseños de segundo orden: Izq. un  $3^2$  y der. un diseño central compuesto o DCC para dos factores, con radio axial  $\alpha$ .



El modelo con variables codificadas  $X_j \in \{-1, 0, +1\}$  en el  $3^2$  y  $X_j \in \{-\alpha, -1, 0, +1, \alpha\}$  en el DCC, es:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{11} X_1^2 + \beta_{22} X_2^2 + E, E_i \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, \sigma^2)$$

Las réplicas en el punto central permiten

- 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 en los puntos factoriales.
- Obtener una estimación de varianza basada en el error puro.
- Detectar la presencia de curvatura en al menos uno de los factores estudiados. Esta curvatura son los efectos cuadráticos  $A^2$ ,  $B^2$ , etc.

### Nota 1.1

*Si se detecta curvatura el experimento se aumenta con más puntos experimentales para poder estudiarla en detalle (diseños-modelos de superficies de respuesta de segundo orden). No se utiliza de entrada un experimento para estudiar la curvatura, pues si ésta no existe, se estaría desperdiciando recursos (Gutiérrez y de la Vara Salazar, 2012).*

# Contenido

## 1 Características

## 2 Procedimiento de prueba para detectar curvatura

- Caso 1
- Caso 2
- Caso 3

## 3 Ejemplo

# Procedimiento de prueba para detectar curvatura

Tenemos dos situaciones:

- 1 Cuando en los puntos factoriales no se replica (solo una observación por tratamiento factorial) mientras que en el punto central se tiene  $n_c$  réplicas.
  - **Caso 1:** Se han corrido en un mismo experimento los tratamientos factoriales y las réplicas del punto central.
  - **Caso 2:** Previo a la evaluación de curvatura, se ha procedido a la eliminación de efectos en el modelo saturado para construir un SSE aproximado.
- 2 **Caso 3:** Cuando existen replicaciones en los puntos factoriales y en el punto central.

Veamos cada caso.



## Caso 1

*El MRLM contempla todos los  $2^k - 1$  efectos posibles en el  $2^k$ , como en el MRLM del  $2^k$  no replicado, pero con los puntos al centro se han ganado grados de libertad para el error, de manera que el SSE del modelo de regresión se descompone en:*

$$SSE = SSE_{\text{puro}} + SS_{\text{cuad}}; \quad \text{g.l}(SSE) = \text{g.l}(SSE_{\text{puro}}) + \text{g.l}(SS_{\text{cuad}}) \quad (2)$$

Fuente	gl	SC	CM	F0	Valor P
Efecto cuadrático	1	$SS_{\text{cuad}}$	$SS_{\text{cuad}}$	$\frac{SS_{\text{cuad}}}{MSE_{\text{puro}}}$	$P(f_{1, n_c-1} > F_0)$
Error puro	$n_c - 1$	$SSE_{\text{puro}}$	$MSE_{\text{puro}}$		
Error	$n_c$	SSE	$MSE = SSE/n_c$		

$$MSE_{\text{puro}} = \frac{\sum_{i \in \text{centro}} (Y_i - \bar{Y}_c)^2}{n_c - 1} = \text{varianza muestral obs. punto central} \quad (3)$$

$$SS_{\text{cuad}} = \frac{n_f n_c (\bar{Y}_f - \bar{Y}_c)^2}{n_f + n_c} \quad (4)$$

con  $\bar{Y}_f$  el promedio de las obs. de los  $2^k$  tratamientos factoriales,  $n_f = 2^k$  total de obs. en puntos factoriales;  $\bar{Y}_c$  el promedio de las obs. en el punto central.  $N = n_f + n_c$ , el total obs. en el experimento.

## El test a realizar es

$$H_0 : \sum_{j=1}^k \beta_{jj} = 0 \quad \text{vs.} \quad H_1 : \sum_{j=1}^k \beta_{jj} \neq 0, \quad (5)$$

donde  $\beta_{jj}$  son los parámetros de todos posibles términos cuadráticos

### Nota 2.1

- El estadístico  $F_0 = \frac{SS_{cuad}}{MSE_{puro}}$  mide la distancia estadística entre los promedios muestrales  $\bar{Y}_f$  y  $\bar{Y}_c$ , lo que indica que se está probando también

$$H_0 : \mu_f = \mu_c \quad \text{vs} \quad H_1 : \mu_f \neq \mu_c, \quad (6)$$

con  $\mu_f$  y  $\mu_c$  las medias poblacionales en los puntos factoriales y en el centro, respectivamente.

