MAT02014 - Planejamento de Experimentos II
Delineamentos com fatores fixos e aleatórios

Rodrigo Citton P. dos Reis
rodrigocpdosreis@gmail.com

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Matemática e Estatística
Departamento de Estatística

Departamento de Estatística
Porto Alegre, 2018

Introdução

- Algumas vezes, nos delineamentos fatoriais cruzados, (efeitos de) fatores aleatórios são também introduzidos no modelo **pela forma que o experimento é conduzido**.

Exemplo

Resíduos de pesticidas em plantas de algodão

Exemplo

Resíduos de pesticidas em plantas de algodão

Exemplo

Resíduos de pesticidas em plantas de algodão

- Experimento comparando diferentes **formulações** e **métodos de aplicação** de um pesticida às folhas de plantas de algodão.
- O objetivo era **aumentar a quantidade de pesticida ativo** restante nas folhas da planta de algodão uma semana após a aplicação.
- O pesticida que está sendo estudado degrada na luz solar e um certo aditivo para a formulação retarda esse processo.
- Diferentes técnicas de aplicação podem diferir na quantidade de pesticida entregue às folhas da planta.

Exemplo

Resíduos de pesticidas em plantas de algodão

- Os **fatores de tratamento** neste experimento foram:
  - **duas formulações** diferentes do pesticida;
  - **dois métodos de aplicação** diferentes;
- Experimento fatorial 2^2.
- A **unidade experimental** era uma fileira de 20 pés de algodão chamada de parcela, porque essa era uma área conveniente dentro da qual a aplicação de pesticidas podia ser controlada.

Exemplo

Resíduos de pesticidas em plantas de algodão

Exemplo

Resíduos de pesticidas em plantas de algodão

- Oito parcelas foram selecionadas e duas foram aleatoriamente designadas para cada uma das quatro combinações de tratamento, resultando em **duas repetições** por combinação de tratamento.
- Uma semana após a aplicação, os pesquisadores estavam prontos para determinar o resíduo de pesticida remanescente nas folhas da planta.
- No entanto, havia muito material vegetal em um lote inteiro para ser enviado ao laboratório para análise.
- Portanto, **duas amostras de folhas** em uma quantidade conveniente para análise laboratorial de resíduos de pesticidas foram selecionadas de cada parcela.

Exemplo

Resíduos de pesticidas em plantas de algodão

Table 5.14 *Pesticide Residue on Cotton Plants*

Formulation	Application Technique	Plot	Sample 1	Sample 2
A	1	1	0.237	0.252
A	1	2	0.281	0.274
B	1	1	0.247	0.294
B	1	2	0.321	0.267
A	2	1	0.392	0.378
A	2	2	0.381	0.346
B	2	1	0.351	0.362
B	2	2	0.334	0.348

Exemplo

- A formulação, a técnica de aplicação e sua interação são **fatores fixos** porque os pesquisadores estavam interessados em comparar a resposta média entre os níveis desses fatores.
- A parcela, por outro lado, é um **fator aleatório** que representa diferenças em unidades experimentais.
  - Está aninhado nas combinações de formulação por técnica de aplicação. - Não há interesse em comparar unidades experimentais dentro de cada combinação de formulação e aplicação.
  - Em vez disso, múltiplas parcelas por combinação de tratamento foram incluídas no delineamento, de modo que a **variação causada por diferentes parcelas** pudesse ser estimada e usada para avaliar a significância dos efeitos de formulação e aplicação.

Exemplo

- As amostras replicadas (as folhas de algodão; subamostras) de cada parcela foram por conveniência na condução do experimento.
- A maneira mais simples de analisar os dados seria calcular a média das duas subamostras e proceder conforme uma análise de delineamentos fatoriais cruzados.
- No entanto, se as subamostras puderem ser consideradas independentes e for desejável incluir todos os dados na análise, um termo adicional para amostra deve ser incluído no modelo.
- Amostra é outro **efeito aleatório**, uma vez que não há interesse específico em comparar a resposta entre as duas amostras de cada parcela.

Exemplo

$$y_{ijkl} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \alpha\beta_{ij} + p_{(ij)k} + \epsilon_{ijkl},$$

em que y_{ijkl} é o resíduo de pesticida encontrado na l-ésima amostra retirada da k-ésima parcela, tratado com nível de formulação i e técnica de aplicação j.

Exemplo

- Em geral $i = 1, \ldots, a, j = 1, \ldots, b, k = 1, \ldots, r$ e $l = 1, \ldots, s$.
  - Neste exemplo específico, $a = 2, b = 2, r = 2$, e $s = 2$;
  - α_i é o efeito da formulação;
  - β_j é o efeito da aplicação;
  - $\alpha\beta_{ij}$ é o efeito de interação;
  - $p_{(ij)k}$ é o efeito de parcela aleatória;
  - ϵ_{ijkl} é o efeito da amostra aleatória.

