

Metodologia sperimentale per le scienze agrarie

Andrea Onofri e Dario Sacco

Update: v. 1.0 (15/03/2021), compil. 2021-04-27

Indice

Premessa	9
Obiettivi	9
Organizzazione	9
Software statistico	9
The authors	9
Ringraziamenti	9
1 Scienza e pseudo-scienza	10
1.1 Scienza = dati	12
1.2 Dati ‘buoni’ e ‘cattivi’	12
1.3 Dati ‘buoni’ e metodi ‘buoni’	12
1.4 Il principio di falsificazione	12
1.5 Falsificare un risultato	12
1.6 Elementi fondamentali del disegno sperimentale	12
1.6.1 Controllo degli errori	12
1.6.2 Replicazione	12
1.6.3 Randomizzazione	12
1.6.4 Esperimenti invalidi	12
1.7 Chi valuta se un esperimento è attendibile?	12
1.8 Conclusioni	12
1.9 Altre letture	12
2 Progettare un esperimento	13
2.1 Gli elementi della ricerca	15
2.2 Ipotesi scientifica → obiettivo dell’esperimento	15
2.3 Identificazione dei fattori sperimentali	15
2.3.1 Esperimenti (multi-)fattoriali	15
2.3.2 Controllo o testimone	15
2.4 Le unità sperimentali	15
2.5 Allocazione dei trattamenti	15

2.6	Le variabili sperimentali	15
2.6.1	Variabili nominali (categoriche)	15
2.6.2	Variabili ordinali	15
2.6.3	Variabili quantitative discrete	15
2.6.4	Variabili quantitative continue	15
2.6.5	Rilievi visivi e sensoriali	15
2.6.6	Variabili di confondimento	15
2.7	Esperimenti di campo	15
2.7.1	Scegliere il campo	15
2.7.2	Le unità sperimentali in campo	15
2.7.3	Numero di repliche	15
2.7.4	La mappa di campo	15
2.7.5	Lay-out sperimentale	15
2.8	Altre letture	15
3	Richiami di statistica descrittiva	16
3.1	Dati quantitativi	17
3.1.1	Indicatori di tendenza centrale	17
3.1.2	Indicatori di dispersione	17
3.1.3	Incertezza delle misure derivate	17
3.1.4	Relazioni tra variabili quantitative: correlazione	17
3.2	Dati qualitativi	17
3.2.1	Distribuzioni di frequenze e classamento	17
3.2.2	Statistiche descrittive per le distribuzioni di frequenze	17
3.2.3	Distribuzioni di frequenza bivariate: le tabelle di con- tingenze	17
3.2.4	Connessione	17
3.3	Statistiche descrittive con R	17
3.3.1	Descrizione dei sottogruppi	17
3.3.2	Distribuzioni di frequenze e classamento	17
3.3.3	Connessione	17
3.4	Altre letture	17
4	Modelli statistici ed analisi dei dati	18
4.1	Verità ‘vera’ e modelli deterministici	19
4.2	Genesi deterministica delle osservazioni sperimentali	19
4.3	Errore sperimentale e modelli stocastici	19
4.3.1	Funzioni di probabilità	19
4.3.2	Funzioni di densità	19
4.3.3	La distribuzione normale (curva di Gauss)	19
4.4	Modelli ‘a due facce’	19

4.5	E allora?	19
4.6	Le simulazioni Monte Carlo	19
4.7	Analisi dei dati e ‘model fitting’	19
4.8	Modelli stocastici non-normali	19
4.9	Altre letture	19
5	Stime ed incertezza	20
5.1	Esempio: una soluzione erbicida	22
5.1.1	Analisi dei dati: stima dei parametri	22
5.1.2	La ‘sampling distribution’	22
5.1.3	L’errore standard	22
5.2	Stima per intervallo	22
5.3	L’intervallo di confidenza	22
5.4	Qual è il senso dell’intervallo di confidenza?	22
5.5	Come presentare i risultati degli esperimenti	22
5.6	Alcune precisazioni	22
5.6.1	Campioni numerosi e non	22
5.6.2	Popolazioni gaussiane e non	22
5.7	Analisi statistica dei dati: riassunto del percorso logico	22
5.8	Da ricordare	22
5.9	Per approfondire un po’...	22
5.10	Coverage degli intervalli di confidenza	22
5.10.1	Intervalli di confidenza per fenomeni non-normali	22
5.11	Altre letture	22
6	Decisioni ed incertezza	23
6.1	Confronto tra due medie: il test t di Student	24
6.1.1	L’ipotesi nulla e alternativa	24
6.1.2	La statistica T	24
6.1.3	Simulazione Monte Carlo	24
6.1.4	Soluzione formale	24
6.1.5	Interpretazione del P-level	24
6.1.6	Tipologie alternative di test t di Student	24
6.2	Confronto tra due proporzioni: il test χ^2	24
6.2.1	Simulazione Monte Carlo	24
6.2.2	Soluzione formale	24
6.3	Conclusioni e riepilogo	24
6.4	Altre letture	24
7	Modelli ANOVA ad una via	25
7.1	Caso-studio: confronto tra erbicidi in vaso	27

7.2	Descrizione del dataset	27
7.3	Definizione di un modello lineare	27
7.4	Parametrizzazione del modello	27
7.5	Assunzioni di base	27
7.6	Fitting del modello: metodo manuale	27
7.6.1	Stima dei parametri	27
7.6.2	Calcolo dei residui	27
7.6.3	Stima di σ	27
7.7	Scomposizione della varianza	27
7.8	Test d'ipotesi	27
7.9	Inferenza statistica	27
7.10	Fitting del modello con R	27
7.11	Medie marginali attese	27
7.12	Per concludere	27
7.13	Altre letture	27
8	La verifica delle assunzioni di base	28
8.1	Violazioni delle assunzioni di base	29
8.2	Procedure diagnostiche	29
8.3	Analisi grafica dei residui	29
8.3.1	Grafico dei residui contro i valori attesi	29
8.3.2	QQ-plot	29
8.4	Test d'ipotesi	29
8.5	Risultati contraddittori	29
8.6	'Terapia'	29
8.6.1	Correzione/Rimozione degli outliers	29
8.6.2	Correzione del modello	29
8.6.3	Trasformazione della variabile indipendente	29
8.6.4	Impiego di metodiche statistiche avanzate	29
8.6.5	Trasformazioni stabilizzanti	29
8.7	Esempio 1	29
8.8	Esempio 2	29
8.9	Altre letture	29
9	Contrasti e confronti multipli	30
9.1	Esempio	31
9.2	I contrasti	31
9.3	I contrasti con R	31
9.4	I confronti multipli a coppie (pairwise comparisons)	31
9.5	Display a lettere	31
9.6	Tassi di errore per confronto e per esperimento	31