- Por otro lado, con las variables codificadas, se tiene que  $\sum_{j=1}^k \beta_{jj} X_j^2 = \sum_{j=1}^k \beta_{jj}$ , es decir reúne a todos los posibles efectos cuadráticos sobre la respuesta media, de modo que el  $SS_{cuad}$  mide la contribución combinada a la variabilidad total de de estos posibles efectos cuadráticos.

## Caso 2

*El MRLM contempla solo efectos que quedan después de la depuración del modelo saturado, de modo que las sumas de cuadrados de los efectos eliminados se han ido para el término de error así como sus grados de libertad. Además se han recolectado posteriormente  $n_c$  observaciones en el punto central. Entonces el SSE del modelo de regresión se descompone en:*

$$SSE = SSE_{\text{puro}} + SS_{\text{cuad}} + SS_{\text{LOF}}; \quad g.l(SSE) = g.l(SSE_{\text{puro}}) + g.l(SS_{\text{cuad}}) + g.l(SS_{\text{LOF}}) \quad (7)$$

Fuente	gl	SC	CM	F0	Valor P
Carencia de ajuste	$df_{\text{LOF}}$	$SS_{\text{LOF}}$	$MS_{\text{LOF}}$	$\frac{MS_{\text{LOF}}}{MSE_{\text{puro}}}$	$P(f_{df_{\text{LOF}}, n_c-1} > F_0)$
Efecto cuadrático	1	$SS_{\text{cuad}}$	$SS_{\text{cuad}}$	$\frac{SS_{\text{cuad}}}{MSE_{\text{puro}}}$	$P(f_{1, n_c-1} > F_0)$
Error puro	$n_c - 1$	$SSE_{\text{puro}}$	$MSE_{\text{puro}}$		
Error	$dfe = n_c + df_{\text{LOF}}$	SSE	$MSE = SSE/dfe$		

donde las SC y gl de los efectos cuadráticos y del error puro son como en el caso previo, en tanto que,

$$SS_{\text{LOF}} = \text{suma de las SC de todos los efectos enviados al error} \quad (8)$$

$$df_{\text{LOF}} = \text{suma de grados de libertad de todos los efectos enviados al error} \quad (9)$$

En este caso son dos pruebas a realizar:

- **Test de carencia de ajuste por efectos retirados del MRLM**

$H_0$  : No hay carencia de ajuste por efectos enviados al error

$H_1$  : Hay carencia de ajuste por al menos uno de los efectos enviado al error  
(10)

Se prueba con el estadístico  $F_0 = \frac{MS_{LOF}}{MSE_{\text{puro}}} \sim f_{df_{LOF}, n_c - 1}$ .

- **Test de carencia de ajuste por curvatura:** Es el mismo test enunciado en la ecuación (5) y se prueba con el estadístico  $F_0 \frac{SS_{\text{cuad}}}{MSE_{\text{puro}}} \sim f_{1, n_c - 1}$ .

## Caso 3

*Hay replicas en los tratamientos factoriales y en el punto central, por tanto es posible tener una estimación de  $\sigma^2$  independiente del modelo y con grados de libertad suficientes. Si en el MRLM se tienen todos los efectos posibles, entonces, su SSE descompone en:*

$$SSE = SSE_{\text{puro}} + SS_{\text{cuad}}; \quad g.l(SSE) = g.l(SSE_{\text{puro}}) + g.l(SS_{\text{cuad}}) \quad (11)$$

Fuente	gl	SC	CM	F0	Valor P
Efecto cuadrático	1	$SS_{\text{cuad}}$	$SS_{\text{cuad}}$	$\frac{SS_{\text{cuad}}}{MSE_{\text{puro}}}$	$P(f_{1, dfe_{\text{puro}}} > F_0)$
Error puro	$dfe_{\text{puro}}$	$SSE_{\text{puro}}$	$MSE_{\text{puro}}$		
Error	$dfe = dfe_{\text{puro}} + 1$	SSE	$MSE = SSE/dfe$		

$$MSE_{\text{puro}} = \frac{SSE_{\text{puro}}}{dfe_{\text{puro}}} = \frac{\sum_{i=1}^{2^{k+1}} (n_i - 1) S_i^2}{\sum_{i=1}^{2^{k+1}} (n_i - 1)} = \text{estimador "pooled" de varianza} \quad (12)$$

$$SS_{\text{cuad}} = \frac{n_f n_c (\bar{Y}_f - \bar{Y}_c)^2}{n 2^k + n_c} = \frac{n 2^k n_c (\bar{Y}_f - \bar{Y}_c)^2}{n 2^k + n_c} \quad (13)$$

pues ahora  $n_f = n 2^k$ , siendo  $n$  el número de réplicas en los puntos factoriales.