Exemplo (modelo na forma matricial)

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\epsilon},$$

Exemplo (modelo na forma matricial)

$$
\boldsymbol{y}=\begin{pmatrix} y_{1111}\\ y_{1112}\\ y_{1121}\\ y_{1122}\\ y_{2111}\\ y_{2112}\\ y_{2121}\\ y_{2122}\\ y_{1211}\\ y_{1212}\\ y_{1221}\\ y_{1222}\\ y_{2211}\\ y_{2212}\\ y_{2221}\\ y_{2222} \end{pmatrix},\quad
\boldsymbol{X}=\begin{pmatrix}
1&1&0&1&0&1&0&0&0\\
1&1&0&1&0&1&0&0&0\\
1&1&0&1&0&1&0&0&0\\
1&1&0&1&0&1&0&0&0\\
1&0&1&1&0&0&1&0&0\\
1&0&1&1&0&0&1&0&0\\
1&0&1&1&0&0&1&0&0\\
1&0&1&1&0&0&1&0&0\\
1&1&0&0&1&0&0&1&0\\
1&1&0&0&1&0&0&1&0\\
1&1&0&0&1&0&0&1&0\\
1&1&0&0&1&0&0&1&0\\
1&0&1&0&1&0&0&0&1\\
1&0&1&0&1&0&0&0&1\\
1&0&1&0&1&0&0&0&1\\
1&0&1&0&1&0&0&0&1
\end{pmatrix},\quad
\boldsymbol{\beta}=\begin{pmatrix} \mu\\ \alpha_1\\ \alpha_2\\ \beta_1\\ \beta_2\\ \alpha\beta_{11}\\ \alpha\beta_{21}\\ \alpha\beta_{12}\\ \alpha\beta_{22} \end{pmatrix},
$$

$$
\boldsymbol{Z}=\begin{pmatrix}
1&0&0&0&0&0&0&0\\
1&0&0&0&0&0&0&0\\
0&1&0&0&0&0&0&0\\
0&1&0&0&0&0&0&0\\
0&0&1&0&0&0&0&0\\
0&0&1&0&0&0&0&0\\
0&0&0&1&0&0&0&0\\
0&0&0&1&0&0&0&0\\
0&0&0&0&1&0&0&0\\
0&0&0&0&1&0&0&0\\
0&0&0&0&0&1&0&0\\
0&0&0&0&0&1&0&0\\
0&0&0&0&0&0&1&0\\
0&0&0&0&0&0&1&0\\
0&0&0&0&0&0&0&1\\
0&0&0&0&0&0&0&1
\end{pmatrix},\quad
\boldsymbol{\gamma}=\begin{pmatrix} P_{(11)1}\\ P_{(11)2}\\ P_{(21)1}\\ P_{(21)2}\\ P_{(12)1}\\ P_{(12)2}\\ P_{(22)1}\\ P_{(22)2} \end{pmatrix},\quad
\boldsymbol{\epsilon}=\begin{pmatrix} \epsilon_{1111}\\ \epsilon_{1112}\\ \epsilon_{1121}\\ \epsilon_{1122}\\ \epsilon_{2111}\\ \epsilon_{2112}\\ \epsilon_{2121}\\ \epsilon_{2122}\\ \epsilon_{1211}\\ \epsilon_{1212}\\ \epsilon_{1221}\\ \epsilon_{1222}\\ \epsilon_{2211}\\ \epsilon_{2212}\\ \epsilon_{2221}\\ \epsilon_{2222} \end{pmatrix}.
$$

Exemplo (modelo na forma matricial)

- $\boldsymbol{\beta}$ é um vetor de efeitos fixos.
- $\boldsymbol{\gamma}$ e $\boldsymbol{\epsilon}$ representam vetores de efeitos aleatórios.
- $\boldsymbol{\gamma} \sim MVN(\mathbf{0}, \sigma_p^2 \mathbf{I}_{abr})$ independente de $\boldsymbol{\epsilon} \sim MVN(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I}_{abrs})$.
  - $\mathbf{y} \sim MVN(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \mathbf{V})$, em que $\mathbf{V} = \mathbf{Z}\sigma_p^2 \mathbf{I}_{abr} \mathbf{Z}^{'} + \sigma^2 \mathbf{I}_{abrs}$.
- Estimador de mínimos quadrados de $\boldsymbol{\beta}$ seria $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^{'}\mathbf{V}^{-}\mathbf{X})^{-}\mathbf{X}^{'}\mathbf{V}^{-}\mathbf{y}$.
  - **Problema:** σ^2 e σ_p^2 são desconhecidos, logo $\mathbf{V}$ também é.
  - **Solução:** tratar $\boldsymbol{\beta}$ e $\boldsymbol{\gamma}$ como fixos.