9.7	Aggiustamento per la molteplicità	31
9.8	E le classiche procedure di confronto multiplo?	31
9.9	Consigli pratici	31
9.10	Altre letture	31
10	Modelli ANOVA con fattori di blocco	32
10.1	Caso-studio: confronto tra erbicidi in campo	32
10.2	Definizione di un modello lineare	34
10.3	Stima dei parametri	34
10.3.1	Coefficienti del modello	34
10.3.2	Stima di σ	37
10.4	Scomposizione della varianza	37
10.5	Adattamento del modello con R	39
10.6	Disegni a quadrato latino	41
10.7	Caso studio: confronto tra metodi costruttivi	41
10.8	Definizione di un modello lineare	42
11	Modelli ANOVA a due vie	45
11.1	Il concetto di 'interazione'	46
11.2	Tipi di interazione	46
11.3	Caso-studio: interazione tra lavorazioni e diserbo chimico	46
11.4	Definizione del modello lineare	46
11.5	Stima dei parametri	46
11.6	Verifica delle assunzioni di base	46
11.7	Scomposizione delle varianze	46
11.8	Medie marginali attese	46
11.9	Calcolo degli errori standard (SEM e SED)	46
11.10	Medie marginali attese e confronti multipli con R	46
11.11	Per approfondire un po'....	46
11.11.1	Anova a due vie: scomposizione 'manuale' della varianza	46
12	La regressione lineare semplice	47
12.1	Caso studio: effetto della concimazione azotata al frumento	48
12.2	Analisi preliminari	48
12.3	Definizione del modello lineare	48
12.4	Stima dei parametri	48
12.5	Valutazione della bontà del modello	48
12.5.1	Valutazione grafica	48
12.5.2	Errori standard dei parametri	48
12.5.3	Test F per la mancanza d'adattamento	48

12.5.4	Test F per la bontà di adattamento e coefficiente di determinazione	48
12.6	Previsioni	48
12.7	Per approfondire un po'...	48
13	La regressione non-lineare	49
13.1	Caso studio: degradazione di un erbicida nel terreno	51
13.2	Scelta della funzione	51
13.3	Stima dei parametri	51
13.3.1	Linearizzazione della funzione	51
13.3.2	Approssimazione della vera funzione tramite una polinomiale in X	51
13.3.3	Minimi quadrati non-lineari	51
13.4	La regressione non-lineare con R	51
13.5	Verifica della bontà del modello	51
13.5.1	Analisi grafica dei residui	51
13.5.2	Test F per la mancanza di adattamento (approssimato)	51
13.5.3	Errori standard dei parametri	51
13.5.4	Coefficienti di determinazione	51
13.6	Funzioni lineari e nonlineari dei parametri	51
13.7	Previsioni	51
13.8	Gestione delle situazioni 'patologiche'	51
13.8.1	Trasformazione del modello	51
13.8.2	Trasformazione dei dati	51
13.9	Per approfondire un po'...	51
13.9.1	Riparametrizzazione delle funzioni non-lineari	51
13.9.2	Altre letture	51
14	Esercizi	52
14.1	Capitoli 1 e 2	54
14.1.1	Esercizio 1	54
14.2	Capitolo 3	54
14.2.1	Esercizio 1	54
14.2.2	Esercizio 2	54
14.2.3	Esercizio 3	54
14.3	Capitolo 4	54
14.3.1	Esercizio 1	54
14.3.2	Esercizio 2	54
14.3.3	Esercizio 3	54
14.3.4	Esercizio 4	54
14.3.5	Esercizio 5	54

14.3.6	Esercizio 6	54
14.3.7	Esercizio 7	54
14.3.8	Esercizio 8	54
14.4	Capitolo 5	54
14.4.1	Esercizio 1	54
14.4.2	Esercizio 2	54
14.4.3	Esercizio 3	54
14.4.4	Esercizio 4	54
14.4.5	Esercizio 5	54
14.5	Capitolo 6	54
14.5.1	Esercizio 1	54
14.5.2	Esercizio 2	54
14.5.3	Esercizio 3	54
14.5.4	Esercizio 4	54
14.5.5	Esercizio 5	54
14.5.6	Esercizio 6	54
14.5.7	Esercizio 7	54
14.5.8	Esercizio 8	54
14.5.9	Esercizio 9	54
14.5.10	Esercizio 10	54
14.6	Capitoli da 7 a 9	54
14.6.1	Esercizio 1	54
14.6.2	Esercizio 2	54
14.6.3	Esercizio 3	54
14.6.4	Esercizio 4	54
14.7	Capitolo 10	54
14.7.1	Esercizio 1	54
14.7.2	Esercizio 2	54
14.7.3	Esercizio 3	54
14.8	Capitoli 11 e 12	54
14.8.1	Esercizio 1	54
14.8.2	Esercizio 2	54
14.8.3	Esercizio 3	54
14.8.4	Esercizio 4	54
14.8.5	Esercizio 5	54
14.8.6	Esercizio 6	54
14.9	Capitolo 13	54
14.9.1	Esercizio 1	54
14.9.2	Esercizio 2	54
14.10	Capitolo 14	54
14.10.1	Esercizio 1	54

14.10.2 Esercizio 2	54
14.10.3 Esercizio 3	54
14.10.4 Esercizio 4	54
14.10.5 Esercizio 5	54
14.10.6 Esercizio 6	54
14.10.7 Esercizio 7	54
15 Appendice 1: breve introduzione ad R	55
Cosa è R?	56
Oggetti e assegnazioni	56
Costanti e vettori	56
Matrici	56
Dataframe	56
Quale oggetto sto utilizzando?	56
Operazioni ed operatori	56
Funzioni ed argomenti	56
Consigli per l'immissione di dati sperimentali	56
Immissione di numeri progressivi	56
Immissione dei codici delle tesi e dei blocchi	56
Immissione dei valori e creazione del dataframe	56
Leggere e salvare dati esterni	56
Alcune operazioni comuni sul dataset	56
Selezionare un subset di dati	56
Ordinare un vettore o un dataframe	56
Workspace	56
Script o programmi	56
Interrogazione di oggetti	56
Altre funzioni matriciali	56
Cenni sulle funzionalità grafiche in R	56
Altre letture	56