con

- $\bar{Y}_f$  el promedio de las  $n_f = n2^k$  obs. de los  $2^k$  tratamientos factoriales
- $\bar{Y}_c$  el promedio de las  $n_c$  obs. en el punto central,
- $S_i^2$  la varianza muestral de las  $n_i$  observaciones en el  $i$ -ésimo tratamiento replicado, tratamientos enumerados simplemente con  $i = 1, 2, \dots, 2^k + 1$ , contando los puntos factoriales y el punto central, con  $n_i = n$  en los puntos factoriales y  $n_i = n_c$  en el punto central.

El test de hipótesis a realizar sería de nuevo como en la ecuación (5), pero con estadístico

$F_0 = \frac{SS_{\text{cuad}}}{MSE_{\text{puro}}} \sim f_{1, dfe_{\text{puro}}}$ , con  $dfe_{\text{puro}} = \sum_{i=1}^{2^k+1} (n_i - 1)$  y  $MSE_{\text{puro}}$  dado en la ecuación (12). Pero si se retiran efectos del MRLM, entonces, SSE del modelo de regresión se descompone en:

$$SSE = SSE_{\text{puro}} + SS_{\text{cuad}} + SS_{\text{LOF}}; \quad g.l(SSE) = g.l(SSE_{\text{puro}}) + g.l(SS_{\text{cuad}}) + g.l(SS_{\text{LOF}}) \quad (14)$$

Fuente	gl	SC	CM	F0	Valor P
Carencia de ajuste	$df_{\text{LOF}}$	$SS_{\text{LOF}}$	$MS_{\text{LOF}}$	$\frac{MS_{\text{LOF}}}{MSE_{\text{puro}}}$	$P(f_{df_{\text{LOF}}, dfe_{\text{puro}}} > F_0)$
Efecto cuadrático	1	$SS_{\text{cuad}}$	$SS_{\text{cuad}}$	$\frac{SS_{\text{cuad}}}{MSE_{\text{puro}}}$	$P(f_{1, dfe_{\text{puro}}} > F_0)$
Error puro	$dfe_{\text{puro}}$	$SSE_{\text{puro}}$	$MSE_{\text{puro}}$		
Error	$dfe$	SSE	$MSE = SSE/dfe$		
$dfe = dfe_{\text{puro}} + df_{\text{LOF}} + 1$					

## Luego, se realizan las dos pruebas

- **Test de carencia de ajuste por efectos retirados del MRLM**

$H_0$  : No hay carencia de ajuste por efectos enviados al error

$H_1$  : Hay carencia de ajuste por al menos uno de los efectos enviado al error

Se prueba con el estadístico  $F_0 = \frac{MS_{LOF}}{MSE_{puro}} \sim f_{df_{LOF}, dfe_{puro}}$ ,

- **Test de carencia de ajuste por curvatura:** Es el mismo test enunciado en la ecuación (5) y se prueba con el estadístico  $F_0 \frac{SS_{cuad}}{MSE_{puro}} \sim f_{1, dfe_{puro}}$ ,

con  $dfe_{puro} = \sum_{i=1}^{2^k+1} (n_i - 1)$ , el  $MSE_{puro}$  dado en la ecuación (12) y el  $SS_{cuad}$  según la ecuación (13).

# Contenido

- 1 Características
- 2 Procedimiento de prueba para detectar curvatura
- 3 Ejemplo**



# Ejemplo

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 influyen la tasa de filtración de este producto. Se consideran los siguientes 4 factores:

- A: Temperatura
- B: Presión
- C: Concentración de formaldehído
- D: Tasa de agitación.

