ME623 - Planejamento e Pesquisa

Parte 04

Tatiana Benaglia - 2024S1

Modelo de Análise de Variância (Experimento Balanceado)

Suponha que temos experimento completamente aleatorizado de um fator, cujos tratamentos são aplicados aleatoriamente nas UEs com igual número de replicações para cada tratamento.

O modelo de análise de variância é dado por:

$$y_{ij} = \mu + \tau_i + \varepsilon_{ij}, \qquad i = 1, 2, \ldots, a; \quad j = 1, 2, \ldots, n;$$

sujeita à restrição que

$$\sum_{i=1}^{a} \tau_i = 0,$$

em que:

- μ é a média global das respostas;
- τ_i é o efeito do i-ésimo tratamento;
- ε_{ij} é o erro experimental. Assumimos que, se tudo estiver controlado, os erros são identicamente distribuídos com $\mathbb{E}(\varepsilon_{ij}) = 0$, $\text{Var}(\varepsilon_{ij}) = \sigma^2$ para todo i, j, e $\mathbb{E}(\varepsilon_{ij}\varepsilon_{i'j'}) = 0$ se $i' \neq i$ ou $j' \neq j$ (não-correlacionados).

Efeitos Fixos ou Aleatórios

O modelo anterior descreve duas situações diferentes com respeito aos efeitos dos tratamentos.

Efeitos Fixos

- Os a tratamentos foram especificamente escolhidos pelo experimentador;
- As conclusões aplicam-se APENAS aos tratamentos considerados no experimento. Não podemos estender as conclusões nem mesmo para tratamentos semelhantes.
- Queremos estimar os parâmetros (μ, τ_i, σ^2) e temos o **Modelo de Efeitos Fixos**.

Efeito Aleatório

- Os a tratamentos podem ser uma amostra aleatória de uma população de tratamentos.
- Conclusões podem ser estendidas para toda a população de tratamentos.
- Os efeitos τ_i são variáveis aleatórias e estimá-los individualmente não é muito útil. Em vez disso, testamos a variabilidade de τ_i.
- Temos os **Modelos de Efeitos Aleatórios** ou **Componentes de Variância**.

Média Global e Média dos Tratamentos

Iremos trabalhar incialmente com o **modelo de efeitos fixos**.

Considerando o caso balanceado, temos que $N = na$ é o tamanho total da amostra, e a média amostral global é dada por:

$$\bar{y}_{\cdot\cdot} = \frac{1}{na}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n} y_{ij} = \frac{\bar{y}_{1\cdot} + \bar{y}_{2\cdot} + \cdots + \bar{y}_{a\cdot}}{a}.$$

Além disso, temos que a média amostral do i-ésimo tratamento é:

$$\bar{y}_{i\cdot} = \frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n} y_{ij}.$$

Iremos omitir o termo "amostral" daqui por diante onde for claro do que se trata.

Hipóteses de Interesse

Nosso interesse é testar a igualdade das médias dos a tratamentos, ou seja

$$\begin{aligned} &H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \ldots = \mu_a, \\ &H_1 : \mu_i \neq \mu_j, \qquad \text{para pelo menos um par } (i, j). \end{aligned}$$

Veja que $\mathbb{E}(y_{ij}) = \mu + \tau_i = \mu_i,\ i = 1, \ldots, a$, sendo μ a média global, tal que:

$$\mu = \frac{1}{a}\sum_{i=1}^{a}\mu_i \qquad \Longrightarrow \qquad \sum_{i=1}^{a}\tau_i = 0.$$

Isso significa que os efeitos dos tratamentos são desvios de uma média global. Consequentemente, podemos reescrever as hipótese acima em termos dos efeitos dos tratamentos:

$$\begin{aligned} &H_0 : \tau_1 = \tau_2 = \ldots = \tau_a = 0, \\ &H_1 : \tau_i \neq 0, \qquad \text{para pelo menos um } i. \end{aligned}$$

O procedimento adequado para testar a igualdade de a médias de tratamentos é a **Análise de Variância (ANOVA)**.

A **Análise de Variância** é uma técnica que permite particionar a variação total dos dados em parcelas atribuíveis a diferentes fontes e, para isso, fazemos a **decomposição da soma de quadrados**.