Exemplo (R)

```
library(daewr)
data(pesticide)
head(pesticide)
```

```
##   form tech plot residue
## 1    A    1    1   0.237
## 2    A    1    1   0.252
## 3    A    1    2   0.281
## 4    A    1    2   0.274
## 5    B    1    1   0.247
## 6    B    1    1   0.294
```

```
tail(pesticide)
```

```
##    form tech plot residue
## 11    A    2    2   0.381
## 12    A    2    2   0.346
## 13    B    2    1   0.351
## 14    B    2    1   0.362
## 15    B    2    2   0.334
## 16    B    2    2   0.348
```

Exemplo (R)

```
mod4 <- aov(residue ~ form + tech + form:tech + plot:form:tech,
            data = pesticide)
summary(mod4)
```

```
##                Df  Sum Sq Mean Sq F value   Pr(>F)    
## form            1 0.00002 0.00002   0.040   0.8455    
## tech            1 0.03231 0.03231  72.434 2.79e-05 ***
## form:tech       1 0.00219 0.00219   4.900   0.0578 .  
## form:tech:plot  4 0.00234 0.00059   1.314   0.3432    
## Residuals       8 0.00357 0.00045                     
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

- Testes F e valores de p estão incorretos!

Exemplo

Source	df	EMS
A	$a-1$	$\sigma^2 + r\sigma_P^2 + srb\tau_A^2$
B	$b-1$	$\sigma^2 + r\sigma_P^2 + sra\tau_B^2$
AB	$(a-1)(b-1)$	$\sigma^2 + r\sigma_P^2 + sr\tau_{AB}^2$
Plot	$(r-1)ab$	$\sigma^2 + r\sigma_P^2$
Sub-Sample	$(s-1)rab$	σ^2

- τ^2 são formas quadráticas dos efeitos fixos (α_i, β_j e $\alpha\beta_{ij}$).
- Quadrado médio correto a ser usado no denominador do teste F para testar estes efeitos fixos é o termo de parcela (*Plot*), na qual a esperança é $\sigma^2 + \sigma_p^2$.

Exemplo (R)

- Valores de F corretos:

form: $F_{1,4} = 0.00002/0.00059 = 0.03$, P=0.8709,
tech: $F_{1,4} = 0.03231/0.00059 = 54.76$, P=0.0.0018,
form:tech $F_{1,4} = 0.00219/0.00059 = 3.71$, P=0.1264,

```r
pf(0.03, 1, 4, lower.tail = FALSE)
```

```
## [1] 0.8709017
```

- **O que concluímos?**

Exemplo (R)

```r
# Example 23 p. 178
library(lme4)
c1 <- c( -.5, .5 )
mod5 <- lmer(residue ~ 1 + form + tech + form:tech + (1|plot:form:tech),
             contrasts = list( form = c1, tech = c1),
             data = pesticide)
summary(mod5)
```

```
## Linear mixed model fit by REML ['lmerMod']
## Formula: residue ~ 1 + form + tech + form:tech + (1 | plot:form:tech)
##    Data: pesticide
##
## REML criterion at convergence: -51.9
##
## Scaled residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -1.53621 -0.67181  0.05407  0.57711  1.70193
##
## Random effects:
##  Groups         Name        Variance  Std.Dev.
##  plot:form:tech (Intercept) 6.994e-05 0.008363
##  Residual                   4.461e-04 0.021120
## Number of obs: 16, groups:  plot:form:tech, 8
##
## Fixed effects:
##             Estimate Std. Error t value
```

Exemplo (R): testes F para os fatores fixos

