MAT02014 - Planejamento de Experimentos II
Delineamentos fatoriais com dois níveis

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

Delineamentos fatoriais com dois níveis

Introdução

- Conforme fatores adicionais são acrescentados a um planejamento fatorial, o número de combinações de tratamento no delineamento aumenta exponencialmente.
- O último exemplo que vimos continha quatro fatores e 36 combinações de tratamento.
- Se houvesse cinco fatores em um delineamento, cada um com quatro níveis, o número de combinações de tratamento seria $4 \times 4 \times 4 \times 4 \times 4 = 4^5 = 1024$.
- É fácil perceber que não seriam necessários muitos fatores para tornar o projeto **impraticável**.

Introdução

- Em outras palavras, ele teria muitas combinações de tratamento para executar em um período de tempo razoável.
- No entanto, é **melhor reduzir o número de níveis** de cada fator e permanecer com o planejamento fatorial **usando todos os fatores** do que reverter para experimentos um a um ou dois de cada vez e perder a eficiência de experimentos fatorial.
- Com experimentos separados, a capacidade de detectar interações de ordem superior e a capacidade de detectar interações entre qualquer par de fatores é perdida.

Introdução

- Se cinco fatores em um planejamento fatorial fossem estudados com apenas dois níveis cada, o número de combinações de tratamento seria reduzido para $2^5 = 32$.
- Por esta razão, os delineamentos fatoriais com dois níveis para cada fator, ou fatoriais de dois níveis, são populares.
- Uma abreviatura para um fatorial de dois níveis com k fatores é um **delineamento** 2^k.

Introdução

- Em fatoriais de dois níveis, se um fator tiver níveis quantitativos, os dois níveis são denotados simbolicamente por $(-)$ e $(+)$.
  - $(-)$ representa o nível **mais baixo** que o pesquisador consideraria.
  - $(+)$ representa o nível **mais alto** que o pesquisador consideraria.
  - As quantidades altas e baixas são geralmente distanciadas o máximo possível, de modo a acentuar o sinal ou a diferença na resposta entre os dois níveis.
- Se um fator tem níveis qualitativos, as designações $(-)$ e $(+)$ são arbitrárias, mas os dois níveis escolhidos normalmente seriam dois que o experimentador acredita que devam resultar na diferença máxima na resposta

que devam resultar na diferença máxima na resposta.

Efeitos principais e coeficientes de regressão

O modelo para um experimento fatorial com três fatores pode ser escrito como:

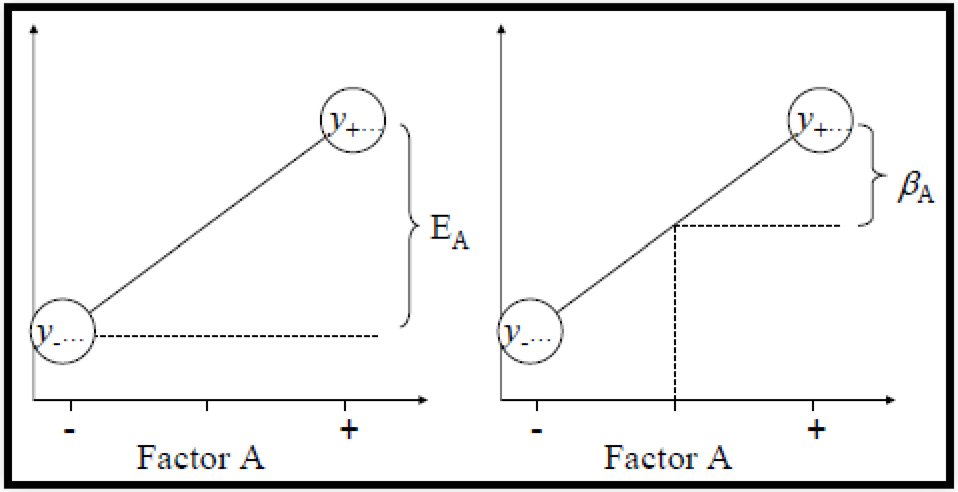
$$y_{ijkl} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + \alpha\beta_{ij} + \alpha\gamma_{ik} + \beta\gamma_{jk} + \alpha\beta\gamma_{ijk} +$$

em que α_i, β_j, e os demais, são efeitos tais como definimos anteriormente.

Efeitos principais e coeficientes de regressão

- No caso em que cada fator tem apenas dois níveis representados por $(-)$ e $(+)$, i, j, k e l podem ser substituídos por um $(-)$ ou $(+)$ e $\alpha_- = -\alpha_+$.
  - $\alpha_- = \bar{y}_{-\ldots} - \bar{y}_{\ldots.}$
  - $\alpha_+ = \bar{y}_{+\ldots} - \bar{y}_{\ldots.}$
  - $\bar{y}_{\ldots.} = (\bar{y}_{-\ldots} + \bar{y}_{+\ldots})/2$
- Uma igualdade semelhante será verdadeira para todos os efeitos e interações.
- Como os dois efeitos para cada fator são o mesmo valor com sinais diferentes, um modo mais compacto de definir os efeitos principais para um fatorial de dois níveis é $E_A = \bar{y}_{+\ldots} - \bar{y}_{-\ldots}$.

Efeitos principais e coeficientes de regressão



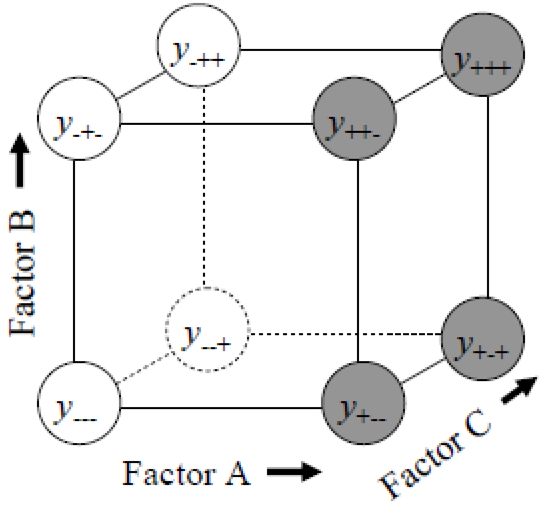
Efeitos principais e coeficientes de regressão

- A inclinação de regressão β_A mostrada no lado direito da figura anterior é a **mudança vertical na resposta média** para uma mudança de **uma unidade** (ou seja, de 0 a $+1$) no nível de fator em **unidades simbólicas**.
- Portanto, a inclinação, β_A, é apenas metade do efeito E_A, ou a diferença em duas médias dividida por 2.

Efeitos principais e coeficientes de regressão

- Ordenação (padrão) de Yates.
  - **Para casa:** pesquisar sobre o **algoritmo de Yates**.

Run	X_A	X_B	X_C	Response
1	-	-	-	y_{---}
2	+	-	-	y_{+--}
3	-	+	-	y_{-+-}
4	+	+	-	y_{++-}
5	-	-	+	y_{--+}
6	+	-	+	y_{+-+}
7	-	+	+	y_{-++}
8	+	+	+	y_{+++}

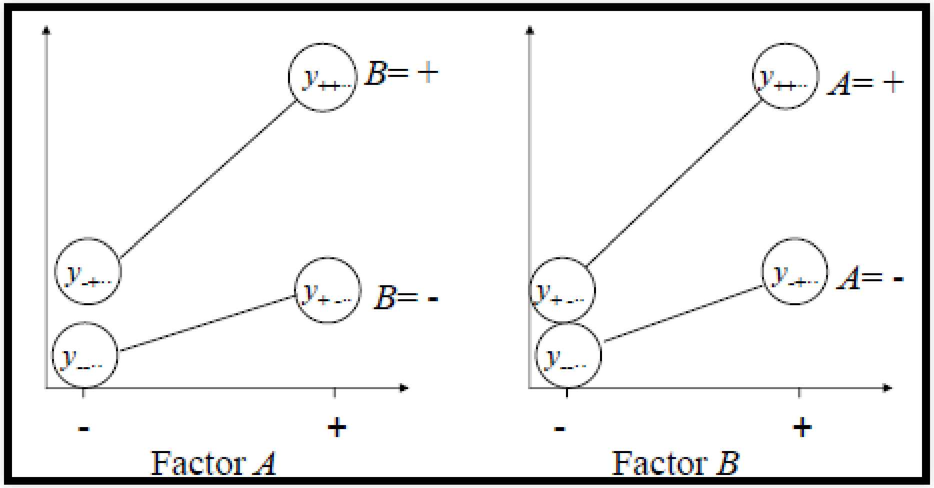


$$E_A = (y_{+--} + y_{++-} + y_{+-+} + y_{+++})/4 - (y_{---} + y_{-+-} + y_{--+} + y_{-++})/4$$