Premessa

Placeholder

Obiettivi

Organizzazione

Software statistico

The authors

Ringraziamenti

Capitolo 1

Scienza e pseudo-scienza

Placeholder

1.1 Scienza = dati

1.2 Dati ‘buoni’ e ‘cattivi’

1.3 Dati ‘buoni’ e metodi ‘buoni’

1.4 Il principio di falsificazione

1.5 Falsificare un risultato

1.6 Elementi fondamentali del disegno sperimentale

1.6.1 Controllo degli errori

1.6.2 Replicazione

1.6.3 Randomizzazione

1.6.4 Esperimenti invalidi

Cattivo controllo degli errori

‘Confounding’ e correlazione spuria

Pseudo-repliche e randomizzazione poco attenta

1.7 Chi valuta se un esperimento è attendibile?

1.8 Conclusioni

1.9 Altre letture

Capitolo 2

Progettare un esperimento

Placeholder

2.1 Gli elementi della ricerca

2.2 Ipotesi scientifica → obiettivo dell'esperimento

2.3 Identificazione dei fattori sperimentali

2.3.1 Esperimenti (multi-)fattoriali

2.3.2 Controllo o testimone

2.4 Le unità sperimentali

2.5 Allocazione dei trattamenti

2.6 Le variabili sperimentali

2.6.1 Variabili nominali (categoriche)

2.6.2 Variabili ordinali

2.6.3 Variabili quantitative discrete

2.6.4 Variabili quantitative continue

2.6.5 Rilievi visivi e sensoriali

2.6.6 Variabili di confondimento

2.7 Esperimenti di campo

2.7.1 Scegliere il campo

2.7.2 Le unità sperimentali in campo

2.7.3 Numero di repliche

2.7.4 La mappa di campo

2.7.5 Lay-out sperimentale

Capitolo 3

Richiami di statistica descrittiva

Placeholder

3.1 Dati quantitativi

3.1.1 Indicatori di tendenza centrale

3.1.2 Indicatori di dispersione

3.1.3 Incertezza delle misure derivate

3.1.4 Relazioni tra variabili quantitative: correlazione

3.2 Dati qualitativi

3.2.1 Distribuzioni di frequenze e classamento

3.2.2 Statistiche descrittive per le distribuzioni di frequenze

3.2.3 Distribuzioni di frequenza bivariate: le tabelle di contingenze

3.2.4 Connessione

3.3 Statistiche descrittive con R

3.3.1 Descrizione dei sottogruppi

3.3.2 Distribuzioni di frequenze e classamento

3.3.3 Connessione

3.4 Altre letture

Capitolo 4

Modelli statistici ed analisi dei dati

Placeholder

- 4.1 Verità ‘vera’ e modelli deterministici
- 4.2 Genesi deterministica delle osservazioni sperimentali
- 4.3 Errore sperimentale e modelli stocastici
 - 4.3.1 Funzioni di probabilità
 - 4.3.2 Funzioni di densità
 - 4.3.3 La distribuzione normale (curva di Gauss)
- 4.4 Modelli ‘a due facce’
- 4.5 E allora?
- 4.6 Le simulazioni Monte Carlo
- 4.7 Analisi dei dati e ‘model fitting’
- 4.8 Modelli stocastici non-normali
- 4.9 Altre letture

Capitolo 5

Stime ed incertezza

Placeholder

5.1 Esempio: una soluzione erbicida

5.1.1 Analisi dei dati: stima dei parametri

5.1.2 La ‘sampling distribution’

5.1.3 L’errore standard

5.2 Stima per intervallo

5.3 L’intervallo di confidenza

5.4 Qual è il senso dell’intervallo di confidenza?

5.5 Come presentare i risultati degli esperimenti

5.6 Alcune precisazioni

5.6.1 Campioni numerosi e non

5.6.2 Popolazioni gaussiane e non

5.7 Analisi statistica dei dati: riassunto del percorso logico

5.8 Da ricordare

5.9 Per approfondire un po’...

5.10 *Coverage* degli intervalli di confidenza

5.10.1 Intervalli di confidenza per fenomeni non-normali

5.11 Altre letture

Capitolo 6

Decisioni ed incertezza

Placeholder

6.1 Confronto tra due medie: il test t di Student

6.1.1 L'ipotesi nulla e alternativa

6.1.2 La statistica T

6.1.3 Simulazione Monte Carlo

6.1.4 Soluzione formale

6.1.5 Interpretazione del P-level

6.1.6 Tipologie alternative di test t di Student

6.2 Confronto tra due proporzioni: il test χ^2

6.2.1 Simulazione Monte Carlo

6.2.2 Soluzione formale

6.3 Conclusioni e riepilogo

6.4 Altre letture

Capitolo 7

Modelli ANOVA ad una via

Placeholder

- 7.1 Caso-studio: confronto tra erbicidi in vaso
- 7.2 Descrizione del dataset
- 7.3 Definizione di un modello lineare
- 7.4 Parametrizzazione del modello
- 7.5 Assunzioni di base
- 7.6 Fitting del modello: metodo manuale
 - 7.6.1 Stima dei parametri
 - 7.6.2 Calcolo dei residui
 - 7.6.3 Stima di σ
- 7.7 Scomposizione della varianza
- 7.8 Test d'ipotesi
- 7.9 Inferenza statistica
- 7.10 Fitting del modello con R
- 7.11 Medie marginali attese
- 7.12 Per concludere ...
- 7.13 Altre letture

Capitolo 8

La verifica delle assunzioni di base

Placeholder

8.1 Violazioni delle assunzioni di base

8.2 Procedure diagnostiche

8.3 Analisi grafica dei residui

8.3.1 Grafico dei residui contro i valori attesi

8.3.2 QQ-plot

8.4 Test d'ipotesi

8.5 Risultati contraddittori

8.6 'Terapia'

8.6.1 Correzione/Rimozione degli outliers

8.6.2 Correzione del modello

8.6.3 Trasformazione della variabile indipendente

8.6.4 Impiego di metodiche statistiche avanzate

8.6.5 Trasformazioni stabilizzanti

8.7 Esempio 1

8.8 Esempio 2

8.9 Altre letture

Capitolo 9

Contrasti e confronti multipli

Placeholder

- 9.1** Esempio
- 9.2** I contrasti
- 9.3** I contrasti con R
- 9.4** I confronti multipli a coppie (pairwise comparisons)
- 9.5** Display a lettere
- 9.6** Tassi di errore per confronto e per esperimento
- 9.7** Aggiustamento per la molteplicità
- 9.8** E le classiche procedure di confronto multiplo?
- 9.9** Consigli pratici
- 9.10** Altre letture

Capitolo 10

Modelli ANOVA con fattori di blocco

Nel capitolo 7 abbiamo impiegato un modello ANOVA con una sola variabile indipendente categorica, assumendo che le unità sperimentali, escluso l'effetto del trattamento, fossero totalmente indipendenti tra di loro. Questa assunzione era totalmente realistica, poiché si trattava di un disegno sperimentale a randomizzazione completa, dove non sussistevano raggruppamenti di alcun tipo, escluso quello dettato dal trattamento in studio.

