

Delineamento e Análise de Experimentos

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

Brasília - 2023

Kutner et al. (2013) enfatizam que o desenho adequado de um estudo científico é muito mais importante do que as técnicas específicas usadas na análise.

UNIDADE EXPERIMENTAL OU PARCELA

- Segundo Barbin (2003), unidade experimental ou parcela são os indivíduos (plantas, animais, aparelho eletrônico, vaso, etc) aos quais será aplicado um tratamento. Elas devem ser tão homogêneas quanto possível, para que, quando submetidas a diferentes tratamentos, sejam os efeitos facilmente detectados.

PRINCÍPIOS BÁSICOS EM ESTUDOS EXPERIMENTAIS

1. Casualização

2. Repetição

3. Controle Local (Bloco)

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 o 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

- O nome análise de variância é derivado de uma partição da variabilidade total em suas partes componentes. A soma total dos quadrados:

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2 \quad (3)$$

é usada como uma medida da variabilidade geral dos dados;

- Intuitivamente, isso é razoável porque se dividirmos SS_T pelo número apropriado de graus de liberdade (neste caso, $an - 1 = N - 1$), teríamos a variância amostral dos y'_s ;
- A variância da amostra é, obviamente, uma medida padrão de variabilidade.

ANOVA

- Observe que a SS_T pode ser escrita como:

$$\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2 = n \sum_{i=1}^a (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2 + \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2 \quad (4)$$

- A equação (4) é conhecida com a identidade fundamental da ANOVA;
- Ela afirma que a variabilidade total dos dados, medida pela soma total de quadrados, pode ser dividida em uma soma de quadrados das diferenças entre as médias de tratamento e a média geral mais uma soma de quadrados das diferenças das observações com a média do respectivo tratamento;

ANOVA

- Sendo assim, a equação (4) também pode ser escrita como

$$SS_T = SS_{Trat} + SS_{Res}. \quad (5)$$

- SS_{Trat} - soma de quadrados devido aos tratamentos - representa a diferença entre as médias de cada tratamento e a média geral, ou seja, é uma medida de diferenças entre as médias de tratamento,
- SS_{Res} - soma dos quadrados devido ao erro (ou seja, dentro dos tratamentos) - representa que as diferenças das observações em relação a média do respectivo tratamento pode ser devido à um erro aleatório.

ANOVA

- Há um total de $an = N$ observações. Então, a SS_T tem $an - 1 = N - 1$ graus de liberdade;
- Existem a níveis de um fator (a médias de tratamentos). Então, a SS_{Trat} tem $a - 1$ graus de liberdade;
- E existem n repetições dentro de qualquer tratamento fornecendo $n - 1$ graus de liberdade para estimar o erro experimental. Como existem a tratamentos, tem-se $a(n - 1) = an - a = N - a$ graus de liberdade para o erro.

ANOVA

- É importante examinar o lado direito da identidade fundamental da ANOVA;
- Considere a soma de quadrados do erro:

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

- É fácil observar que o termo entre colchetes, se dividido por $n - 1$, é a variância da amostra do i -ésimo tratamento, ou

$$S_i^2 = \frac{\sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2}{n - 1}, \quad (6)$$

para $i = 1, 2, \dots, a$.

ANOVA

- Ao considerar os a tratamentos, as variâncias da amostra podem ser combinadas para fornecer uma única estimativa da variância da população:

$$\begin{aligned} \frac{(n-1)S_1^2 + (n-1)S_2^2 + \dots + (n-1)S_a^2}{(n-1) + (n-1) + \dots + (n-1)} &= \frac{\sum_{i=1}^a \left[\sum_{j=1}^n (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2 \right]}{\sum_{i=1}^a (n-1)} \\ &= \frac{SS_{Res}}{(N-a)}, \end{aligned}$$

que é uma estimativa combinada da variância dentro de cada um dos a tratamentos.

ANOVA

- Se não houvesse diferenças entre as médias de tratamento, poderia-se usar a variação das médias de tratamento em relação a média geral para estimar σ^2 . Ou seja:

$$\frac{SQ_{Trat}}{a - 1} = \frac{n \sum_{i=1}^a (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2}{a - 1}$$

é uma estimativa de σ^2 se as médias de tratamento forem iguais.

- A razão para isso pode ser intuitivamente vista como segue:
 - A quantidade $\sum_{i=1}^a (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2 / (a - 1)$ estima σ^2/n , que é a variância das médias de tratamento;
 - Então, $n \sum_{i=1}^a (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2 / (a - 1)$ deve estimar σ^2 se não houver diferenças significativas entre os tratamentos.