Efeitos principais e coeficientes de regressão

- Uma das propriedades desejáveis de um plano fatorial 2^k é que os efeitos do fator não são obscurecidos por mudanças planejadas em outros fatores.
  - Na lista de experimentos para o projeto 2^k, mostrada na figura anterior, isso é evidente pelo fato de que, no alto nível de cada fator, há um número igual de altos e baixos níveis de todos os outros fatores.
  - Também no nível baixo de cada fator, há um número igual de níveis altos e baixos de todos os outros fatores.
- Assim, o efeito de um fator, ou diferença na resposta média entre o nível alto e baixo desse fator, representa o efeito desse fator sozinho, porque a influência de todos os outros fatores foi calculada.
  - Matematicamente esta propriedade é chamada ortogonalidade.

Interações

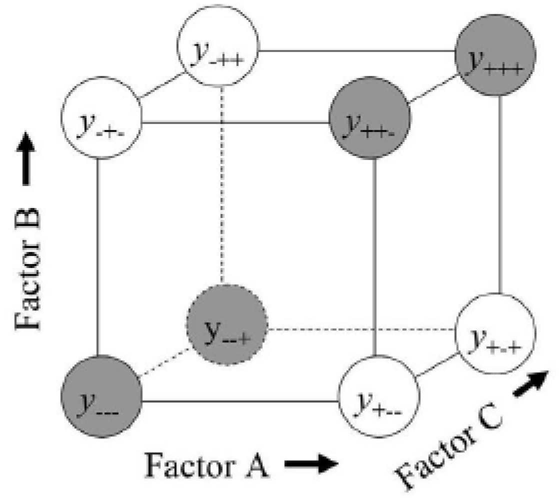


$y_{++\cdot\cdot}$
$B= +$
$y_{-+\cdot\cdot}$
$y_{+-\cdot\cdot}$
$B= -$
$y_{--\cdot\cdot}$
-
+
Factor A
$y_{++\cdot\cdot}$
$A= +$
$y_{+-\cdot\cdot}$
$y_{-+\cdot\cdot}$
$A= -$
$y_{--\cdot\cdot}$
-
+
Factor B

Interações

- $X_A \cdot X_B$
  - $(-)(-) = +$
  - $(-)(+) = -$
  - $\ldots$

Run	X_A	X_B	X_C	$X_A \cdot X_B$	Resp.
1	-	-	-	+	y_{---}
2	+	-	-	-	y_{+--}
3	-	+	-	-	y_{-+-}
4	+	+	-	+	y_{++-}
5	-	-	+	+	y_{--+}
6	+	-	+	-	y_{+-+}
7	-	+	+	-	y_{-++}
8	+	+	+	+	y_{+++}



$$E_{AB} = (y_{---} + y_{++-} + y_{--+} + y_{+++})/4 - (y_{+--} + y_{-+-} + y_{+-+} + y_{-++})/4$$

Interações

Modelo s regressão

$$\begin{aligned} y = \beta_0 &+ \beta_A \boldsymbol{X}_A + \beta_B \boldsymbol{X}_B + \beta_C \boldsymbol{X}_C \\ &+ \beta_{AB} \boldsymbol{X}_A \boldsymbol{X}_B + \beta_{AC} \boldsymbol{X}_A \boldsymbol{X}_C + \beta_{BC} \boldsymbol{X}_B \boldsymbol{X}_C \\ &+ \beta_{ABC} \boldsymbol{X}_A \boldsymbol{X}_B \boldsymbol{X}_C + \epsilon. \end{aligned}$$

Exemplo de um experimento fatorial 2^3

- Os estudantes de um laboratório de eletrônica da universidade muitas vezes reclamavam que as medições de voltagem feitas em um circuito construído em sala de aula eram inconsistentes.
- O assistente de ensino do laboratório (TA) decidiu realizar uma experiência para tentar identificar a fonte da variação.
- Os três fatores que ele variou foram:
  - A = a temperatura ambiente onde a medição de voltagem foi feita.
  - B = o tempo de aquecimento do voltímetro.
  - C = o tempo que a energia foi conectada ao circuito antes da medição ser feita. - A resposta foi a tensão medida em milivolts.

Exemplo de um experimento fatorial 2^3

- Os dois níveis para o fator A foram:
  - $-$ = 22ºC (temperatura ambiente).
  - $+$ = 32ºC (próximo da temperatura em alguns ambientes industriais).
- Um forno foi usado e o circuito foi autorizado a estabilizar por pelo menos cinco minutos antes das medições.
- As configurações para os fatores B e C foram:
  - $-$ = 30 segundos ou menos
  - $+$ = 5 minutos.
- O mesmo circuito foi medido para cada combinação de fatores de tratamento, de modo que a unidade experimental era nada mais do que a tentativa ou o momento no qual a combinação particular de níveis de fator de tratamento era aplicada para fazer a medição.

- Duas réplicas de cada uma das oito combinações experimentais foram executadas em uma ordem aleatória para ajudar a evitar vieses.

Exemplo de um experimento fatorial 2^3

	Factor Levels			Coded Factors					
Run	A	B	C	X_A	X_B	X_C	Rep	Order	y
1	22	0.5	0.5	−	−	−	1	5	705
2	32	0.5	0.5	+	−	−	1	14	620
3	22	5.0	0.5	−	+	−	1	15	700
4	32	5.0	0.5	+	+	−	1	1	629
5	22	0.5	5.0	−	−	+	1	8	672
6	32	0.5	5.0	+	−	+	1	12	668
7	22	5.0	5.0	−	+	+	1	10	715
8	32	5.0	5.0	+	+	+	1	9	647
1	22	0.5	0.5	−	−	−	1	4	680
2	32	0.5	0.5	+	−	−	1	7	651
3	22	5.0	0.5	−	+	−	1	2	685
4	32	5.0	0.5	+	+	−	1	3	635
5	22	0.5	5.0	−	−	+	1	11	654
6	32	0.5	5.0	+	−	+	1	16	691
7	22	5.0	5.0	−	+	+	1	6	672
8	32	5.0	5.0	+	+	+	1	13	673

Exemplo de um experimento fatorial $\mathbf{2^3}$

Níveis dos fatores codificados

$$X_A = \left(\frac{A - 27}{5}\right).$$

- A função `contr.FrF2` do pacote `DoE.base` realiza esta codificação no `R`.