Se invece l'esperimento include uno o più *blocking factors*, le osservazioni che appartengono allo stesso blocco sono più simili tra loro delle osservazioni che appartengono a blocchi diversi, proprio perché condividono le condizioni del blocco stesso. Per non invalidare l'indipendenza dei residui dobbiamo definire un modello ANOVA che tenga conto anche dei fattori di raggruppamento, in modo che il loro effetto non sia trascurato e, di conseguenza, si sommi agli effetti residui. Come al solito, affrontiamo questo tema partendo da alcuni esempi pratici.

10.1 Caso-studio: confronto tra erbicidi in campo

Abbiamo una prova di confronto tra erbicidi in mais, con 13 formulati, due testimoni inerbiti (che, per comodità, considereremo due trattamenti diversi) e un testimone scerbato. Al momento di impiantare la prova, era lecito ipotizzare che, pur scegliendo un appezzamento il più omogeneo possibile,

avremmo potuto riscontrare differenze di infestazione tra un punto e l'altro del campo, con un presumibile gradiente procedendo dai lati (vicino alle fosse) verso il centro. In questa situazione, se l'esperimento fosse stato disegnato a randomizzazione completa, le differenze di infestazione tra una parte e l'altra del campo sarebbero state trascurate e avrebbero finito per incrementare l'errore sperimentale, diminuendo l'efficienza dell'esperimento.

Abbiamo quindi impiegato un disegno a blocchi randomizzati con quattro repliche; il campo è stato suddiviso in tante sezioni (dette blocchi) quante erano le repliche (quattro), perpendicolarmente al gradiente di infestazione trasversale. In questo modo, l'ambiente era relativamente omogeneo all'interno di ciascun blocco, nel quale è stata collocata una replica per trattamento.

Il dataset dei risultati ('rimsulfuron.csv') è disponibile nella solita *repository* online. Nel box sottostante, carichiamo il file e trasformiamo le due variabili esplicative (blocco e trattamento) in fattori sperimentali. Più sotto, mostriamo la tabella in formato 'WIDE' (una riga per trattamento, con le repliche sulle colonne), con le medie di riga (trattamento) e di colonna (blocco)

```
fileName <- "https://www.casaonofri.it/_datasets/rimsulfuron.csv"
rimsulfuron <- read.csv(fileName)
rimsulfuron$Code <- factor(rimsulfuron$Code)
rimsulfuron$Herbicide <- factor(rimsulfuron$Herbicide)
rimsulfuron$Block <- factor(rimsulfuron$Block)
```

##	1	2	3	4	Medie
## Alachlor + terbuthylazine	12.060	49.580	41.340	16.370	29.838
## Hand-Weeded	77.580	92.080	86.590	99.630	88.970
## Metolachlor + terbuthylazine (pre)	51.770	52.100	49.460	34.670	47.000
## Pendimethalin (post) + rimsulfuron (post)	94.820	87.720	102.050	101.940	96.632
## Pendimethalin (pre) + rimsulfuron (post)	65.510	88.720	95.520	82.390	83.035
## Rimsulfuron (40)	85.910	91.090	111.420	93.150	95.392
## Rimsulfuron (45)	93.030	105.000	89.190	79.040	91.565
## Rimsulfuron (50)	86.930	105.820	110.020	89.100	97.968
## Rimsulfuron (50+30 split)	71.360	77.570	115.910	92.160	89.250
## Rimsulfuron (60)	52.990	102.860	100.620	97.040	88.377
## Rimsulfuron + Atred	94.110	89.860	104.340	99.630	96.985
## Rimsulfuron + hoeing	73.220	86.060	118.010	98.320	93.903
## Rimsulfuron + thyfensulfuron	75.280	82.590	94.960	85.850	84.670
## Thifensulfuron	78.470	42.320	62.520	24.340	51.913
## Unweeded 1	10.880	31.770	23.920	20.850	21.855
## Unweeded 2	27.580	51.550	25.130	38.610	35.718
## Medie	65.719	77.293	83.188	72.068	74.567

10.2 Definizione di un modello lineare

La produzione di ogni unità sperimentale (parcella) è condizionata da più di un effetto:

1. il diserbante con cui essa è stata trattata;
2. il blocco di cui essa fa parte;
3. ogni altro effetto non conoscibile e puramente casuale (residuo).

Il modello è quindi:

$$Y_{ij} = \mu + \gamma_i + \alpha_j + \varepsilon_{ij}$$

dove Y è la produzione nel blocco i e con il diserbo j , μ è l'intercetta, γ è l'effetto del blocco i , α è l'effetto del trattamento j e ε è l'errore sperimentale per ogni singola parcella, che si assume normalmente distribuito, con media 0 e deviazione standard σ . Anche in questo caso, come nel capitolo 7, poniamo un vincolo sulla somma degli effetti del trattamento e del blocco ($\sum \gamma_i = 0$ e $\sum \alpha_j = 0$), in modo che μ rappresenti la media generale. In totale, vi sono 19 parametri da stimare (un'intercetta, 15 effetti dei trattamenti e tre effetti dei blocchi, più σ).

10.3 Stima dei parametri

10.3.1 Coefficienti del modello

In questo caso l'esperimento è completamente bilanciato e la stima dei parametri può essere fatta banalmente, considerando i valori osservati e le medie aritmetiche per gruppo. Per prima cosa, calcoliamo tutte le medie (generale, dei blocchi e dei trattamenti), come mostrato nel box sottostante.

```
mu <- mean(rimsulfuron$Yield)
mu_bl <- with(rimsulfuron, tapply(Yield, Block, mean))
mu_tr <- with(rimsulfuron, tapply(Yield, Code, mean))
mu

## [1] 74.56687

mu_bl

##          1          2          3          4
```

```
## 65.71875 77.29313 83.18750 72.06812
```

```
mu_tr
```

```
##      1      2      3      4      5      6      7      8      9
## 95.3925 91.5650 97.9675 88.3775 89.2500 84.6700 93.9025 83.0350 96.6325 96.98
```