Cada factor es fijado en dos niveles (bajo y alto) y los  $2^k = 16$  tratamientos son observados una sola vez ( $n = 1$  réplica por tratamiento). Posteriormente, se adicionan cuatro puntos centrales ( $n_C = 4$ ) a este experimento, es decir, se replica cuatro veces el tratamiento con los cuatro factores fijos en un nivel intermedio. El total de observaciones ( $N = n2^k + n_C = 20$ ) 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  $0$ ).

Trabajaremos aplicando primero el caso 1 y luego el caso 2. El modelo de regresión preliminar es,

$$Y = \beta_0 + \sum_{j=1}^4 \beta_j X_j + \beta_{12} X_1 X_2 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 + \beta_{23} X_2 X_3 + \beta_{24} X_2 X_4$$

$$+ \beta_{123} X_1 X_2 X_3 + \beta_{124} X_1 X_2 X_4 + \beta_{134} X_1 X_3 X_4 + \beta_{234} X_2 X_3 X_4 + \beta_{1234} X_1 X_2 X_3 X_4 + E, E_i \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, \sigma^2)$$

Código Yates	$Y_j$	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
Prom. puntos factoriales con $n_f = 16$	$\bar{Y}_f = 70.0625$				
	$Y_j$	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
Prom. puntos centrales con $n_C = 4$	$\bar{Y}_C = 70.750$				
Prom. de las $N = 20$ obs.	$\bar{Y} = 70.200$				

**Bajo el caso 1: Se corre el MRLM con todos los  $2^k - 1 = 15$  posibles efectos y usando todos los  $N = 20$  datos. Se puede ajustar mediante contrastes de totales de tratamientos, donde solo entra la información de los 16 puntos factoriales, pero el SST considera los  $N = 20$  datos y el SSE se haya restando al SST las SS de contrastes de totales asociados a cada efecto. Recuerde que los  $\hat{\beta}$  son la mitad de los efectos estimados  $\hat{\alpha}$ .**

Mediante ajuste directo del MRLM con las  $N = 20$  observaciones, en R, obtenemos (A, B, C, D son las  $X_j$  en el programa R usado):

```
> modelo1=lm(Y~A*B*C*D)
```

```
> summary(modelo1)
```

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		

Observe que  $\hat{\beta}_0 = \bar{Y} = 70.200$ , el promedio de todos los 20 datos.

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

$$MSE_{\text{puro}} = \frac{\sum_{i \in \text{centro}} (Y_i - \bar{Y}_c)^2}{n_c - 1} = 16.25 \text{ (varianza muestral de los puntos al centro)}$$

$$SSE_{\text{puro}} = (n_c - 1) MSE_{\text{puro}} = 3 \times 16.25 = 48.75$$

$$F_0 = \frac{SS_{\text{cuad}}}{MSE_{\text{puro}}} = 0.0931; P(f_{1, n_c - 1} > F_0) = P(f_{1, 3} > 0.0931) = 0.7802$$

SSE = 50.2625 el SSE de la regresión con 4 grados de libertad

Fuente	gl	SC	CM	F0	Valor P
Efecto cuadrático	1	1.5125	1.5125	0.0931	0.7802
Error puro	3	48.7500	16.2500		
Error	4	50.2625	12.5656		

Entonces en la prueba  $H_0 : \sum_{j=1}^4 \beta_{jj} = 0$  vs.  $H_1 : \sum_{j=1}^4 \beta_{jj} \neq 0$ , no se rechaza  $H_0$ , luego no se detectó efectos de curvatura.

*Como hay varios efectos no significativos, pudiéramos reducir el modelo (usando un nivel de significancia de 0.05) aplicando el principio de jerarquía:* 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, obtenemos el siguiente modelo predictivo:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 + E, E_i \stackrel{\text{iid}}{\sim} N(0, \sigma^2)$$

En este modelo debemos verificar que no haya carencia de ajuste por los efectos enviados al error. Vemos su ajuste por MCO.

```

> modelo1b=lm(Y~A+C+D+A:C+A:D)
> summary(modelo1b)
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

> 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

```

De los 15 efectos se enviaron al error 10, cada uno con una SS de un grado de libertad, luego, la suma de las SS de estos efectos, simplemente es igual a la diferencia entre el SSE del modelo reducido y el SSE del modelo preliminar,

$$SS_{LOF} = 245.3875 - 50.2625 = 195.125, df_{LOF} = 14 - 4 = 10$$

$$F_{LOF} = \frac{MS_{LOF}}{MSE_{puro}} = 1.200769, P(f_{df_{LOF}, n_c - 1} > F_{LOF}) = P(f_{10, 3} > 1.200769) = 0.4941852$$

Observe además que no se alteran las estimaciones de los parámetros que quedaron en el modelo ni las correspondientes SS en el anova para esos términos.

