

Delineamento e Análise de Experimentos

Professora Juliana Betini Fachini Gomes
e-mail: jfachini@unb.br

Brasília - 2023

ANOVA

- Para o modelo de efeitos (ANOVA):

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

em que μ é a média geral, τ_i é a média ou efeito dos tratamentos e ε_{ij} componente de erro aleatório.

- As hipótese de interesse são definidas por:

$$\begin{cases} H_0 : \tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_a = 0, & (\text{O efeito de tratamento é nulo}) \\ H_1 : \exists \tau_i \neq 0 \end{cases}$$

- Ou de forma equivalente:

$$\begin{cases} H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_a \\ H_1 : \exists \mu_i \neq \mu_j, \quad i \neq j, \end{cases}$$

em que $\mu_i = \mu + \tau_i$.

ANOVA

- Só é possível realizar a análise de variância se certas condições, ou seja, certas exigências do modelo matemático forem satisfeitas:
 - Os erros devem ter distribuição normal;
 - Os erros devem ser independentes;
 - Os erros deve ter a mesma variância, ou seja, deve existir homocedasticidade.
- Pode-se representar essas condições por:

$$\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2). \quad (2)$$

ANOVA

$$E(QM_{Res}) = E\left(\frac{SQ_{Res}}{N - a}\right) = \frac{1}{N - a} E\left[\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2\right] = \sigma^2$$

e

$$E(QM_{Trat}) = \sigma^2 + \frac{n \sum_{i=1}^a \tau_i^2}{a - 1}$$

- Ou seja, $QM_{Res} = SQ_{Res}/(N - a)$ estima σ^2 ;
- E $QM_{Trat} = SQ_{Trat}/(a - 1)$ também estima σ^2 , caso não há diferença entre as médias dos tratamentos (o que implica em $\tau_i = 0$).

ANOVA

- Como os graus de liberdade de SQ_{Trat} e SQ_{Res} somam $N - 1$, que é o número de graus de liberdade da SQ_T , o Teorema de Cochran estabelece que SQ_{Trat}/σ^2 e SQ_{Res}/σ^2 são variáveis aleatórias independentes.
- Portanto, se a hipótese nula de nenhuma diferença nas médias de tratamento for verdadeira, a razão

$$F_0 = \frac{SQ_{Trat}/(a - 1)}{SQ_{Res}/(N - a)} = \frac{QM_{Trat}}{QM_{Res}}, \quad (3)$$

segue distribuição F com $a - 1$ e $N - a$ graus de liberdade.

- A equação (3) é a estatística do teste para a hipótese de não haver diferenças nas médias de tratamento.

ANOVA

- A partir da esperança dos quadrados médios, verifica-se que, em geral, QM_{Res} é um estimador imparcial de σ^2 ;
- Além disso, sob a hipótese nula ser verdadeira, QM_{Trat} também é um estimador imparcial de σ^2 ;
- No entanto, se a hipótese nula for falsa, o valor esperado de QM_{Trat} é maior que σ^2 ;
- Portanto, sob a hipótese alternativa, o valor esperado do numerador da estatística de teste (3) é maior que o valor esperado do denominador, e deve-se rejeitar H_0 para valores da estatística do teste que são muito grandes;
- Portanto, deve-se rejeitar H_0 e concluir que existem diferenças nas médias de tratamento se $F_0 > F_{\alpha, (a-1), (N-a)}$.

ANOVA

TABLE: Tabela de Análise de Variância

Fonte de Variação	SQ	g.l.	QM	F
Tratamentos	SQ_{Trat}	$a - 1$	QM_{Trat}	QM_{Trat} / QM_{Res}
Resíduo	SQ_{Res}	$N - a$	QM_{Res}	
Total	SQ_T	$N - 1$		

em que $N = an$.