Exemplo (R)

```r
library(daewr)
data(volt)
head(volt)
```

```
##      A   B   C   y
## 1  22 0.5 0.5 705
## 2  32 0.5 0.5 620
## 3  22   5 0.5 700
## 4  32   5 0.5 629
## 5  22 0.5   5 672
## 6  32 0.5   5 668
```

Exemplo (R)

```r
library(FrF2)
modv <- lm( y ~ A*B*C, data = volt,
            contrast = list(A = contr.FrF2,
                            B = contr.FrF2,
                            C = contr.FrF2))
summary(modv)
```

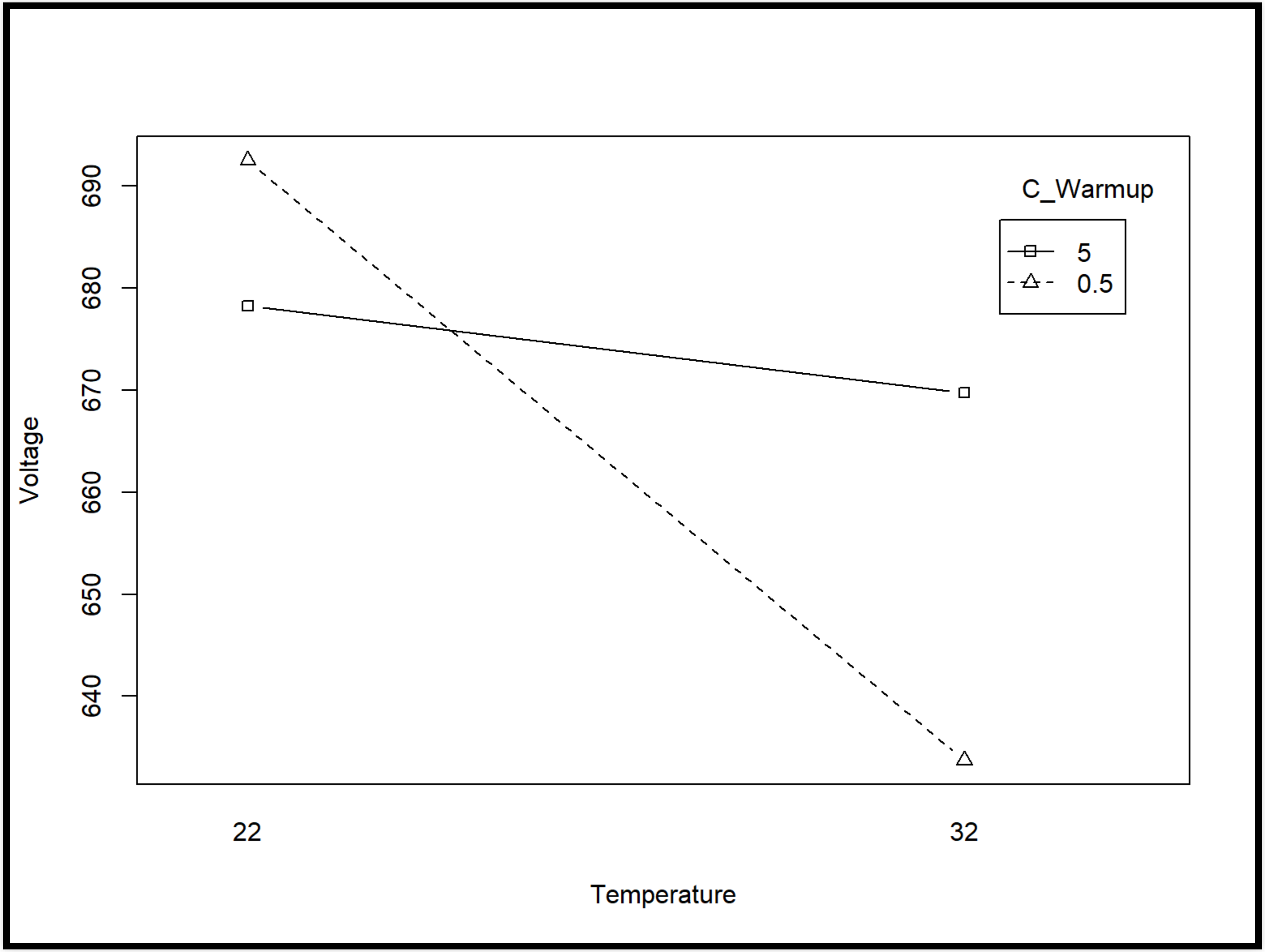
```
##
## Call:
## lm.default(formula = y ~ A * B * C, data = volt, contrasts = list(A =
##     B = contr.FrF2, C = contr.FrF2))
##
## Residuals:
##    Min     1Q Median     3Q    Max
## -21.50 -11.75   0.00  11.75  21.50
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 668.5625     4.5178 147.985 4.86e-15 ***
## A1          -16.8125     4.5178  -3.721  0.00586 **
## B1            0.9375     4.5178   0.208  0.84079
## C1            5.4375     4.5178   1.204  0.26315
## A1:B1        -6.6875     4.5178  -1.480  0.17707
## A1:C1        12.5625     4.5178   2.781  0.02390 *
## B1:C1         1.8125     4.5178   0.401  0.69878
```

Exemplo

- O efeito do fator A é o dobro do coeficiente de regressão mostrado na saída do R.
  - $E_A = 2 \times \hat{\beta}_A = 2(-16.8125) = -33.625.$
- Isso significa que, em média, quando a temperatura ambiente é aumentada de 22ºC para 32ºC, a medição de tensão diminuirá em 33,6 milivolts.
- **Pergunta:** esta conclusão é válida?

Exemplo (R)

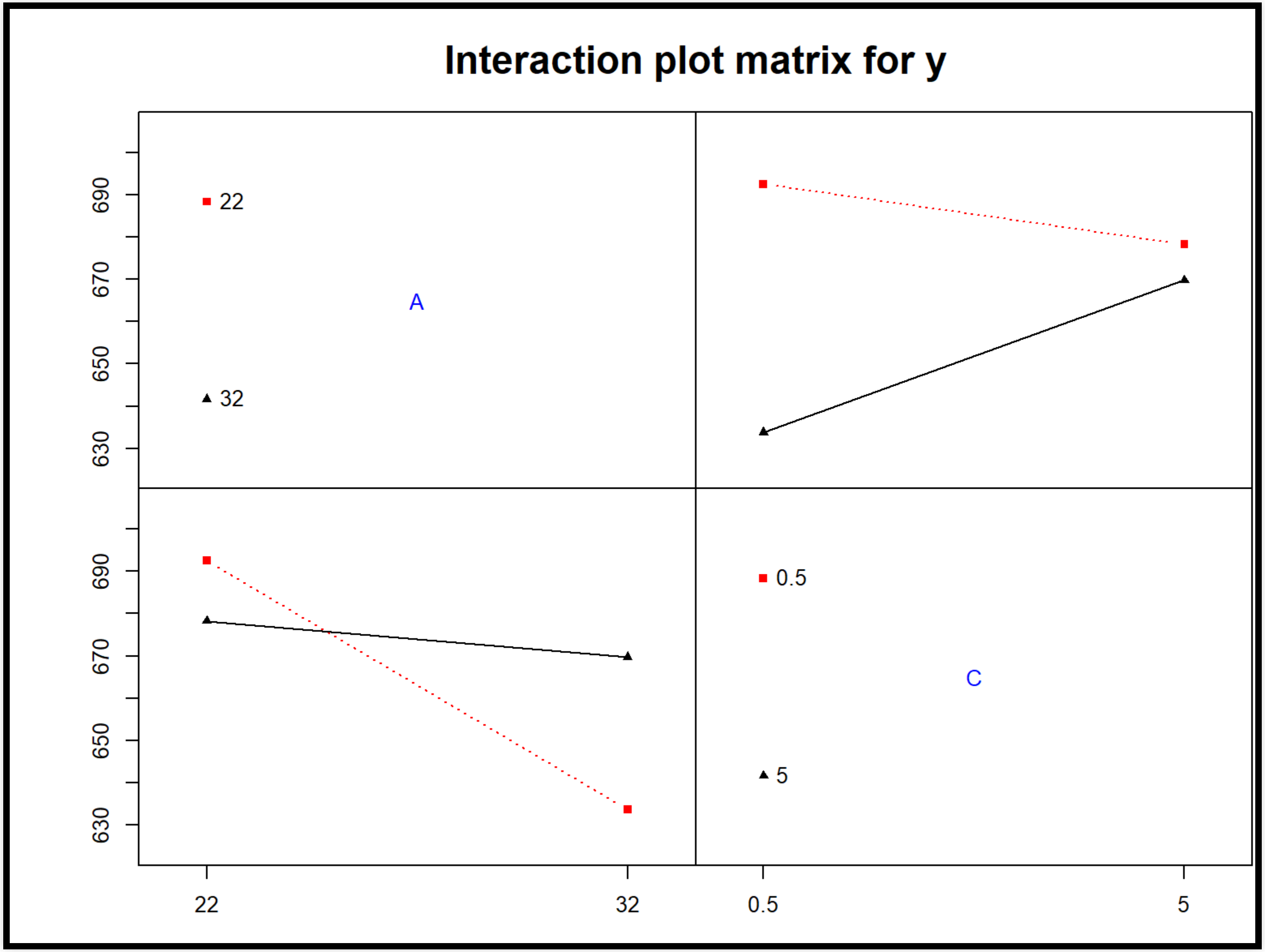
```
C_Warmup <- volt$C
with(volt, (interaction.plot(A, C_Warmup, y, type = "b",
                             pch = c(24,22), leg.bty = "o",
                             xlab = "Temperature",ylab = "Voltage")))
```