Fuente	gl	SC	CM	F0	Valor P
Carencia de ajuste	10	195.1250	19.5125	1.2008	0.4942
Efecto cuadrático	1	1.5125	1.5125	0.0931	0.7802
Error puro	3	48.7500	16.2500		
Error	14	245.3875	17.5277		

Entonces en el siguiente test no se rechaza  $H_0$ , y por tanto no hay carencia de ajuste debido a efectos eliminados:

$H_0$  : No hay carencia de ajuste por efectos enviados al error

$H_1$  : Hay carencia de ajuste por al menos uno de los efectos enviado al error

**Bajo el caso 2:** Primero se corre el MRLM saturado (sin usar los puntos al centro), con el análisis pareto y gráfico de Daniel escogemos efectos importantes y reducimos el modelo preliminar. En R, los objetos Yf, Af, Bf, Cf, Df, son las variables sin considerar las obs. del punto central:

```
> modelosatur=lm(Yf~Af*Bf*Cf*Df)
```

```
> summary(modelosatur)
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t )
(Intercept)	70.0625	NaN	NaN	NaN
Af	10.8125	NaN	NaN	NaN
Bf	1.5625	NaN	NaN	NaN
Cf	4.9375	NaN	NaN	NaN
Df	7.3125	NaN	NaN	NaN
Af:Bf	0.0625	NaN	NaN	NaN
Af:Cf	-9.0625	NaN	NaN	NaN
Bf:Cf	1.1875	NaN	NaN	NaN
Af:Df	8.3125	NaN	NaN	NaN
Bf:Df	-0.1875	NaN	NaN	NaN
Cf:Df	-0.5625	NaN	NaN	NaN
Af:Bf:Cf	0.9375	NaN	NaN	NaN
Af:Bf:Df	2.0625	NaN	NaN	NaN
Af:Cf:Df	-0.8125	NaN	NaN	NaN
Bf:Cf:Df	-1.3125	NaN	NaN	NaN
Af:Bf:Cf:Df	0.6875	NaN	NaN	NaN

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

```
> anova(modelosatur)
```

Analysis of Variance Table

Response: Yf

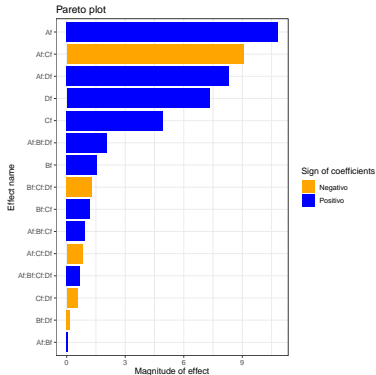
	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
Af	1	1870.56	1870.56	NaN	NaN
Bf	1	39.06	39.06	NaN	NaN
Cf	1	390.06	390.06	NaN	NaN
Df	1	855.56	855.56	NaN	NaN
Af:Bf	1	0.06	0.06	NaN	NaN
Af:Cf	1	1314.06	1314.06	NaN	NaN
Bf:Cf	1	22.56	22.56	NaN	NaN
Af:Df	1	1105.56	1105.56	NaN	NaN
Bf:Df	1	0.56	0.56	NaN	NaN
Cf:Df	1	5.06	5.06	NaN	NaN
Af:Bf:Cf	1	14.06	14.06	NaN	NaN
Af:Bf:Df	1	68.06	68.06	NaN	NaN
Af:Cf:Df	1	10.56	10.56	NaN	NaN
Bf:Cf:Df	1	27.56	27.56	NaN	NaN
Af:Bf:Cf:Df	1	7.56	7.56	NaN	NaN
Residuals	0	0.00	NaN		

Warning message:

In anova.lm(modelosatur) :

ANOVA F-tests on an essentially perfect fit are unreliable

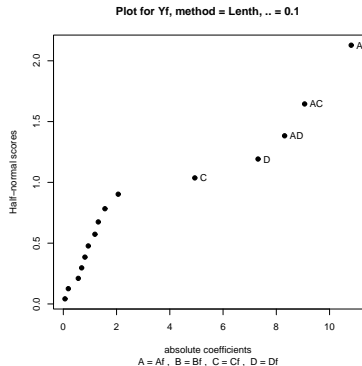
Observe que  $\hat{\beta}_0 = \bar{Y}_f = 70.0625$ , el promedio de las  $n_f = 16$  observaciones en los puntos factoriales. A continuación haremos la selección de efectos con gráficos de pareto y de probabilidad media norma (con método Lenth a un nivel de significancia de 0.1).