ANOVA

- Logo, é possível observar que a ANOVA fornece duas estimativas para σ^2 ;
- Uma baseada na variabilidade inerente dentro dos tratamentos e a outra baseada na variabilidade entre tratamentos;
- Se não houver diferenças nas médias de tratamento, essas duas estimativas devem ser muito semelhante. E se não forem, suspeita-se que a diferença deve ser causada por diferenças nas médias de tratamento;
- Embora tenha-se usado um argumento intuitivo para desenvolver este resultado, uma abordagem um pouco mais formal pode ser utilizada.

ANOVA

- As quantidades:

$$QM_{Trat} = \frac{SQ_{Trat}}{a - 1} \quad (7)$$

e

$$QM_{Res} = \frac{SQ_{Res}}{N - a} \quad (8)$$

são chamadas de quadrados médios.

- Agora será examinado o valor esperado dos quadrados médios:

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

- Ao considerar as hipóteses de interesse:

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

- Ou de forma equivalente:

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

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

- Qual a estatística do teste?

ANOVA

- Ao supor $\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2)$;
- As observações, y_{ij} , também seguem distribuição $N(\mu + \tau_i, \sigma^2)$;
- Logo, SQ_T também seguem distribuição Normal e SQ_T/σ^2 segue distribuição χ^2 com $(N - 1)$ graus de liberdade;
- Além disso, SQ_{Res}/σ^2 segue distribuição χ^2 com $(N - a)$ graus de liberdade e SQ_{Trat}/σ^2 segue distribuição χ^2 com $(a - 1)$ graus de liberdade se a hipótese nula for verdadeira, $H_0 : \tau_i = 0$;

ANOVA

- No entanto, as três somas de quadrados não são necessariamente independente porque ao somar SQ_{Trat} e SQ_{Res} tem-se a SQ_T ;
- Ao usar o Teorema de Cochran definido por:
 - Seja $Z_i \sim N(0, 1)$ para $i = 1, 2, \dots, \nu$ e

$$\sum_{i=1}^{\nu} Z_i^2 = Q_1 + Q_2 + \dots + Q_s$$

em que $s \leq \nu$, e Q_i tem ν graus de liberdade ($i = 1, 2, \dots, s$). Então, Q_1, Q_2, \dots, Q_s são variáveis aleatórias independentes com distribuição qui-quadrado com $\nu_1, \nu_2, \dots, \nu_s$ graus de liberdade, respectivamente, se e somente se

$$\nu = \nu_1 + \nu_2 + \dots + \nu_s$$

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

$$F_0 = \frac{SQ_{Trat}/(a - 1)}{SQ_{Res}/(N - a)} = \frac{QM_{Trat}}{QM_{Res}}, \quad (9)$$

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

- A equação (9) 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 (9) 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 $N = an$.

ANOVA

- Uma fórmula alternativa para calcular SQ_T e SQ_{Trat} é dada por:

$$SQ_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^n y_{ij}^2 - \frac{y_{..}^2}{N}, \quad (10)$$

$$SQ_{Trat} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a y_{i.}^2 - \frac{y_{..}^2}{N} \quad (11)$$

e

$$SQ_{Res} = SQ_T - SQ_{Trat}. \quad (12)$$

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

RESÍDUO

- Violações das suposições básicas e adequação do modelo podem ser facilmente investigadas através da análise dos resíduos.
- O resíduo para a j -ésima observação no i -ésimo tratamento é definido por:

$$e_{ij} = y_{ij} - \hat{y}_{ij}, \quad (13)$$

em que \hat{y}_{ij} é o valor estimado obtido por:

$$\begin{aligned} \hat{y}_{ij} &= \hat{\mu} + \hat{\tau}_i \\ &= \bar{y}_{..} + (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..}) \\ &= \bar{y}_{i.} \end{aligned} \quad (14)$$

RESÍDUO

- Para o modelo (1), assume-se que os erros, ε_{ij} são variáveis aleatórias independentes, identicamente distribuídos com distribuição Normal com média 0 e variância σ^2 .
- Se o modelo (1) for apropriado para os dados em estudo, os resíduos observados, e_{ij} , devem refletir as propriedades assumidas para o erro do modelo, ε_{ij} .

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.

SUPosição DE NORMALIDADE

- As vezes é útil padronizar os resíduos para a análise de resíduos.
- Como o desvio padrão dos erros, ε_{ij} , é σ , que pode ser estimado por $\hat{\sigma} = \sqrt{\text{MSRes}}$. É natural considerar a seguinte padronização:

$$d_{ij} = \frac{e_{ij}}{\sqrt{\text{MSRes}}}. \quad (15)$$

- Se $\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2)$, os resíduos padronizados (15) deve ser aproximadamente normal com média zero e variância constante;
- 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.