C_Warmup
5
0.5
Voltage
690
680
670
660
650
640
22
32
Temperature

```
## NULL
```

Exemplo (R)

```
IAPlot(modv, select = c(1,3))
```



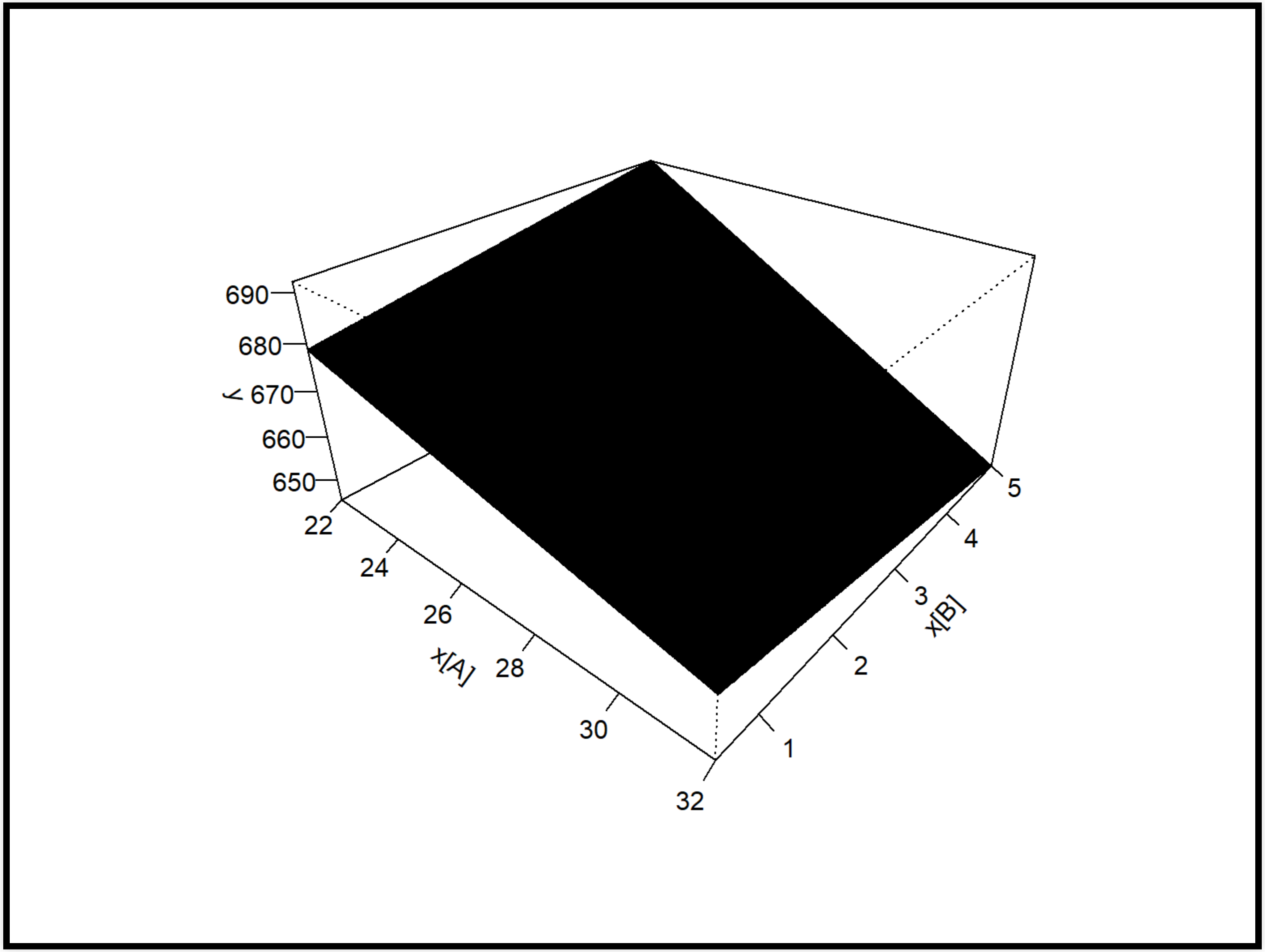
Interaction plot matrix for y
690
670
650
630
22
32
A
0.5
5
C
22
32
0.5
5

Exemplo

- A ortogonalidade do delineamento permite uma equação de predição reduzida

$$\hat{y} = 666.563 - 16.813\left(\frac{Temp - 27}{5}\right) - 6.688\left(\frac{CWarm - 2.75}{2.25}\right)\left(\frac{Temp - 27}{5}\right)$$

Exemplo (R)



Exemplo (R)