```
# Example 25 p. 179
anova(mod5)
```

```
## Analysis of Variance Table
##           Df    Sum Sq   Mean Sq F value
## form       1 0.0000138 0.0000138  0.0308
## tech       1 0.0245970 0.0245970 55.1425
## form:tech  1 0.0016638 0.0016638  3.7300
```

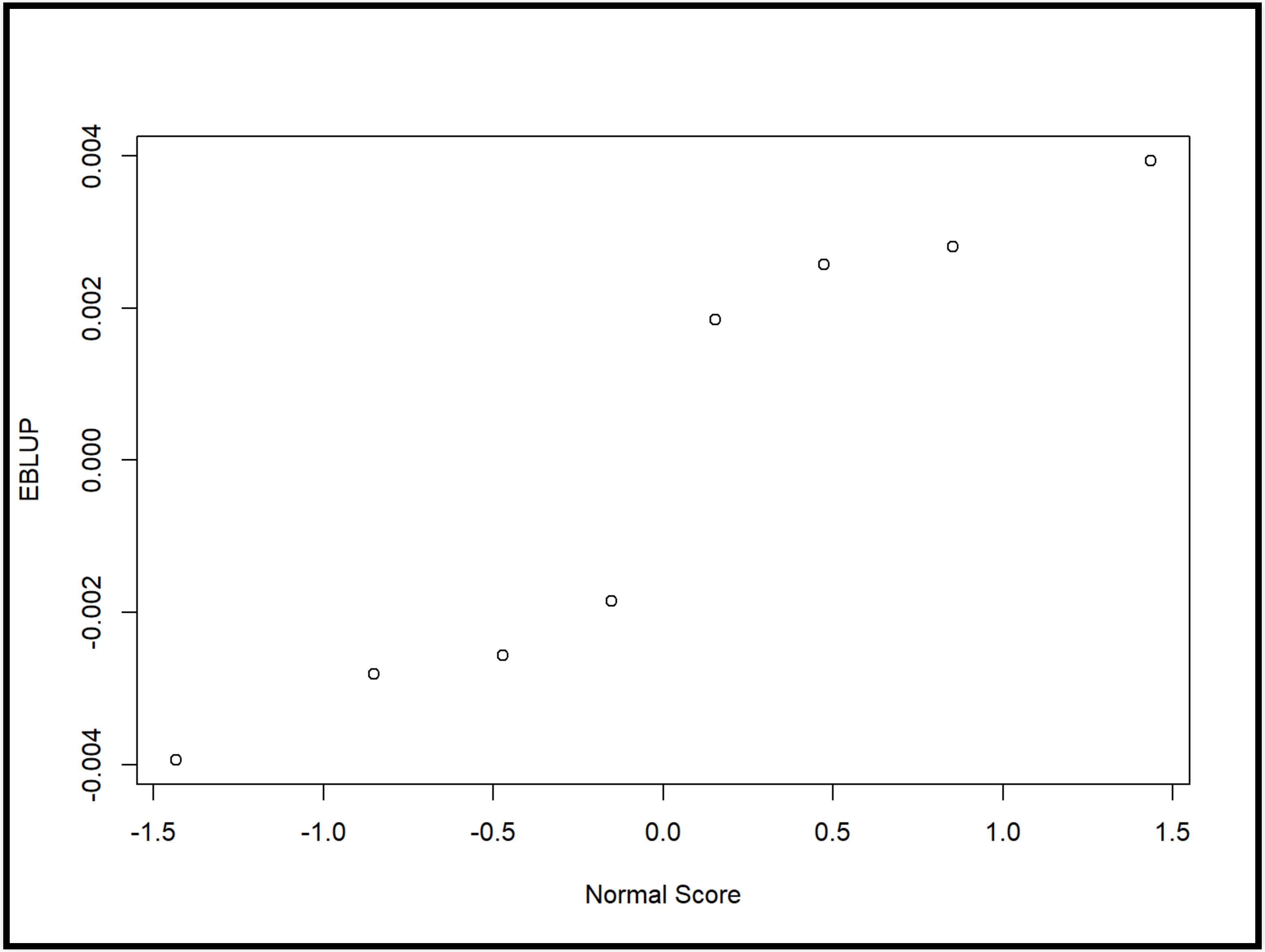
Exemplo (R): comparações ajustadas

```r
# Example 24 p. 178
library(lsmeans)
lsmeans(mod5, pairwise ~ tech, adjust = c("tukey"))
```

```
## $lsmeans
##  tech   lsmean          SE df  lower.CL  upper.CL
##  1    0.271625 0.008558165  4 0.2478637 0.2953863
##  2    0.361500 0.008558165  4 0.3377387 0.3852613
##
## Results are averaged over the levels of: form
## Degrees-of-freedom method: satterthwaite
## Confidence level used: 0.95
##
## $contrasts
##  contrast  estimate         SE df t.ratio p.value
##  1 - 2    -0.089875 0.01210307  4  -7.426  0.0018
##
## Results are averaged over the levels of: form
```

Exemplo (R): EBLUPs

```r
qqnorm( ranef(mod5)$`plot:form:tech`[[1]],
        main = "", ylab = "EBLUP",
        xlab = "Normal Score" )
```


EBLUP
0.004
0.002
0.000
-0.002
-0.004
-1.5
-1.0
-0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
Normal Score

Conclusões

- Modelos como o que vimos são chamados de **modelos de efeitos mistos**.
- Neste exemplo, a aplicação do pesticida a cada parcela pode induzir uma correlação entre sub-amostras da mesma parcela.
    - Embora a suposição de independência seja violada, o teste F em efeitos fixos utilizando o quadrado médio da parcela como o denominador ainda é válido.