```
paretoPlot(modelosatur,negative=c("Negativo","orange"),
           positive=c("Positivo","blue"))
```

El pareto y el gráfico de probabilidad media normal nos indica que los efectos importantes son (verificar que se cumpla principio de jerarquía al conservar interacciones), A, C, D, AC y AD, quedando entonces el modelo predictivo como

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_3 X_3 + \beta_4 X_4 + \beta_{13} X_1 X_3 + \beta_{14} X_1 X_4 + E, E_i \stackrel{iid}{\sim} N(0, \sigma^2)$$



```
> halfnormal(modelosatur,code=T,alpha=0.1,linewidth=2,linecol=2,
+             err.points=T,pch.set = c(19, 16, 8))
```

Significant effects (alpha=0.1, Lenth method):

```
A A:C A:D D C
A AC AD D C
```

*El ajuste del modelo predictivo, sin las obs. del punto central, se muestra a continuación,*

```
> modelo1c=lm(Yf~Af+Cf+Df+Af:Cf+Af:Df)
```

```
> summary(modelo1c)
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t )
(Intercept)	70.062	1.104	63.444	2.30e-14 ***
Af	10.812	1.104	9.791	1.93e-06 ***
Cf	4.938	1.104	4.471	0.0012 **
Df	7.313	1.104	6.622	5.92e-05 ***
Af:Cf	-9.063	1.104	-8.206	9.41e-06 ***
Af:Df	8.312	1.104	7.527	2.00e-05 ***

---

Residual standard error: 4.417 on 10 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.966, Adjusted R-squared: 0.9489

F-statistic: 56.74 on 5 and 10 DF, p-value: 5.14e-07

```
> anova(modelo1c)
```

Analysis of Variance Table

Response: Yf

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)
Af	1	1870.56	1870.56	95.865	1.928e-06 ***
Cf	1	390.06	390.06	19.990	0.001195 **
Df	1	855.56	855.56	43.847	5.915e-05 ***
Af:Cf	1	1314.06	1314.06	67.345	9.414e-06 ***
Af:Df	1	1105.56	1105.56	56.659	1.999e-05 ***
Residuals	10	195.12	19.51		

*Al incluir las observaciones del punto central en el ajuste de este modelo predictivo, obtenemos los resultados R ya presentados. Compare el cambio en la estimación del intercepto, el SSE, el MSE, sus grados de libertad, mientras que el resto de resultados no cambia.*

```
> modelo1b=lm(Y~A+C+D+A:C+A:D)
```

```
> summary(modelo1b)
```