L'effetto dei blocchi si calcola sottraendo dalle relative medie la media generale, mentre l'effetto dei trattamenti si calcola in modo analogo, sostituendo alla media dei blocchi la media dei trattamenti.

```
gamma <- mu_bl - mu
alpha <- mu_tr - mu
```

A questo punto, per ogni osservazione, possiamo calcolare il valore atteso, sommando i valori μ , γ ed α corrispondenti; inoltre, possiamo calcolare i residui, come scostamenti tra i valori osservati e i valori attesi. La tabella sottostante schematizza i calcoli necessari e mostra come la somma degli elementi del modello restituisca le osservazioni originali.

```
gamma <- gamma[rimsulfuron$Block]
alpha <- alpha[rimsulfuron$Code]
res <- data.frame(Yield = rimsulfuron$Yield,
                  mu = mu, gamma = gamma, alpha = alpha,
                  Atteso = mu + gamma + alpha)
res$Residuo = res$Yield - res$Atteso
res$Verifica = res$Atteso + res$Residuo
res
```

##	Yield	mu	gamma	alpha	Atteso	Residuo	Verifica
## 1	85.91	74.56687	-8.848125	20.825625	86.54438	-0.634375	85.91
## 2	93.03	74.56687	-8.848125	16.998125	82.71688	10.313125	93.03
## 3	86.93	74.56687	-8.848125	23.400625	89.11938	-2.189375	86.93
## 4	52.99	74.56687	-8.848125	13.810625	79.52938	-26.539375	52.99
## 5	71.36	74.56687	-8.848125	14.683125	80.40188	-9.041875	71.36
## 6	75.28	74.56687	-8.848125	10.103125	75.82188	-0.541875	75.28
## 7	73.22	74.56687	-8.848125	19.335625	85.05438	-11.834375	73.22
## 8	65.51	74.56687	-8.848125	8.468125	74.18688	-8.676875	65.51
## 9	94.82	74.56687	-8.848125	22.065625	87.78437	7.035625	94.82
## 10	94.11	74.56687	-8.848125	22.418125	88.13688	5.973125	94.11
## 11	78.47	74.56687	-8.848125	-22.654375	43.06438	35.405625	78.47
## 12	51.77	74.56687	-8.848125	-27.566875	38.15188	13.618125	51.77
## 13	12.06	74.56687	-8.848125	-44.729375	20.98938	-8.929375	12.06
## 14	77.58	74.56687	-8.848125	14.403125	80.12188	-2.541875	77.58

## 15	10.88	74.56687	-8.848125	-52.711875	13.00688	-2.126875	10.88
## 16	27.58	74.56687	-8.848125	-38.849375	26.86938	0.710625	27.58
## 17	77.57	74.56687	2.726250	14.683125	91.97625	-14.406250	77.57
## 18	86.06	74.56687	2.726250	19.335625	96.62875	-10.568750	86.06
## 19	82.59	74.56687	2.726250	10.103125	87.39625	-4.806250	82.59
## 20	88.72	74.56687	2.726250	8.468125	85.76125	2.958750	88.72
## 21	91.09	74.56687	2.726250	20.825625	98.11875	-7.028750	91.09
## 22	102.86	74.56687	2.726250	13.810625	91.10375	11.756250	102.86
## 23	105.82	74.56687	2.726250	23.400625	100.69375	5.126250	105.82
## 24	105.00	74.56687	2.726250	16.998125	94.29125	10.708750	105.00
## 25	51.55	74.56687	2.726250	-38.849375	38.44375	13.106250	51.55
## 26	49.58	74.56687	2.726250	-44.729375	32.56375	17.016250	49.58
## 27	92.08	74.56687	2.726250	14.403125	91.69625	0.383750	92.08
## 28	31.77	74.56687	2.726250	-52.711875	24.58125	7.188750	31.77
## 29	42.32	74.56687	2.726250	-22.654375	54.63875	-12.318750	42.32
## 30	89.86	74.56687	2.726250	22.418125	99.71125	-9.851250	89.86
## 31	87.72	74.56687	2.726250	22.065625	99.35875	-11.638750	87.72
## 32	52.10	74.56687	2.726250	-27.566875	49.72625	2.373750	52.10
## 33	89.19	74.56687	8.620625	16.998125	100.18563	-10.995625	89.19
## 34	100.62	74.56687	8.620625	13.810625	96.99813	3.621875	100.62
## 35	111.42	74.56687	8.620625	20.825625	104.01313	7.406875	111.42
## 36	110.02	74.56687	8.620625	23.400625	106.58813	3.431875	110.02
## 37	94.96	74.56687	8.620625	10.103125	93.29063	1.669375	94.96
## 38	118.01	74.56687	8.620625	19.335625	102.52313	15.486875	118.01
## 39	95.52	74.56687	8.620625	8.468125	91.65563	3.864375	95.52
## 40	115.91	74.56687	8.620625	14.683125	97.87063	18.039375	115.91
## 41	104.34	74.56687	8.620625	22.418125	105.60563	-1.265625	104.34
## 42	49.46	74.56687	8.620625	-27.566875	55.62063	-6.160625	49.46
## 43	102.05	74.56687	8.620625	22.065625	105.25312	-3.203125	102.05
## 44	62.52	74.56687	8.620625	-22.654375	60.53313	1.986875	62.52
## 45	86.59	74.56687	8.620625	14.403125	97.59063	-11.000625	86.59
## 46	23.92	74.56687	8.620625	-52.711875	30.47563	-6.555625	23.92
## 47	25.13	74.56687	8.620625	-38.849375	44.33813	-19.208125	25.13
## 48	41.34	74.56687	8.620625	-44.729375	38.45813	2.881875	41.34
## 49	85.85	74.56687	-2.498750	10.103125	82.17125	3.678750	85.85
## 50	82.39	74.56687	-2.498750	8.468125	80.53625	1.853750	82.39
## 51	92.16	74.56687	-2.498750	14.683125	86.75125	5.408750	92.16
## 52	98.32	74.56687	-2.498750	19.335625	91.40375	6.916250	98.32
## 53	89.10	74.56687	-2.498750	23.400625	95.46875	-6.368750	89.10
## 54	79.04	74.56687	-2.498750	16.998125	89.06625	-10.026250	79.04
## 55	97.04	74.56687	-2.498750	13.810625	85.87875	11.161250	97.04

```
## 56 93.15 74.56687 -2.498750 20.825625 92.89375 0.256250 93.15
## 57 16.37 74.56687 -2.498750 -44.729375 27.33875 -10.968750 16.37
## 58 99.63 74.56687 -2.498750 14.403125 86.47125 13.158750 99.63
## 59 20.85 74.56687 -2.498750 -52.711875 19.35625 1.493750 20.85
## 60 38.61 74.56687 -2.498750 -38.849375 33.21875 5.391250 38.61
## 61 101.94 74.56687 -2.498750 22.065625 94.13375 7.806250 101.94
## 62 34.67 74.56687 -2.498750 -27.566875 44.50125 -9.831250 34.67
## 63 99.63 74.56687 -2.498750 22.418125 94.48625 5.143750 99.63
## 64 24.34 74.56687 -2.498750 -22.654375 49.41375 -25.073750 24.34
```