A Soma de Quadrados Total (corrigida) é dada por:

$$\text{SQT} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{..})^2.$$

Note que $\text{SQT} = (n-1)S^2$, sendo S^2 é a variância amostral de todas as observações y_{ij}.

Vamos mostrar que é possível decompor a soma de quadrados total em duas componentes: soma de quadrados devido aos tratamentos e a soma de quadrados dos erros (residual).

Decomposição da Soma de Quadrados Total

$$
\begin{aligned}
\mathsf{SQT} &= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij}-\bar{y}_{..})^2 = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij}-\bar{y}_{i.}+\bar{y}_{i.}-\bar{y}_{..})^2 \\
&= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij}-\bar{y}_{i.})^2 + \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(\bar{y}_{i.}-\bar{y}_{..})^2 + 2\underbrace{\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij}-\bar{y}_{i.})(\bar{y}_{i.}-\bar{y}_{..})}_{=0\ (\textbf{Exercício}:\ \text{Demonstre!})} \\
&= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(\bar{y}_{i.}-\bar{y}_{..})^2 + \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij}-\bar{y}_{i.})^2 \\
&= n\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i.}-\bar{y}_{..})^2 + \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij}-\bar{y}_{i.})^2 \\
&= \mathsf{SQTr} + \mathsf{SQE}.
\end{aligned}
$$

Alguns textos usam a expressão soma de quadrados entre os tratamentos (SSB: *sum of squares between*) para a SQTr e soma de quadrados dentro dos tratamentos (SSW: *sum of squares within*) para a SQE.

Graus de Liberdade das Somas de Quadrados

O número de **graus de liberdade** (gl) de uma soma de quadrados corresponde ao número de elementos na soma, subtraído o número de restrições sobre os termos.

Por exemplo, a soma de quadrados

$$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n} y_{ij}^2$$

tem $N = \sum_{i=1}^{a} n = an$ elementos livres, logo N graus de liberdade.

Por outro lado,

$$SQT = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{..})^2$$

tem $N - 1$ graus de liberdade, pois a restrição linear $\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{..}) = 0$ é sempre verdadeira.

Graus de Liberdade das Somas de Quadrados

No caso da soma de quadrados dos tratamentos (SQTr), temos que

$$\text{SQTr} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot})^2 = n\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot})^2$$

tem somente a elementos, mas que sempre satisfazem $\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot}) = 0$, e portanto, temos $a-1$ graus de liberdade.

No caso da somas de quadrados dos erros (SQE) é um pouco diferente, temos que

$$\text{SQE} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2$$

tem $N = na$ elementos, mas eles sempre satisfazem, para $i = 1, 2, \ldots, a$, $\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot}) = 0$, isto é, um total de a restrições. Portanto, temos $N - a = na - a = a(n-1)$ graus de liberdade.

Graus de Liberdade das Somas de Quadrados

Fonte de Variação	SQ	gl	Explicação
Tratamento	$\text{SQTr} = n\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot})^2$	$a-1$	a tratamentos e uma restrição
Erro	$\text{SQE} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2$	$N-a$	N observações e a restrições
Total	$\text{SQT} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{\cdot\cdot})^2$	$N-1$	N observações e uma restrição

Note que

$$N - 1 = (a-1) + (N-a).$$

Construindo a Tabela ANOVA

Definimos também as quantidades chamadas de **Quadrados Médios**, que são a razão das Somas de Quadrados pelo seus respectivos graus de liberdade, ou seja,

$$QM = \frac{SQ}{gl}.$$

A partir disso, podemos começar a construir a tabela ANOVA, que exibe os resultados de um experimento. Incluiremos outras colunas posteriormente, mas por agora temos:

Fonte de Variação	**SQ**	**gl**	**QM**
Tratamento	$\text{SQTr} = n\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot})^2$	$a-1$	$\text{QMTr} = \text{SQTr}/(a-1)$
Erro	$\text{SQE} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2$	$N-a$	$\text{QME} = \text{SQE}/(N-a)$
Total	$\text{SQT} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{\cdot\cdot})^2$	$N-1$	$\text{QMT} = \text{SQT}/(N-1)$

Somas de Quadrados - Caso Não Balanceado

Com as devidas adaptações, a decomposição da soma de quadrados é válida pro caso não balanceado:

$$\mathsf{SQT} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i}(y_{ij} - \bar{y}_{..})^2,$$

$$\mathsf{SQTr} = \sum_{i=1}^{a} n_i(\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2,$$

$$\mathsf{SQE} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n_i}(y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2,$$

com $N-1$, $a-1$ e $N-a$ graus de liberdade, respectivamente.