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

```
> 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		

Con estos últimos resultados, realizamos tanto el test de curvatura como el de carencia de ajuste por efectos eliminados.

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

$$MSE_{\text{puro}} = \frac{\sum_{i \in \text{centro}} (Y_i - \bar{Y}_c)^2}{n_c - 1} = 16.25 \text{ (varianza muestral de los puntos al centro)}$$

$$SSE_{\text{puro}} = (n_c - 1) MSE_{\text{puro}} = 3 \times 16.25 = 48.75$$

$$F_0 = \frac{SS_{\text{cuad}}}{MSE_{\text{puro}}} = 0.0931; P(f_{1, n_c - 1} > F_0) = P(f_{1, 3} > 0.0931) = 0.7802$$

$SSE = 245.3875$ , el SSE de la regresión del modelo predictivo, con 14 grados de libertad

$$SS_{LOF} = SSB + SS(AB) + SS(BC) + SS(BD) + SS(CD) + SS(ABC) + SS(ABD) + SS(ACD) + SS(BCD) + SS(ABCD) = 195.1250$$

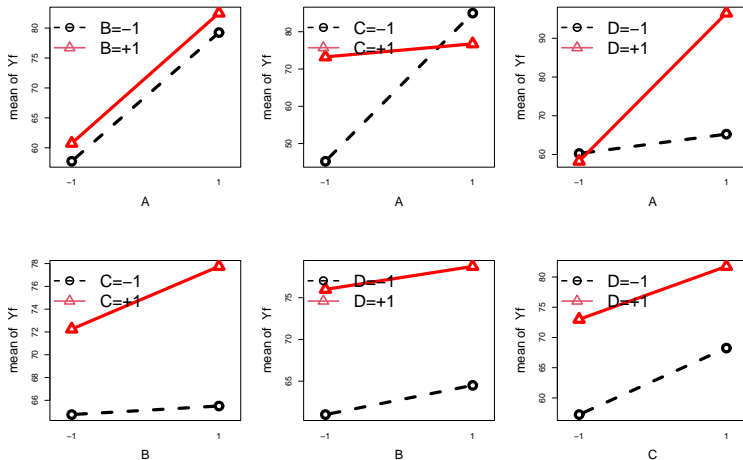
Fuente	gl	SC	CM	F0	Valor P
Carencia de ajuste	10	195.1250	19.5125	1.2008	0.4942
Efecto cuadrático	1	1.5125	1.5125	0.0931	0.7802
Error puro	3	48.7500	16.2500		
Error	14	245.3875	17.5277		

Entonces en la prueba  $H_0 : \sum_{j=1}^4 \beta_{jj} = 0$  vs.  $H_1 : \sum_{j=1}^4 \beta_{jj} \neq 0$ , no se rechaza  $H_0$ , luego no se detectó efectos de curvatura y en el siguiente test no se rechaza  $H_0$ , y por tanto no hay carencia de ajuste debido a efectos eliminados:

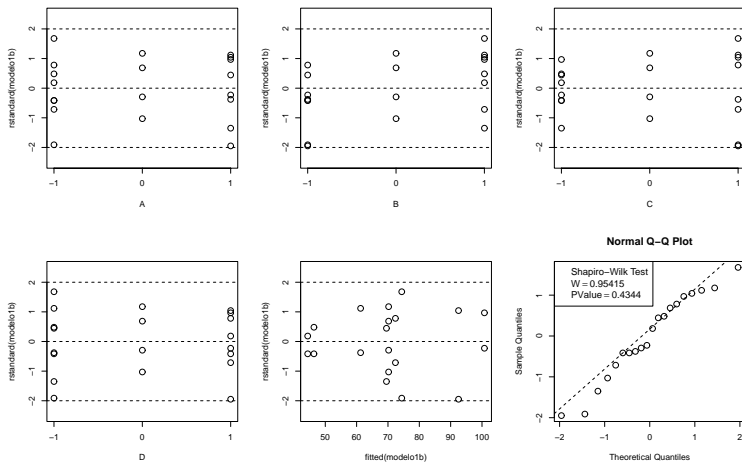
$H_0$  : No hay carencia de ajuste por efectos enviados al error

$H_1$  : Hay carencia de ajuste por al menos uno de los efectos enviado al error





**Figura 1:** Gráficos de interacciones dobles. Se observa que solo parecen ser significativas las interacciones AC y AD. Al parecer los efectos del factor B pueden no ser detectados como significativos.



**Figura 2:** Gráficos de residuos estudentizados en el modelo predictivo final, ajustado con todas las  $N = 20$  obs. incluyendo las del punto central.

## Código R usado

```
library(rsm);library(pid)
library(daewr);library(FrF2)
#La variable puntoCentral es una indicadora para
#identificar las obs. del punto central
datos=data.frame(scan(what=list(Y=0,A=0,B=0,C=0,D=0,
                               puntoCentral="")))
```

```
45 -1 -1 -1 -1 0
71 1 -1 -1 -1 0
48 -1 1 -1 -1 0
65 1 1 -1 -1 0
68 -1 -1 1 -1 0
60 1 -1 1 -1 0
80 -1 1 1 -1 0
65 1 1 1 -1 0
43 -1 -1 -1 1 0
100 1 -1 -1 1 0
45 -1 1 -1 1 0
104 1 1 -1 1 0
75 -1 -1 1 1 0
86 1 -1 1 1 0
70 -1 1 1 1 0
96 1 1 1 1 0
73 0 0 0 0 1
75 0 0 0 0 1
66 0 0 0 0 1
69 0 0 0 0 1
```