10.3.2 Stima di σ

In primo luogo, calcoliamo la devianza dei residui, come somma dei loro quadrati; da questa, possiamo ottenere la deviazione standard (σ), considerando che abbiamo 16 gruppi con quattro repliche, quindi tre gradi di libertà per gruppo. Tuttavia, dobbiamo anche tener presente che le repliche di ogni gruppo non differiscono solo per motivi casuali, ma anche perché appartengono a blocchi diversi. Abbiamo quattro blocchi, quindi tre gradi di libertà, che vanno dedotti dai 48 (16×3) precedentemente calcolati.

```
RSS <- sum( res$Residuo^2 )
sigma <- sqrt(RSS/45)
RSS; sigma
```

```
## [1] 7187.348
```

```
## [1] 12.63799
```

Da σ possiamo ottenere anche SEM e SED, anche se questo calcolo ve lo lascio per esercizio (ricordate che abbiamo quattro repliche per trattamento).

10.4 Scomposizione della varianza

La scomposizione della varianza è analoga a quella che abbiamo operato per l'ANOVA ad una via; tuttavia, dobbiamo tener presente che, in questo caso, la devianza totale delle osservazione deve essere decomposta in tre quote: una dovuta al trattamento, una dovuta al blocco ed una dovuta agli effetti stocastici.

La devianza dei residui l'abbiamo già calcolata, mentre la devianza dei trattamenti possiamo calcolarla come somma dei quadrati degli scarti del vettore

‘alpha.’ Analogamente, possiamo ottenere la devianza dei blocchi, considerando il vettore ‘gamma.’

```
TSS <- sum(res$alpha^2)
BSS <- sum(res$gamma^2)
TSS; BSS
```

```
## [1] 43931.23
```

```
## [1] 2660.491
```

Verifichiamo che la devianza del trattamento, sommata alle devianze dei blocchi e dei residui restituisce la devianza totale delle osservazioni (somma dei quadrati degli scarti rispetto alla media generale).

```
TSS + BSS + RSS
```

```
## [1] 53779.07
```

```
sum( (rimsulfuron$Yield - mu)^2 )
```

```
## [1] 53779.07
```

Ci chiediamo se gli effetti attribuibili ai blocchi e ai trattamenti siano significativamente più grandi degli effetti stocastici. Sappiamo già di non poter confrontare le devianze, ma possiamo calcolare e confrontare con un test di F le relative varianze. Basta tener conto che i gradi di libertà dei blocchi e dei trattamenti sono rispettivamente 3 e 15, cioè il numero dei blocchi meno uno e il numero dei trattamenti meno uno.

```
MSt <- TSS/15
MSb <- BSS/3
MSe <- RSS/45
```

La significatività della differenza tra blocchi è poco rilevante, mentre siamo interessati a valutare la significatività della differenza tra trattamenti con un apposito test di F:

```
Fratio <- MSt/MSe
Fratio
```

```
## [1] 18.3369
```

Il valore osservato si mostra abbastanza discrepante rispetto all’ipotesi nulla, che possiamo porre nella forma $H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_{16} = \mu$. Notate come stiamo facendo riferimento alle medie delle 16 popolazioni che hanno generato i nostri campioni, assumendole uguali tra di loro, come se i 16 campioni fossero stati, nella realtà, estratti dalla stessa popolazione. Ancora

una volta, come nel capitolo 7, vedete che stiamo anche assumendo che le varianze delle 16 popolazioni siano omogenee.

Ci chiediamo, che possibilità esiste che, nonostante l'ipotesi nulla sia vera, noi osserviamo un valore di F così alto o più alto? Potremmo determinare la *sampling distribution* per F attraverso una simulazione di Monte Carlo, oppure, assumendo che i residui siano gaussiani, possiamo utilizzare la funzione di densità F di Fisher, con 15 gradi di libertà al numeratore e 45 gradi di libertà al denominatore.

```
pf(Fratio, 15, 45, lower.tail = F)
```

```
## [1] 2.328653e-14
```

Vediamo che la probabilità che l'ipotesi nulla sia vera è molto piccola e, pertanto, rifiutiamo l'ipotesi nulla, accettando l'alternativa: esiste in effetti una differenza significativa tra i trattamenti erbicidi.

10.5 Adattamento del modello con R

Il model fitting può essere comodamente effettuato con R, utilizzando la funzione `lm()`, come mostrato nel box sottostante. Per brevità, utilizziamo il codice del trattamento erbicida invece che il nome.

```
mod <- lm(Yield ~ Block + Code, data = rimsulfuron)
```

La tabella ANOVA può essere facilmente ottenuta con la funzione `anova()`:

```
anova(mod)
```

```
## Analysis of Variance Table
##
## Response: Yield
##           Df Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
## Block      3   2660   886.83   5.5524 0.002496 **
## Code     15  43931  2928.75  18.3369 2.329e-14 ***
## Residuals 45   7187   159.72
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Ovviamente, prima di considerare questa tabella dovremo preoccuparci del fatto che le assunzioni di base siano rispettate (vedi capitolo 8), cosa che

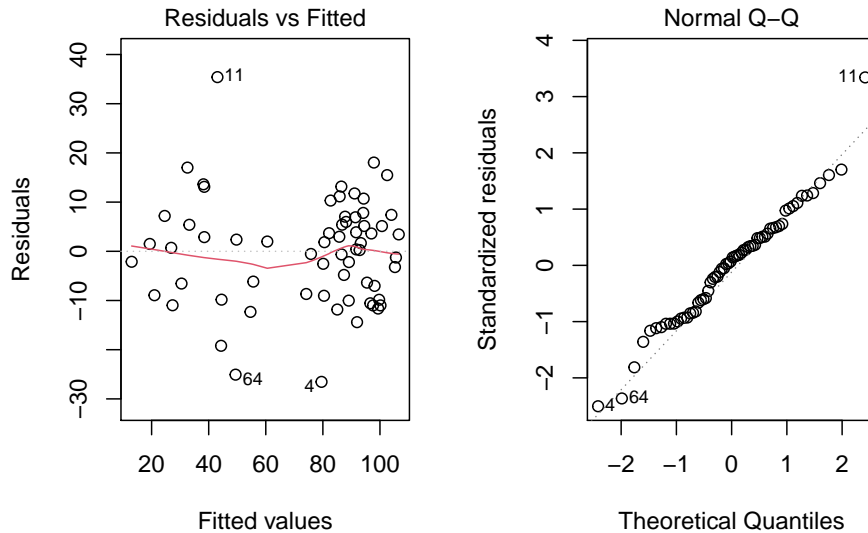


Figura 10.1: Analisi grafica dei residui per la prova di confronto erbicida

possiamo facilmente verificare con un'analisi grafica dei residui, utilizzando il codice sottostante. L'output è visibile in Figura 10.1.