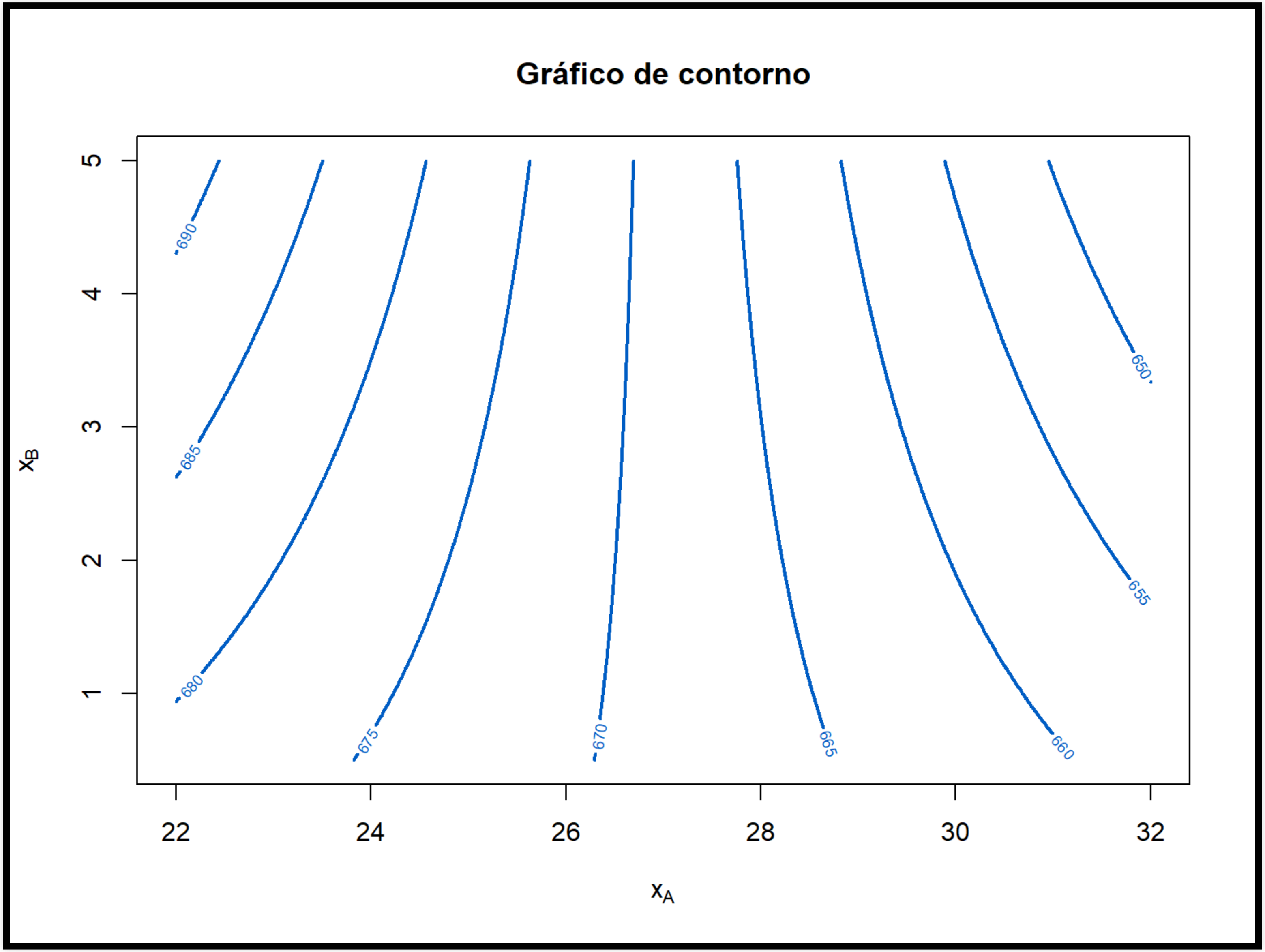


Gráfico de contorno
690
685
680
675
670
665
660
655
650
22
24
26
28
30
32
1
2
3
4
5
x_A
x_B

Análise com uma replicação por célula

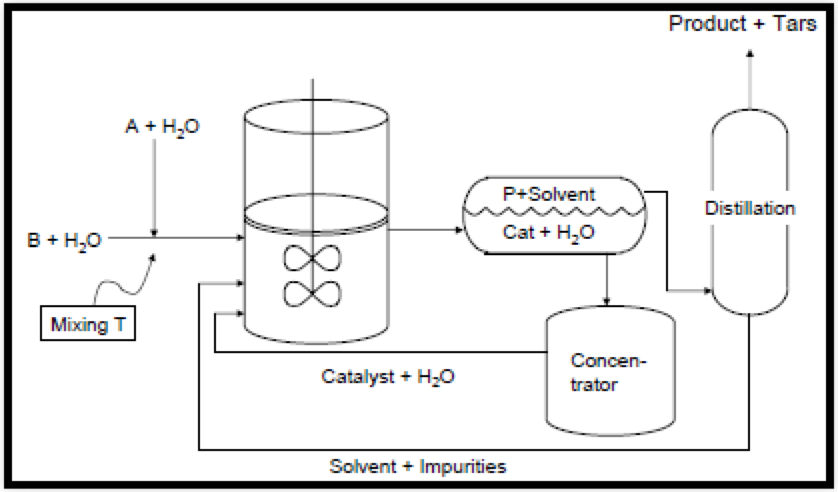
Análise com uma replicação por célula

- Delineamentos fatoriais com uma replicação por célula são usualmente chamados de **delineamentos sem replicação**.
- Quando há poder adequado para detectar efeitos com $n = 1$ replicação por célula, ou combinação de tratamento, não há necessidade de dobrar o trabalho experimental replicando cada experimento.
- No entanto, em um delineamento fatorial não replicado, surge um problema já discutido.
  - **Pergunta:** qual é este problema?

Análise com uma replicação por célula

- Haverá zero graus de liberdade para calcular SS_E e, portanto, nenhum teste F para os efeitos.
- No entanto, quando há múltiplos fatores em um fatorial de dois níveis, existem **ferramentas gráficas simples** que permitem a detecção dos efeitos significativos.
- Como nem todos os efeitos principais e interações em um experimento de 2^k devem ser significativos, os níveis de fatores insignificantes e combinações de níveis definidos pelas interações insignificantes são **equivalentes** a ter replicações no delineamento.
- Ferramentas gráficas permitem que os efeitos significativos (ou coeficientes de regressão equivalentes) sejam reconhecidos.

Exemplo



Product + Tars
A + H_2O
B + H_2O
Mixing T
P+Solvent
Cat + H_2O
Distillation
Concen-
trator
Catalyst + H_2O
Solvent + Impurities

Exemplo

- A figura anterior é um diagrama de um **processo químico contínuo**.

1. Neste processo, correntes contínuas de dois reagentes, A e B, são combinadas em uma junção chamada de mistura-T, onde elas começam a reagir.
2. A mistura então flui para um reator e é combinada com solvente e um catalisador e a reação é completada.
3. O resultado da reação flui para um tanque separador, onde o produto final flutua para o topo em uma fase de solvente, enquanto o catalisador e a água vão para o fundo do tanque.
4. O catalisador é concentrado e enviado de volta ao reator, enquanto o produto, subprodutos e solvente são levados para uma coluna de destilação onde o produto é removido e o solvente é reciclado para o reator.

Exemplo

- Um dos problemas vivenciados nesse processo foi a produção de **subprodutos** (resíduos).
- Com o tempo, esses resíduos entupiriam o reator e forçariam o desligamento do processo para limpeza.
- Também exigiu uma etapa adicional do processo para purificar o produto final.
- Os engenheiros decidiram conduzir experimentos para ver se poderiam **aumentar a conversão percentual**, o que **reduziria a quantidade de subprodutos**.

Exemplo

- Os fatores que eles achavam que poderiam afetar a conversão percentual são:
  - A: Excesso de Reagente A (sobre quantidade molar)
  - B: Concentração do Catalisador
  - C: Pressão no Reator
  - D: Temperatura da Mistura Revestida-T

Exemplo

- **Dois níveis** de cada fator foram escolhidos.
  - Estes foram espalhados tão largamente quanto os engenheiros julgaram viável, a fim de maximizar a chance de detectar os efeitos dos fatores com apenas dois níveis.
- Durante a experimentação, os níveis dos fatores seriam alterados após um intervalo de tempo fixo.
- A unidade experimental para isto seria os reagentes particulares, o catalisador e o solvente que entrava na zona de reação durante uma determinada rodada.
- A resposta Y seria a **conversão percentual** calculada a partir do produto produzido durante uma rodada.
- Foi estabelecido que um delineamento sem replicação seria suficiente para detectar os efeitos.

Exemplo

Random Run No.	A	B	C	D	Y
15	−	−	−	−	45
13	+	−	−	−	41
11	−	+	−	−	90
1	+	+	−	−	67
10	−	−	+	−	50
2	+	−	+	−	39
3	−	+	+	−	95
12	+	+	+	−	66
16	−	−	−	+	47
8	+	−	−	+	43
9	−	+	−	+	95
14	+	+	−	+	69
6	−	−	+	+	40
5	+	−	+	+	51
7	−	+	+	+	87
4	+	+	+	+	72

Exemplo (R)

```
library(daewr)
data(chem)
head(chem)
```

```
##    A  B  C  D  y
## 1 -1 -1 -1 -1 45
## 2  1 -1 -1 -1 41
## 3 -1  1 -1 -1 90
## 4  1  1 -1 -1 67
## 5 -1 -1  1 -1 50
## 6  1 -1  1 -1 39
```

Exemplo (R)

```
modf <- lm( y ~ A*B*C*D, data = chem)
anova(modf)
```

```
## Analysis of Variance Table
##
## Response: y
##           Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
## A          1  637.6   637.6
## B          1 5076.6  5076.6
## C          1    0.6     0.6
## D          1    7.6     7.6
## A:B        1  451.6   451.6
## A:C        1   10.6    10.6
## B:C        1    1.6     1.6
## A:D        1   68.1    68.1
## B:D        1    0.1     0.1
## C:D        1    7.6     7.6
## A:B:C      1    0.6     0.6
## A:B:D      1    7.6     7.6
## A:C:D      1   95.1    95.1
## B:C:D      1    3.1     3.1
```

Exemplo (R)

```
summary(modf)
```

```
##
## Call:
## lm.default(formula = y ~ A * B * C * D, data = chem)
##
## Residuals:
## ALL 16 residuals are 0: no residual degrees of freedom!
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  62.3125         NA      NA       NA
## A            -6.3125         NA      NA       NA
## B            17.8125         NA      NA       NA
## C             0.1875         NA      NA       NA
## D             0.6875         NA      NA       NA
## A:B          -5.3125         NA      NA       NA
## A:C           0.8125         NA      NA       NA
## B:C          -0.3125         NA      NA       NA
## A:D           2.0625         NA      NA       NA
```