OS ERROS NÃO SÃO INDEPENDENTES

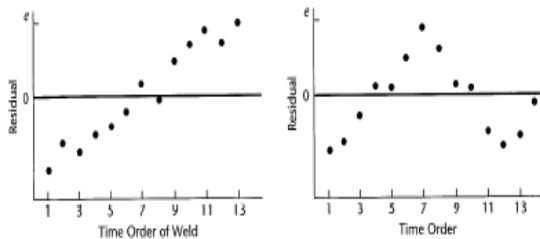


FIGURE: Exemplo

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.

HETEROCEDASTICIDADE E HOMOGENEIDADE DE VARIÂNCIA

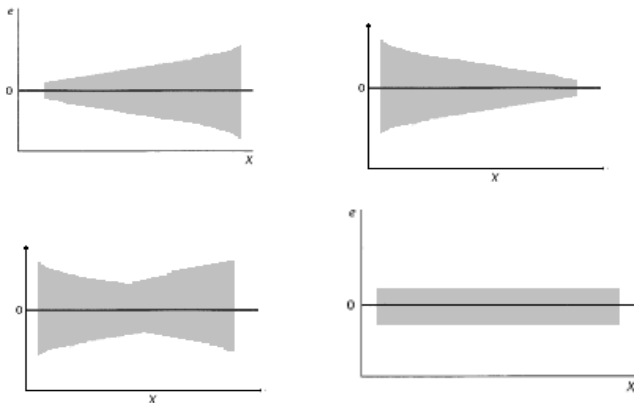


FIGURE: As três primeiras figuras representam exemplos de situação com heterocedasticidade de variância e a quarta figura representa o caso de homogeneidade de variância, em que x representa os valores ajustados

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

VARIÂNCIA CONSTANTE

- O teste de hipótese F possui estatística do teste dada por:

$$F = \frac{S_1^2}{S_2^2} \sim F_{(n_1-1), (n_2-1)}.$$

- Como nos delineamentos inteiramente casualizados existem a tratamentos, uma alternativa é fazer o teste F dado por:

$$F_{max} = \frac{S_{max}^2}{S_{min}^2} \sim F_{(n_{max}-1), (n_{min}-1)},$$

em que (n_{max}) é o número de observações do tratamento com maior variância e (n_{min}) é o número de observações do tratamento com menor variância.

VARIÂNCIA CONSTANTE

- O teste de hipótese de Bartlett envolve o cálculo de uma estatística cuja distribuição amostral é aproximada pela distribuição qui-quadrado com $a - 1$ graus de liberdade quando as a amostras aleatórias são de populações normais independentes. A estatística do teste é definida por:

$$\chi_0^2 = 2,3026 \frac{q}{c}$$

em que

$$q = (N - a) \log_{10} S_p^2 - \sum_{i=1}^a (n_i - 1) \log_{10} S_i^2,$$

$$c = 1 + \frac{1}{3(a - 1)} \left(\sum_{i=1}^a (n_i - 1)^{-1} - (N - a)^{-1} \right),$$

VARIÂNCIA CONSTANTE

$$S_p^2 = \frac{\sum_{i=1}^a (n_i - 1) S_i^2}{N - a}$$

e S_i^2 é a variância amostral da população i .

- A quantidade q é grande quando as variâncias da amostra S_i^2 diferem muito e é igual a zero quando todos os S_i^2 são iguais. Portanto, deve-se rejeitar H_0 em valores de χ_0^2 que são muito grandes. Ou seja, rejeitamos H_0 somente quando

$$\chi_0^2 > \chi_{\alpha, (a-1)}^2.$$

- O teste de Bartlett é muito sensível à suposição de normalidade. Consequentemente, quando a validade desta suposição é duvidosa, o teste de Bartlett não deve ser usado.

VARIÂNCIA CONSTANTE

- Como o teste de Bartlett é sensível à suposição de normalidade, é importante ter um procedimento alternativo;
- Um teste alternativo muito utilizado é o teste de Levene modificado;
- Esse teste usa o desvio absoluto das observações y_{ij} em relação a mediana do respectivo tratamento, \tilde{y}_i . Denote esses desvios por

$$d_{ij} = |y_{ij} - \tilde{y}_i|$$

em que $i = 1, 2, \dots, a$ e $j = 1, 2, \dots, n_i$.

VARIÂNCIA CONSTANTE

- O teste de Levene modificado então avalia se as médias desses desvios são ou não iguais para todos os tratamentos;
- Acontece que se os desvios médios são iguais, as variâncias das observações em todos os tratamentos serão as mesmas;
- Logo, a estatística de teste para o teste de Levene é simplesmente a estatística ANOVA para testar a igualdade de médias aplicada aos desvios absolutos.