DIAGNÓSTICO

- É fundamental verificar a adequabilidade do modelo antes de tirar conclusões sobre o processo inferencial.
- Verificar as características do modelo.
- Para avaliar a adequabilidade do modelo serão usados:
 - Métodos gráficos
 - Testes estatísticos

SUPosição DE NORMALIDADE

- Pode ser inicialmente verificada ao construir um histograma dos resíduos. Se a suposição sobre os erros for satisfeita, este gráfico deve se parecer com uma amostra de uma distribuição normal centrada em zero;
- Outro recurso gráfico importante é o **Gráfico de Probabilidade Normal dos resíduos** - cada resíduo é colocado em um gráfico versus seu valor esperado sob normalidade.
- Se o resultado gráfico for aproximadamente linear, há evidências da suposição de normalidade.
- Se o resultado gráfico afasta substancialmente da linearidade, não há evidências de que a distribuição do erro é normal.
- Teste de hipótese também pode ser utilizado, como o teste de Shapiro-Wilk.

SUPosição DE INDEPENDÊNCIA

- O objetivo é verificar se existe qualquer correlação entre os erros que são próximos um dos outros em uma sequência;
- Quando os erros são independentes espera-se que os resíduos versus a ordem das observações flutuem em um padrão mais ou menos aleatório em torno da linha de referência Zero.

VARIÂNCIA CONSTANTE

- Gráficos dos resíduos versus valores ajustados podem ser usados para verificar se a variância dos erros é constante. Pois, os sinais dos resíduos não são importantes para examinar a constância da variância do erro;
- Testes de hipóteses.

VARIÂNCIA CONSTANTE

Para verificar as hipóteses:

$$\begin{cases} H_0 : \sigma_1 = \sigma_2 = \dots = \sigma_a = 0 \\ H_1 : \exists \sigma_i \neq 0 \end{cases}$$

pode-se utilizar os seguintes testes de hipóteses:

- F ;
- Bartlett, e
- Levene

ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO

- Após verificar a qualidade de ajuste do modelo, o próximo passo é estimar os parâmetros do modelo;
- Ao considerar o modelo de efeitos:

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

em que μ é a média geral, τ_i é a média ou efeito dos tratamentos e ε_{ij} componente de erro aleatório.

- Os parâmetros a serem estimados são: μ e τ_i ;
- O método de estimação de Mínimos Quadrados será utilizado.

ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO

- Para encontrar os estimadores de mínimos quadrados de μ e τ_i , é necessário escrever a soma dos quadrados dos erros:

$$L = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n \varepsilon_{ij}^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \mu - \tau_i)^2 \quad (4)$$

e os valores de μ e τ_i que minimizam a equação (4) são os estimadores de mínimos quadrados, $\hat{\mu}$ e $\hat{\tau}_i$.

- Os valores apropriados seriam as soluções para as $a + 1$ equações simultâneas:

$$\frac{\partial L}{\partial \mu} \Big|_{\hat{\mu}, \hat{\tau}_i} = 0$$

e

$$\frac{\partial L}{\partial \tau_i} \Big|_{\hat{\mu}, \hat{\tau}_i} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, a.$$

ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO

- Derivando a equação (4) em relação a μ e τ_i e igualando a zero, tem-se que:

$$-2 \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \hat{\mu} - \hat{\tau}_i) = 0$$

e

$$-2 \sum_{j=1}^n (y_{ij} + \hat{\mu} - \hat{\tau}_i) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, a.$$

- Ao aplicar a restrição: $\sum_{i=1}^a \hat{\tau}_i = 0$, tem-se a seguinte solução para o sistema de equações normais:

$$\hat{\mu} = \bar{y}_{..}$$

e

$$\hat{\tau}_i = \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..}$$

ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO

- Um intervalo de confiança para a média do i -ésimo tratamento pode ser facilmente determinada;
- A média do i -ésimo tratamento é

$$\mu_i = \mu + \tau_i$$

- Então, um estimador pontual para μ_i é dado por:

$$\hat{\mu}_i = \hat{\mu} + \hat{\tau}_i = \bar{y}_i.$$

- Ao assumir que a distribuição dos erro é normal, a média de cada tratamento, \bar{y}_i , tem distribuição $N(\mu_i, \sigma^2/n)$;
- Se σ^2 fosse conhecido, a distribuição normal seria usada para construir o intervalo de confiança;

ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO

- Ao usar o QM_{Res} como estimador de σ^2 , deve-se usar a distribuição t-Student para obter o intervalo de confiança;
- Sendo assim, o intervalo $100(1 - \alpha)\%$ para a i -ésima média de tratamento, μ_i , é definido por:

$$\bar{y}_i. - t_{\alpha/2, N-a} \sqrt{\frac{QM_{Res}}{n}} \leq \mu_i \leq \bar{y}_i. + t_{\alpha/2, N-a} \sqrt{\frac{QM_{Res}}{n}} \quad (5)$$

- Quando o pesquisador quer construir o intervalo de confiança para várias médias de tratamento, deve-se fazer uma correção no nível de confiança usando o método de Bonferroni;
- Nesse caso deve-se usar $\alpha/(2r)$ na equação (5), em que r é a quantidade de intervalos de confiança simultâneos.

COMPARAÇÕES DE MÉDIAS

- Ao rejeitar a hipótese nula: $H_0 : \tau_1 = \tau_2 = \dots = \tau_a = 0$ ou $H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_a$
- A pergunta a ser feita é: Qual(is) efeito(s) de tratamento é(são) diferente(s) de zero?

COMPARAÇÕES DE MÉDIAS

Alguns teste podem ser utilizados para tal objetivo. São eles:

- Teste de Fisher;
- Teste de Tukey;
- Teste de Duncan;
- Teste de Scheffé.

TESTE DE FISHER

- Considere a hipótese $H_0 : \mu_i = \mu_j$, para $i \neq j$;
- A estatística do teste é definida por:

$$t_0 = \frac{\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{j.}}{\sqrt{QM_{Res}(\frac{1}{n_i} + \frac{1}{n_j})}} \quad (6)$$

- Supondo uma hipótese alternativa bilateral ($H_1 : \mu_i \neq \mu_j$), o par de médias μ_i e μ_j terá diferença significativa se $|\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{j.}| > t_{\alpha/2, N-a} \sqrt{QM_{Res}(1/n_i + 1/n_j)}$.
- A quantidade

$$LSD = t_{\alpha/2, N-a} \sqrt{QM_{Res}(1/n_i + 1/n_j)}, \quad (7)$$

é conhecida como diferença mínima significativa.

TESTE DE FISHER

- Ao usar o procedimento LSD de Fisher, simplesmente comparamos a diferença observada entre cada par de médias com o LSD correspondente;
- É possível observar que o procedimento LSD de Fisher controla a taxa de erro para cada comparação par a par individual, mas não controla a taxa de erro experimental.

TESTE DE TUKEY

- Suponha que, após rejeitar a hipótese nula de igualdade de tratamento na ANOVA, deseja-se testar todas as comparações de médias:

$$H_0 : \mu_i = \mu_j$$

$$H_1 : \mu_i \neq \mu_j$$

para todo $i \neq j$.

- O procedimento de Tukey controla o erro experimental no nível selecionado. Este é um excelente procedimento de espionagem de dados quando o interesse está em pares de médias;

TESTE DE TUKEY

- O teste de Tukey considerar a seguinte estatística de intervalo estudentizado:

$$q = \frac{\bar{y}_{max} - \bar{y}_{min}}{\sqrt{QM_{Res}/n}},$$

em que \bar{y}_{max} e \bar{y}_{min} são a maior e menor média, respectivamente, para o grupo de p amostras de médias.