Exemplo

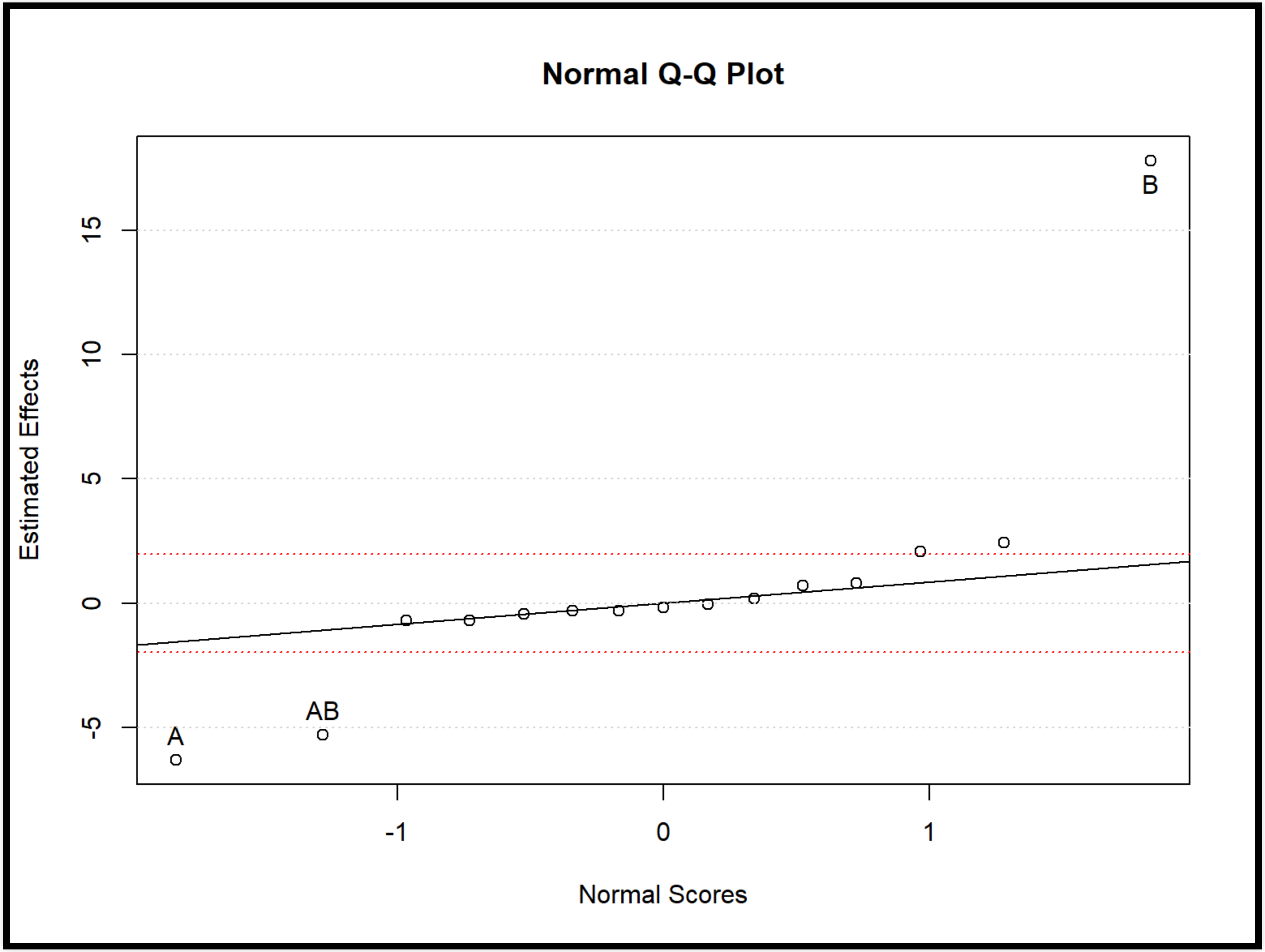
- Os coeficientes de regressão para os efeitos principais A e B, juntamente com a interação AB, são os maiores efeitos, mas um gráfico deve ser usado para determinar quais são significativos.
- Os efeitos em um delineamento fatorial de dois níveis são a diferença de duas médias.
- Se as mudanças nos níveis dos fatores não causarem uma mudança na resposta, o efeito será apenas a diferença nas médias dos dados aleatórios (devido a flutuações aleatórias no erro experimental).

Exemplo

- Se nenhum dos fatores ou interações causar mudanças na resposta, todo o **conjunto de efeitos**, ou **coeficientes de regressão**, devem aparecer como uma amostra da distribuição normal com média zero devido ao Teorema Central do Limite.
- Portanto, se fizermos um gráfico de probabilidade normal dos efeitos, os **efeitos insignificantes** deverão estar ao longo de uma linha reta e quaisquer **efeitos significativos** ou interações deverão aparecer como valores discrepantes no gráfico.

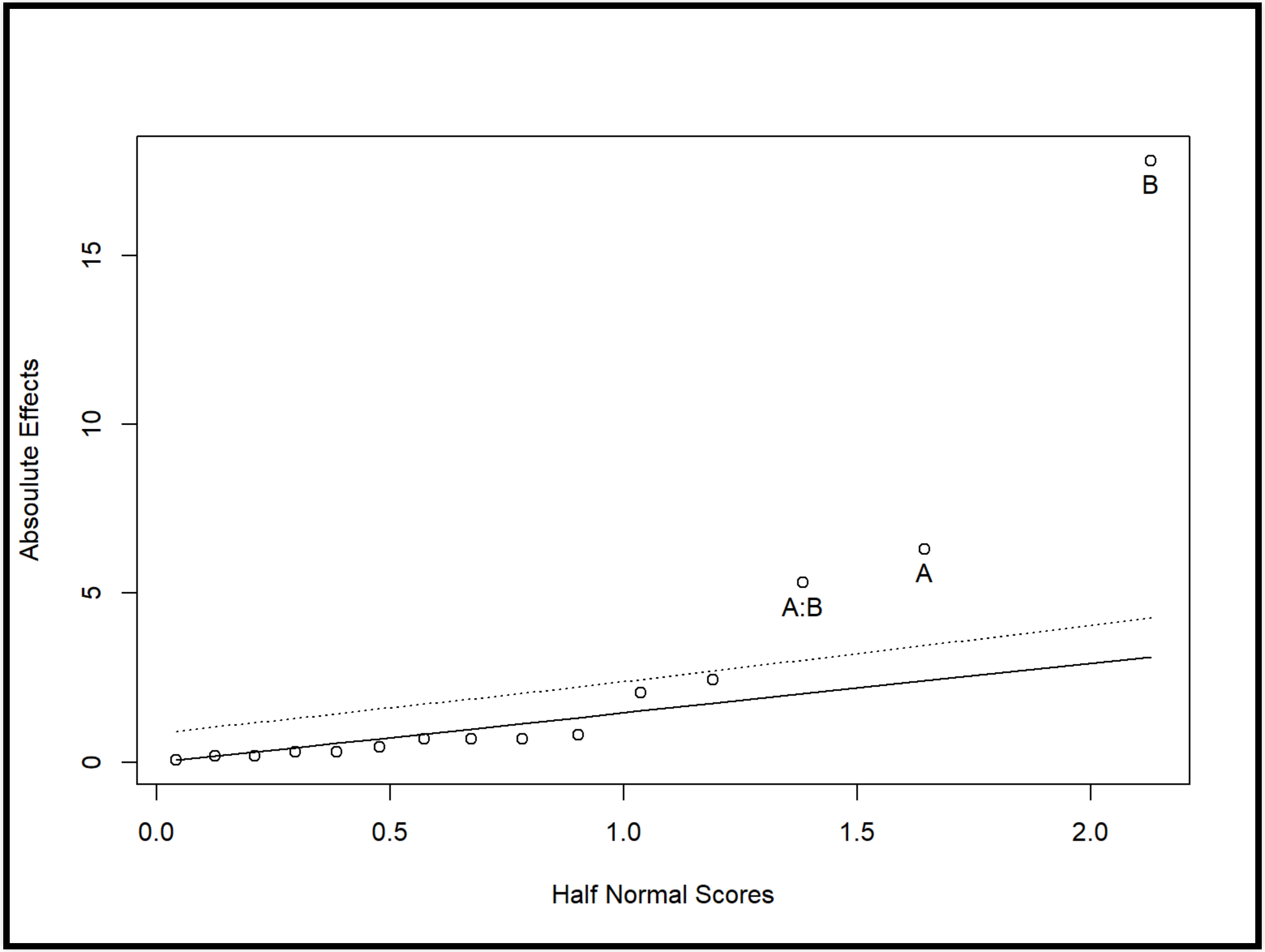
Exemplo (R)

```
fullnormal(coef(modf)[-1], alpha = 0.025)
abline(h =  seq(-5, 15, by = 5), col = "lightgrey", lty = 3)
abline(h =  1.96 * c(-1, 1), col = "red", lty = 3)
```