```
attach(datos)
##modelo de regresión con todos los efectos ppales
#y de interacciones y las obs. en el punto central
modelo1=lm(Y~A*B*C*D)
summary(modelo1)
anova(modelo1)
```

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

```
shapiro.test(residuals(modelo1b))
win.graph(width=12,height=8)
layout(rbind(c(1,1,2,2,3,3),c(4,4,5,5,6,6)))
stripchart(rstandard(modelo1b)~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(modelo1b)~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(modelo1b)~C,vertical=TRUE,
            ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="C")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
stripchart(rstandard(modelo1b)~D,vertical=TRUE,
            ylim=c(-2.5,2.5),pch=1,cex=1.5,xlab="D")
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
plot(fitted(modelo1b),rstandard(modelo1b),
      ylim=c(-2.5,2.5),cex=1.5)
abline(h=c(-2,0,2),lty=2)
qqnorm(rstandard(modelo1b),cex=1.5)
qqline(rstandard(modelo1b),lty=2)
legend("topleft",legend=c("Shapiro-Wilk Test",
                           expression(W==0.95415),expression(PValue==0.4344)),cex=1.1)
#-----
#Depurando primero sobre modelo factorial no replicado
#-----
#Generando las variables Xj y Y sin el punto central
#esto solo para construir los gráficos de interacción
Af=A[puntoCentral==0]
Bf=B[puntoCentral==0]
Cf=C[puntoCentral==0]
Df=D[puntoCentral==0]
Yf=Y[puntoCentral==0]
modelosatur=lm(Yf~Af*Bf*Cf*Df)
summary(modelosatur)
anova(modelosatur)
```

```
halfnormal(modelosatur,code=T,alpha=0.1,linewidth=2,
            linecol=2,err.points=T,pch.set = c(19, 16, 8))
paretoPlot(modelosatur,negative=c("Negativo","orange"),
            positive=c("Positivo","blue"))
```

## Código R usado (Cont.)

```
#Modelo reducido sólo con efectos significativos
#y ajustado únicamente con los puntos factoriales
modelo1c=lm(Yf~Af+Cf+Df+Af:Cf+Af:Df)
summary(modelo1c)
anova(modelo1c)
```

```
#-----
#Se correría luego el modelo predictivo con todos los
datos: es el modelo1b. El análisis de residuos se
#hace en el modelo1b
#-----
```

```
#Los graficos de interacción se hacen sin
#las obs. del punto central
win.graph(width=12,height=8)
layout(rbind(c(1,1,2,2,3,3),c(4,4,5,5,6,6)))
interaction.plot(Af,Bf,Yf,type="b",pch=c(1,2),xlab="A",
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)
```

```
interaction.plot(Af,Cf,Yf,type="b",pch=c(1,2),
col=c("black","red"),xlab="A",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)
```

```
interaction.plot(Af,Df,Yf,type="b",pch=c(1,2),
col=c("black","red"),xlab="A",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)
```

```
interaction.plot(Bf,Cf,Yf,type="b",pch=c(1,2),
col=c("black","red"),xlab="B",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)
```

```
interaction.plot(Bf,Df,Yf,type="b",pch=c(1,2),
col=c("black","red"),xlab="B",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)
```

```
interaction.plot(Cf,Df,Yf,type="b",pch=c(1,2),
col=c("black","red"),xlab="C",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)
```

```
detach(datos)
```

- Dean, A., Voss, D., and Draguljić, D. (2017). *Design and Analysis of Experiments*, 2<sup>nd</sup> Edition. Springer.
- Gutiérrez Pulido, H. y de la Vara Salazar, R. (2012). *Análisis y Diseño de Experimentos*, 3<sup>a</sup> Edición. McGraw-Hill.
- Kuehl, R. O. (2001). *Diseño de Experimentos. Principios Estadísticos de Diseño y Análisis de Investigación*, 2<sup>a</sup> Edición. Thomson Learning.
- Kutner, M. H., Nachtsheim, C. J., Neter, J., and Li, W. (2005). *Applied Linear Statistical Models*, 5<sup>th</sup> Edition. McGraw-Hill Irwin.
- Montgomery, D. C. (2020). *Design and Analysis of Experiments*, 10<sup>th</sup> Edition. John Wiley & Sons, Inc.