- O valor de q deve ser comparado com valores de $q(p, f)$, em que $q()$ é o percentil da estatística de intervalo estudentizado;
- Em que f é o número de graus de liberdade associados ao QM_{Res} ;
- Para amostras de mesmo tamanho, o teste de Tukey declara duas médias significativamente diferentes se o valor absoluto de suas diferenças amostrais excedem:

$$T_{\alpha} = q_{\alpha}(a, f) \sqrt{\frac{QM_{Res}}{n}}. \quad (8)$$

TESTE DE TUKEY

- De forma equivalente, pode-se construir um conjunto de $100(1 - \alpha)\%$ intervalos de confiança para todos os pares de médias, ou seja:

$$\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{j.} - q_{\alpha}(a, f) \sqrt{\frac{QM_{Res}}{n}} \leq \mu_i - \mu_j \leq \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{j.} + q_{\alpha}(a, f) \sqrt{\frac{QM_{Res}}{n}}$$

EXEMPLO

Uma engenheira está interessada em investigar a relação entre a configuração de potência de rádio frequência (RF) e a taxa de gravação para esta ferramenta. O objetivo de um experimento como este é modelar a relação entre a taxa de gravação e a potência de RF e especificar a configuração de potência que dará uma taxa de gravação desejada.

EXEMPLO

Ela está interessada em um determinado gás (C_2F_6) e uma abertura de 0,80cm para testar quatro níveis de potência de RF: 160, 180, 200 e 220 W. Ela decidiu testar cinco placas em cada nível de potência de RF.

Suponha que a engenheira execute o experimento de forma aleatória.

EXEMPLO

As observações que ela obteve sobre a taxa de gravação são mostradas na Tabela 1.

TABELA 1 : Dados de taxa de gravação (em A/min) do experimento de gravação com plasma

Potência	Observações					Total
	1	2	3	4	5	
160	575	542	530	539	570	2756
180	565	593	590	579	610	2937
200	600	651	610	637	629	3127
220	725	700	715	685	710	3535

CONTRASTES

- Considere o experimento da gravação de plasma. Como a hipótese nula foi rejeitada, sabemos que algumas configurações de energia produzem taxas de gravação diferentes das outras, mas quais realmente causam essa diferença?
- Podemos suspeitar no início do experimento que 200W e 220W produzem o mesma taxa de gravação, o que implica que gostaríamos de testar a hipótese:

$$H_0 : \mu_3 = \mu_4$$

$$H_1 : \mu_3 \neq \mu_4$$

ou equivalentemente:

$$H_0 : \mu_3 - \mu_4 = 0$$

$$H_1 : \mu_3 - \mu_4 \neq 0$$

CONTRASTES

- Ou, se tivéssemos suspeitado no início do experimento que a média dos níveis mais baixos de potência não diferia da média dos níveis mais altos de potência, então a hipótese teria sido:

$$H_0 : \mu_1 + \mu_2 = \mu_3 + \mu_4$$

$$H_1 : \mu_1 + \mu_2 \neq \mu_3 + \mu_4$$

ou

$$H_0 : \mu_1 + \mu_2 - \mu_3 - \mu_4 = 0$$

$$H_1 : \mu_1 + \mu_2 - \mu_3 - \mu_4 \neq 0$$

CONTRASTES

- Muitos métodos de comparações múltiplas usam a ideia de um contraste.
- Em geral, um contraste é uma combinação linear dos parâmetros na forma:

$$\Gamma = \sum_{i=1}^a c_i \mu_i,$$

em que a soma das constantes do contraste é igual a zero, isto é, $\sum_{i=1}^a c_i = 0$.

- Ambas as hipóteses acima podem ser expressas em termos dos contrastes:

$$H_0 : \sum_{i=1}^a c_i \mu_i = 0$$

$$H_1 : \sum_{i=1}^a c_i \mu_i \neq 0$$

Qual a estatística do Teste nesse caso?