Além disso,

$$\mathsf{SQT} = \mathsf{SQTr} + \mathsf{SQE}.$$

Intuição sobre o Teste de Hipóteses

Lembrem-se que queremos testar:

$$
\begin{aligned}
&H_0 : \tau_1 = \tau_2 = ... = \tau_a = 0, \\
&H_1 : \tau_i \neq 0, \qquad \text{para pelo menos um } i.
\end{aligned}
$$

Mas qual seria a estatística do teste, considerando a tabela ANOVA construída até então?

A estatística do teste será a razão entre os quadrado médios dos tratamentos e erro:

$$
F = \frac{\text{QMTr}}{\text{QME}} = \frac{\text{SQTr}/(a-1)}{\text{SQE}/(N-a)}.
$$

Na próxima aula, iremos verificar qual a distribuição exata do numerador e denominador quando assumimos normalidade dos erros, mas primeiro, a intuição.

Estimador de σ^2

Considere a Soma de Quadrados dos Erros:

$$SQE = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2 = \sum_{i=1}^{a}\left[\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2\right].$$

Veja que o termo entre colchetes dividido por $n-1$ é a variância amostral para o i-ésimo tratamento:

$$S_i^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{j=1}^{n}(y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2, \qquad i = 1, \dots, a.$$

Então, como assumimos variância constante dos erros, um estimador de σ^2 pode ser obtido combinando as variâncias dos a tratamentos da seguinte forma:

$$\frac{(n-1)S_1^2 + (n-1)S_2^2 + \dots + (n-1)S_a^2}{a(n-1)} = \frac{SQE}{N-a} = QME.$$

Veremos posteriormente que este é um estimador não viesado de σ^2.

Estimador de σ^2

Se não existe diferença entre as médias dos tratamentos, pode-se também usar a variação entre tratamentos para estimar σ^2.

Considerando que $Var(\bar{y}_{i\cdot}) = \sigma^2/n$, então

$$n\hat{V}ar(\bar{y}_{i\cdot}) = \frac{n}{a-1}\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot})^2 = \frac{SQTr}{a-1} = QMTr,$$

é um estimador de σ^2.

Portanto, a ANOVA fornece duas estimativas da variância dos erros.

No caso de igualdade das médias dos tratamentos, QME e QMTr deveriam ser próximos. Caso contrário, suspeita-se que a diferença seja causada pela diferença nas médias dos tratamentos.

Portanto, a estatística do teste será construída com base na comparação entre QME e QMTr.

Intuição sobre o Teste de Hipóteses

Na próxima aula, mostraremos que:

$$\mathbb{E}(\text{QME}) = \mathbb{E}\left(\frac{\text{SQE}}{N-a}\right) = \frac{(N-a)\sigma^2}{N-a} = \sigma^2,$$

$$\mathbb{E}(\text{QMTr}) = \mathbb{E}\left(\frac{\text{SQTr}}{a-1}\right) = \frac{(a-1)\sigma^2 + n\sum_{i=1}^{a}\tau_i^2}{a-1} = \sigma^2 + \frac{n}{a-1}\sum_{i=1}^{a}\tau_i^2.$$

QME é um estimador não-viesado de σ^2, e QMTr é um estimador de σ^2 que é não-viesado somente quando $H_0 : \tau_1 = ... = \tau_a = 0$.

Se definirmos

$$F = \frac{\text{QMTr}}{\text{QME}},$$

então esperamos que $\mathbb{E}(F) \approx 1$ quando H_0 é verdadeira, mas $\mathbb{E}(F) > 1$ caso contrário.

Portanto, a região crítica para o teste, com nível de significância de α, será da forma rejeito H_0 se $F > f_c$, em que f_c é um ponto crítico da distribuição de F.

Leitura

- Montgomery, DC. Design and Analysis of Experiments. Capítulo 3.
- Dean, A. e Voss, D. - Design and Analysis of Experiments. Capítulo 3.

Agradecimentos
Parte deste material foi criado pelo prof. Guilherme Ludwig - IMECC/UNICAMP