```
par(mfrow=c(1,2))
plot(mod, which = 1)
plot(mod, which = 2)
```

Dopo esserci assicurati su questo importante aspetto, possiamo vedere che abbiamo due ipotesi nulle da testare (effetto dei trattamenti non significativo ed effetto dei blocchi non significativo), che possono essere entrambe rifiutate per $P < 0.05$.

Da questo punto in avanti, l'analisi procede come usuale, calcolando le medie marginali attese ed, eventualmente, confrontandole tra loro con una procedura di confronto multiplo, come descritto nei capitoli precedenti. Tener presente che, in questo esperimento, abbiamo 16 trattamenti, cioè $16 \times 15/2 = 120$ confronti; di conseguenza, è opportuno operare la correzione per la molteplicità. Inoltre, dato che il trattamento più interessante è quello che rende massima la produzione, sarà opportuno ordinare le medie in senso decrescente, utilizzando l'argomento 'reverse = T.'

```
library(emmeans)
medie <- emmeans(mod, ~Code)
```

```
multcomp::cld(medie, Letters = LETTERS, reverse = T)
```

```
## Code emmean SE df lower.CL upper.CL .group
## 3 98.0 6.32 45 85.24 110.7 A
## 10 97.0 6.32 45 84.26 109.7 A
## 9 96.6 6.32 45 83.91 109.4 A
## 1 95.4 6.32 45 82.67 108.1 A
## 7 93.9 6.32 45 81.18 106.6 A
## 2 91.6 6.32 45 78.84 104.3 A
## 5 89.2 6.32 45 76.52 102.0 A
## 14 89.0 6.32 45 76.24 101.7 A
## 4 88.4 6.32 45 75.65 101.1 A
## 6 84.7 6.32 45 71.94 97.4 A
## 8 83.0 6.32 45 70.31 95.8 AB
## 11 51.9 6.32 45 39.19 64.6 BC
## 12 47.0 6.32 45 34.27 59.7 C
## 16 35.7 6.32 45 22.99 48.4 C
## 13 29.8 6.32 45 17.11 42.6 C
## 15 21.9 6.32 45 9.13 34.6 C
##
## Results are averaged over the levels of: Block
## Confidence level used: 0.95
## P value adjustment: tukey method for comparing a family of 16 estimates
## significance level used: alpha = 0.05
```

Vi lascio il commento dei risultati come esercizio.

10.6 Disegni a quadrato latino

A volte i fattori di blocco sono più di uno e danno origine ad un disegno sperimentale detto ‘quadrato latino’ di cui abbiamo parlato nel capitolo 3. Qui, forniremo un esempio tratto dalla pratica sperimentale industriale.

10.7 Caso studio: confronto tra metodi costruttivi

Immaginiamo di voler studiare il tempo necessario per costruire un componente elettronico, utilizzando quattro metodi diversi: è evidente che il tempo di costruzione sarà influenzato dalla perizia del tecnico e, per questo, utilizziamo quattro tecnici diversi, ad ognuno dei quali facciamo utilizzare tutti e quattro i metodi. Un esperimento così disegnato sarebbe a blocchi randomizzati, con il tecnico che fa da blocco per i trattamenti. Tuttavia, dobbiamo anche riconoscere che i quattro tecnici saranno via via meno efficienti, e quindi il metodo che utilizzeranno per primo sarà avvantaggiato, mentre quello

che utilizzeranno per ultimo sarà svantaggiato. E' vero che i metodi sono assegnati in ordine random ad ogni tecnico, ma non si può comunque evitare che un metodo venga avvantaggiato rispetto ad un altro, perché, ad esempio, non viene mai ad occupare l'ultima posizione (o meglio, l'ultimo turno). Abbiamo già illustrato questa situazione in un capitolo precedente ed abbiamo visto come essa possa essere gestita imponendo un vincolo ulteriore alla randomizzazione e facendo in modo che ogni metodo occupi tutte e quattro i turni, in tecnici diversi. Il disegno è quindi a quadrato latino.

Il dataset dei risultati è disponibile online:

```
fileName <- "https://www.casaonofri.it/_datasets/Technicians.csv"
dataset <- read.csv(fileName, header=T)
dataset
```

##	Shift	Technician	Method	Time
## 1	I	Andrew	C	90
## 2	II	Andrew	B	90
## 3	III	Andrew	A	89
## 4	IV	Andrew	D	104
## 5	I	Anna	D	96
## 6	II	Anna	C	91
## 7	III	Anna	B	97
## 8	IV	Anna	A	100
## 9	I	Michael	A	84
## 10	II	Michael	D	96
## 11	III	Michael	C	98
## 12	IV	Michael	B	104
## 13	I	Sarah	B	88
## 14	II	Sarah	A	88
## 15	III	Sarah	D	98
## 16	IV	Sarah	C	106

10.8 Definizione di un modello lineare

In questo caso abbiamo un trattamento (metodo) e due effetti 'blocco' (tecnico e turno) da includere nel modello, che può essere così definito:

$$Y_{ijk} = \mu + \gamma_k + \beta_j + \alpha_i + \varepsilon_{ijk}$$

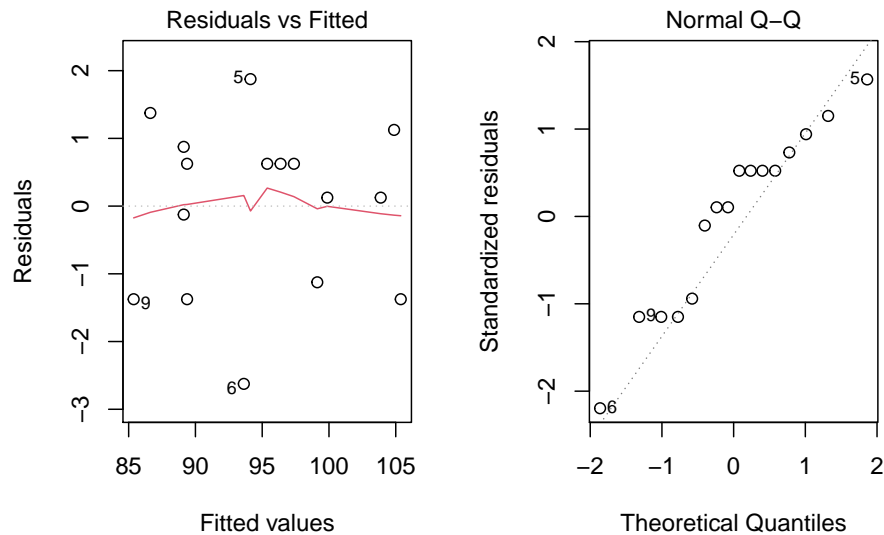


Figura 10.2: Analisi grafica dei residui per la prova di confronto tra metodi costruttivi

dove μ è l'intercetta, γ è l'effetto del turno k , β è l'effetto del tecnico j e α è l'effetto del metodo i . L'elemento ε_{ijk} rappresenta la componente random individuale, di ogni osservazione e si assume normalmente distribuita, con media 0 e deviazione standard σ .

Avendo già illustrato il processo di stima dei parametri e di scomposizione della varianza, quindi utilizziamo subito R per il 'model fitting':