Normal Q-Q Plot
Estimated Effects
Normal Scores
15
10
5
0
-5
-1
0
1
B
A
AB

Exemplo (R)

```
LGB( coef(modf)[-1], rpt = FALSE)
```



B
A
A:B
15
10
5
0
Absoulute Effects
0.0
0.5
1.0
1.5
2.0
Half Normal Scores

Exemplo (R)

```
LGB( coef(modf)[-1], rpt = TRUE, plt = FALSE)
```

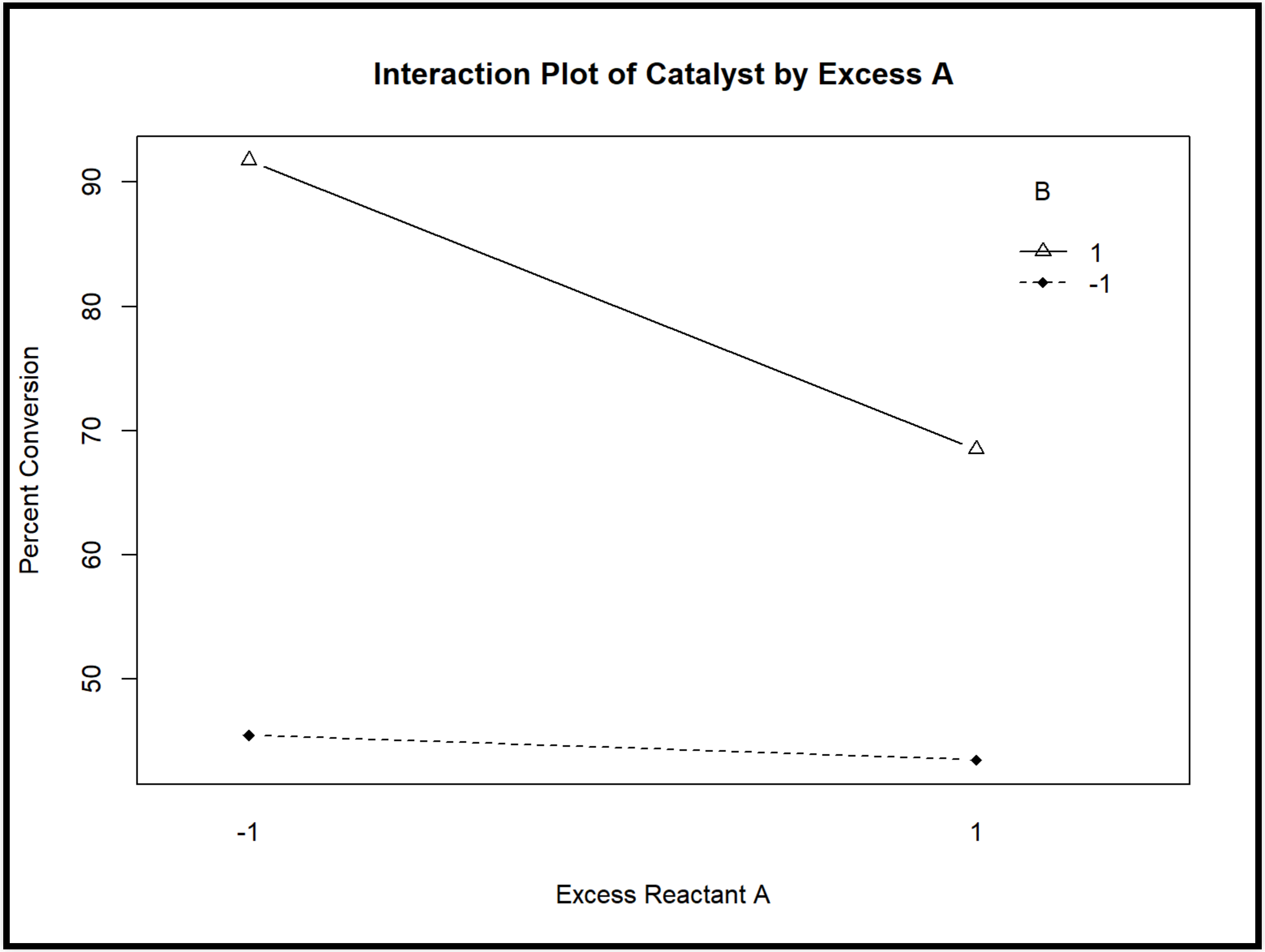
```
## Effect Report
##
## Label      Half Effect    Sig(.05)
## A          -6.3125        yes
## B          17.8125        yes
## C           0.1875        no
## D           0.6875        no
## A:B        -5.3125        yes
## A:C         0.8125        no
## B:C        -0.3125        no
## A:D         2.0625        no
## B:D        -0.0625        no
## C:D        -0.6875        no
## A:B:C      -0.1875        no
## A:B:D      -0.6875        no
## A:C:D       2.4375        no
## B:C:D      -0.4375        no
## A:B:C:D    -0.3125        no
```

Exemplo

- **Pergunta:** o que podemos concluir?

Exemplo (R)