CONTRASTES

- Qual a estatística do Teste nesse caso?
- Há dois caminhos: teste t e teste F

CONTRASTES

- Primeiro vamos usar o teste t ;
- Então, é preciso escrever o contraste de interesse em termos das médias de tratamento. Logo, tem-se que:

$$C = \sum_{i=1}^a c_i \bar{y}_i.$$

- A variância de C é:

$$V(C) = \frac{\sigma^2}{n} \sum_{i=1}^a c_i^2, \quad (9)$$

quando todos os tratamentos têm o mesmo tamanho.

CONTRASTES

- Sob a hipótese nula ser verdadeira, a estatística do teste é definida por:

$$\frac{\sum_{i=1}^a c_i \bar{y}_i. - 0}{\sqrt{\frac{\sigma^2}{n} \sum_{i=1}^a c_i^2}},$$

ou

$$\frac{\sum_{i=1}^a c_i \bar{y}_i.}{\sqrt{\frac{\sigma^2}{n} \sum_{i=1}^a c_i^2}},$$

com distribuição $N(0, 1)$.

CONTRASTES

- Agora vamos substituir a variância desconhecida, σ^2 , por sua estimativa, o erro quadrático médio e a estatística é definida por:

$$t_0 = \frac{\sum_{i=1}^a c_i \bar{y}_i}{\sqrt{\frac{QM_{Res}}{n} \sum_{i=1}^a c_i^2}}, \quad (10)$$

- A hipótese nula será rejeitada se $|t_0| > t_{\alpha/2, N-a}$.

CONTRASTES

- A segunda abordagem usa o teste F ;
- Então, ao elevar ao quadrado uma variável aleatória t com ν graus de liberdade, tem-se uma variável aleatória F com 1 grau de liberdade do numerador e ν graus de liberdade do denominador. Portanto, tem-se que:

$$F_0 = t_0^2 = \frac{(\sum_{i=1}^a c_i \bar{y}_i.)^2}{\frac{QM_{Res}}{n} \sum_{i=1}^a c_i^2}. \quad (11)$$

- A hipótese nula será rejeitada se $F_0 > F_{\alpha,1,N-a}$.

CONTRASTES

- A estatística do teste (11) pode ser escrita como:

$$F_0 = \frac{QM_C}{QM_{Res}} = \frac{SQ_C/1}{QM_{Res}},$$

em que a soma de quadrados do contraste é:

$$SQ_C = \frac{(\sum_{i=1}^a c_i \bar{y}_i.)^2}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^a c_i^2}, \quad (12)$$

e possui 1 grau de liberdade.

CONTRASTES

- Em vez de realizar teste de hipótese para o contraste, também é possível construir um Intervalo de Confiança;
- Considere o contraste de interesse:

$$\Gamma = \sum_{i=1}^a c_i \mu_i$$

- Ao substituir as médias dos tratamentos por seu respectivo estimador, tem-se que

$$C = \sum_{i=1}^a c_i \bar{y}_i.$$

CONTRASTES

- Como

$$E\left(\sum_{i=1}^a c_i \bar{y}_{i.}\right) = \sum_{i=1}^a c_i \mu_i \quad e \quad V(C) = \frac{\sigma^2}{n} \sum_{i=1}^a c_i^2$$

- O intervalo de confiança para o contraste $\sum_{i=1}^a c_i \mu_i$ é:

$$IC = \left(\sum_{i=1}^a c_i \bar{y}_{i.} \pm t_{\alpha/2, N-a} \sqrt{\frac{QM_{Res}}{n} \sum_{i=1}^a c_i^2} \right). \quad (13)$$

CONTRASTES

- Um caso especial de contraste é o contraste ortogonal;
- Dois contraste com coeficientes c_i e d_i são ortogonais se:

$$\sum_{i=1}^a c_i d_i = 0.$$

- Para a tratamentos, o conjunto de $a - 1$ contrastes ortogonais particiona a soma de quadrados de tratamentos em $a - 1$ componentes independentes com um único grau de liberdade para cada componente.
- Assim, os testes realizados com contrastes ortogonais são independentes.