```
mod <- lm(Time ~ Method + Technician
          + Shift, data = dataset)
```

Verifichiamo il rispetto delle assunzioni di base, con l'analisi grafica dei residui, riportata in Figura 10.2 (il codice è analogo a quello fornito più sopra).

Non essendovi evidenti problemi, valutiamo la significatività degli effetti nel modello, analogamente a quanto abbiamo fatto nel caso dell'ANOVA a blocchi randomizzati. L'unica differenza sta nel fatto che, nei disegni a quadrato latino, vi sono tre effetti da testare, anche se l'unico ad avere una certa rilevanza è l'effetto del metodo di lavoro.

```

anova(mod)

## Analysis of Variance Table
##
## Response: Time
##           Df Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
## Method      3 145.69   48.563 12.7377 0.0051808 **
## Technician  3  17.19    5.729  1.5027 0.3065491
## Shift       3 467.19 155.729 40.8470 0.0002185 ***
## Residuals   6  22.87    3.812
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

```

Vediamo che esiste una differenza significativa tra i metodi e l'ipotesi nulla può essere rifiutata con una bassissima probabilità di errore di prima specie.

Ovviamente, dopo aver eseguito un'ANOVA a blocchi randomizzati o a quadrato latino, andremo eventualmente ad eseguire un test di confronto multiplo, seguendo le raccomandazioni esposte nel capitolo precedente. Anche questa parte ve la lasciamo per esercizio.

Capitolo 11

Modelli ANOVA a due vie

Placeholder

- 11.1 Il concetto di 'interazione'
- 11.2 Tipi di interazione
- 11.3 Caso-studio: interazione tra lavorazioni e diserbo chimico
- 11.4 Definizione del modello lineare
- 11.5 Stima dei parametri
- 11.6 Verifica delle assunzioni di base
- 11.7 Scomposizione delle varianze
- 11.8 Medie marginali attese
- 11.9 Calcolo degli errori standard (SEM e SED)
- 11.10 Medie marginali attese e confronti multipli con R
- 11.11 Per approfondire un po'....
 - 11.11.1 Anova a due vie: scomposizione 'manuale' della varianza

Capitolo 12

La regressione lineare semplice

Placeholder

12.1 Caso studio: effetto della concimazione azotata al frumento

12.2 Analisi preliminari

12.3 Definizione del modello lineare

12.4 Stima dei parametri

12.5 Valutazione della bontà del modello

12.5.1 Valutazione grafica

12.5.2 Errori standard dei parametri

12.5.3 Test F per la mancanza d'adattamento

12.5.4 Test F per la bontà di adattamento e coefficiente di determinazione

12.6 Previsioni

12.7 Per approfondire un po'...

Capitolo 13

La regressione non-lineare

Placeholder

13.1 Caso studio: degradazione di un erbicida nel terreno

13.2 Scelta della funzione

13.3 Stima dei parametri

13.3.1 Linearizzazione della funzione

13.3.2 Approssimazione della vera funzione tramite una polinomiale in X

13.3.3 Minimi quadrati non-lineari

13.4 La regressione non-lineare con R

13.5 Verifica della bontà del modello

13.5.1 Analisi grafica dei residui

13.5.2 Test F per la mancanza di adattamento (approssimato)

13.5.3 Errori standard dei parametri

13.5.4 Coefficienti di determinazione

13.6 Funzioni lineari e nonlineari dei parametri

13.7 Previsioni

13.8 Gestione delle situazioni ‘patologiche’

13.8.1 Trasformazione del modello

13.8.2 Trasformazione dei dati

13.9 Per approfondire un po’...

Capitolo 14

Esercizi

Placeholder

14.1 Capitoli 1 e 2

14.1.1 Esercizio 1

14.2 Capitolo 3

14.2.1 Esercizio 1

14.2.2 Esercizio 2

14.2.3 Esercizio 3

14.3 Capitolo 4

14.3.1 Esercizio 1

14.3.2 Esercizio 2

14.3.3 Esercizio 3

14.3.4 Esercizio 4

14.3.5 Esercizio 5

14.3.6 Esercizio 6

14.3.7 Esercizio 7

14.3.8 Esercizio 8

14.4 Capitolo 5

14.4.1 Esercizio 1

14.4.2 Esercizio 2

14.4.3 Esercizio 3

14.4.4 Esercizio 4

14.4.5 Esercizio 5

Capitolo 15

Appendice 1: breve introduzione ad R

Placeholder

Cosa è R?

Oggetti e assegnazioni

Costanti e vettori

Matrici

Dataframe

Quale oggetto sto utilizzando?

Operazioni ed operatori

Funzioni ed argomenti

Consigli per l'immissione di dati sperimentali

Immissione di numeri progressivi

Immissione dei codici delle tesi e dei blocchi

Immissione dei valori e creazione del dataframe

Leggere e salvare dati esterni

Alcune operazioni comuni sul dataset

Selezionare un subset di dati

Ordinare un vettore o un dataframe

Workspace

Script o programmi

Interrogazione di oggetti