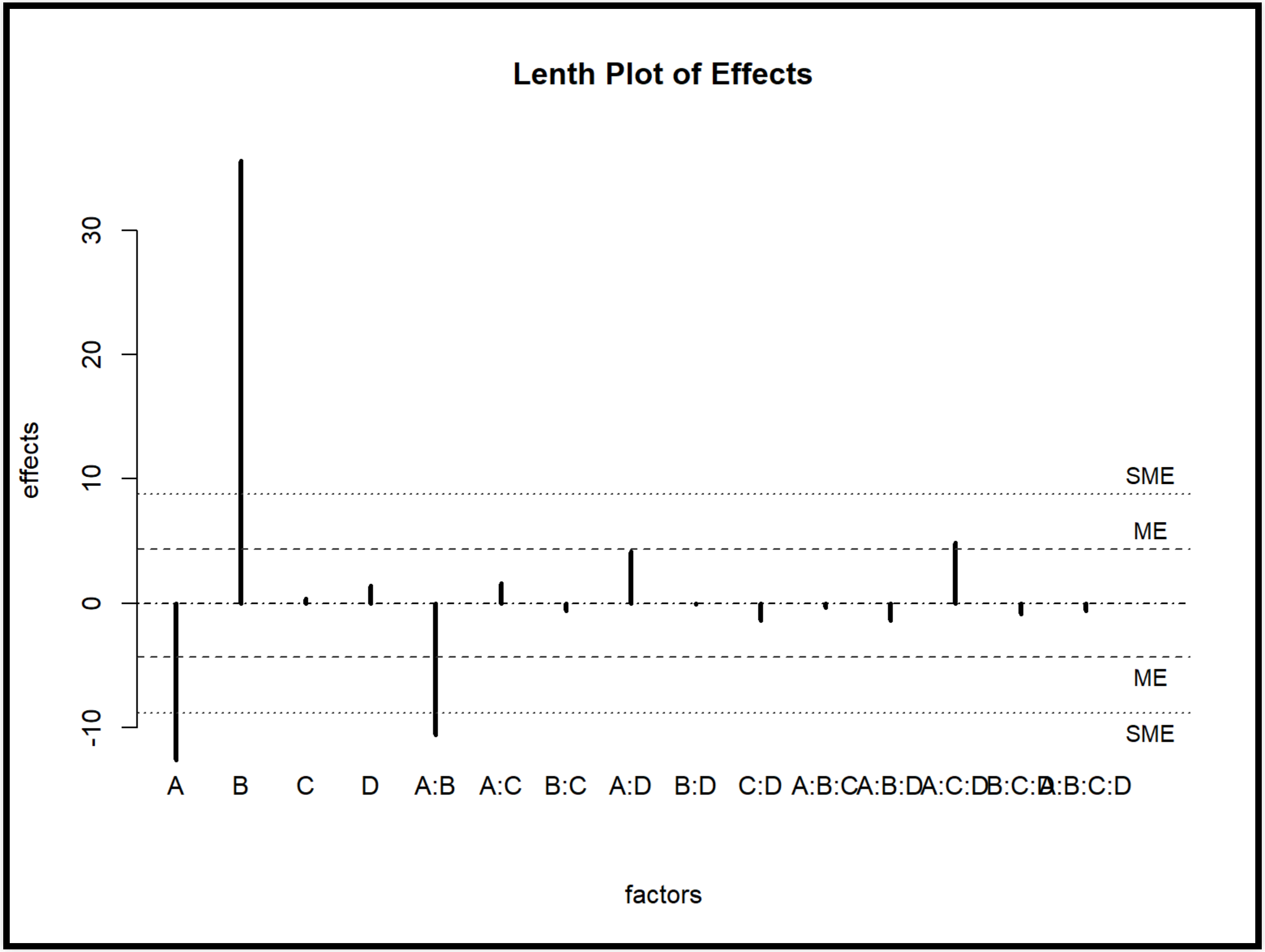
```
with(chem,
     (interaction.plot( A, B, y, type = "b",
                        pch = c(18,24),
                        main = "Interaction Plot of Catalyst by Excess A"
                        xlab = "Excess Reactant A",
                        ylab = "Percent Conversion")))
```


Interaction Plot of Catalyst by Excess A
Percent Conversion
90
80
70
60
50
B
1
-1
-1
1
Excess Reactant A

```
## NULL
```

Exemplo (R)

```r
library(BsMD)
LenthPlot(modf, main = "Lenth Plot of Effects")
```




```
##    alpha      PSE       ME      SME
## 0.050000 1.687500 4.337857 8.806474
```

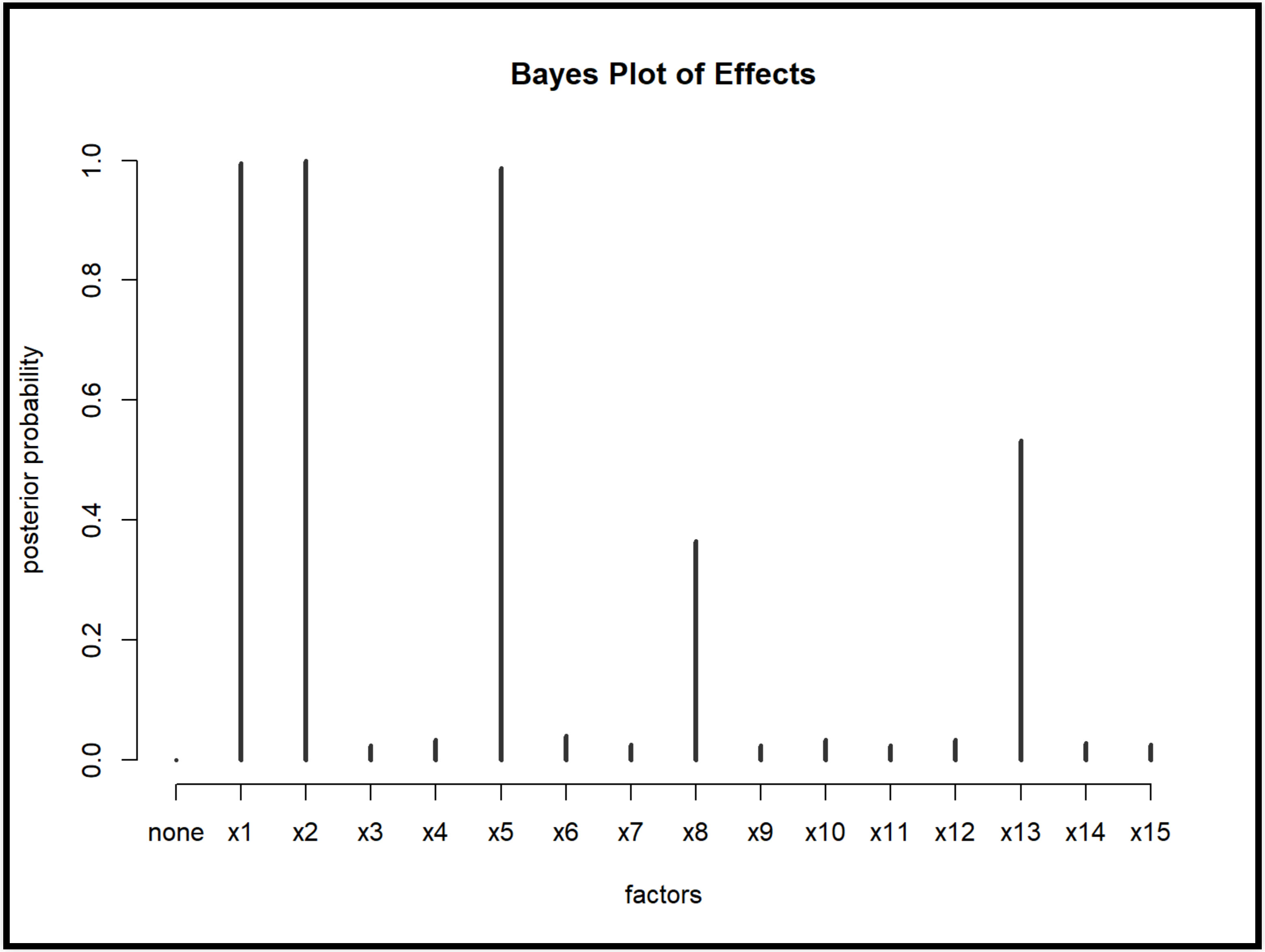
Exemplo (R)

```
X <- model.matrix(modf)[ , 2:16]
y <- chem$y
Chem.BsProb <- BsProb( X = X, y = y,
                       blk = 0, mFac = 15,
                       mInt = 1, p = 0.2,
                       g = 2.49, ng = 1,
                       nMod = 10)
summary(Chem.BsProb)
```

```
##
##  Calculations:
##      nRun      nFac      nBlk      mFac      mInt         p         g    totMo
##     16.00     15.00      0.00     15.00      1.00      0.20      2.49  32768.0
##
##  Factor probabilities:
##      Factor Code  Prob
## 1      none none 0.000
## 2         A   x1 0.995
## 3         B   x2 1.000
## 4         C   x3 0.025
## 5         D   x4 0.035
## 6       A:B   x5 0.987
## 7       A:C   x6 0.040
## 8       B:C   x7 0.026
## 9       A:D   x8 0.365
## 10      B:D   x9 0.024
## 11      C:D  x10 0.035
```

Exemplo (R)

```r
plot( Chem.BsProb, main = "Bayes Plot of Effects" )
```



Bayes Plot of Effects
posterior probability
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
none
x1
x2
x3
x4
x5
x6
x7
x8
x9
x10
x11
x12
x13
x14
x15
factors

Veja também

- **R Commander:** jlawson.byu.edu
- Por que não utilizamos o teste de Tukey com 1 grau de liberdade para testar a suposição de não aditividade (ausência de interação)?