# Análise de Variância (ANOVA)

# I.3. Análise de Variância (ANOVA)

A Regressão Linear visa modelar uma variável resposta numérica (quantitativa), à custa de uma ou mais variáveis preditoras, igualmente numéricas.

Mas uma variável resposta numérica pode depender de variáveis qualitativas (categóricas), ou seja, de um ou mais factores.

A Análise de Variância (ANOVA) é uma metodologia estatística para lidar com este tipo de situações.

A ANOVA foi desenvolvida nos anos 30 do Século XX, na Estação Experimental Agrícola de Rothamstead (Inglaterra), por R.A. Fisher.

# Exemplo motivador: os lírios

Até aqui ignorou-se que os 150 lírios do conjunto de dados `iris` referem-se a 50 observações em cada uma de três diferentes espécies.


*iris setosa*

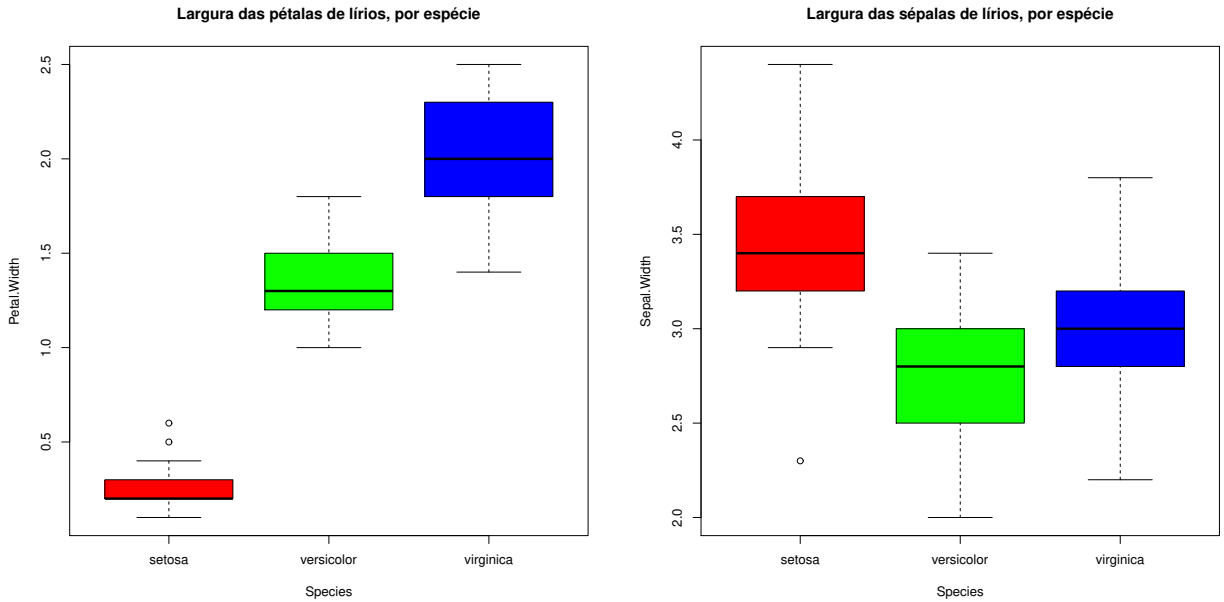
*iris versicolor*

*iris virginica*

Poderão os valores médios de cada característica morfométrica *diferir consoante as espécies*?

Objectivo: testar a igualdade de médias duma variável, em diferentes contextos (neste exemplo, para diferentes espécies de lírios).

# Dois exemplos: os lírios por espécie




As larguras das pétalas parecem diferir entre as espécies dos lírios.
As larguras das sépalas diferem menos. Eis as médias amostrais:

$$\overline{y}_{seto} = 3.428 \quad ; \quad \overline{y}_{vers} = 2.770 \quad ; \quad \overline{y}_{virg} = 2.974$$

As diferenças serão apenas um acaso da amostra?

Objectivo: Testar a igualdade das médias populacionais de cada espécie.

# A ANOVA como caso particular do Modelo Linear

A Análise de Variância (ANOVA) lida com variáveis preditoras (explicativas) qualitativas. Surgiu historicamente como um método autónomo. Mas, tal como a Regressão Linear, é uma particularização do Modelo Linear.

Introduzir a ANOVA através das suas semelhanças com a Regressão Linear permite aproveitar boa parte da teoria estudada até aqui.

## Terminologia

Variável resposta $Y$: uma variável numérica (quantitativa), que se pretende estudar e modelar.

Factor : uma variável preditora categórica (qualitativa);

Níveis do factor : as diferentes categorias ("valores") do factor, ou seja, diferentes situações experimentais onde se efectuam observações de $Y$.

Nos exemplos, o factor Espécie tem $k = 3$ níveis.

# A ANOVA a um Factor - notação

Na ANOVA a um Factor (totalmente casualizado), a modelação da variável resposta baseia-se numa única variável preditora categórica.

Admitimos que o factor tem $k$ níveis (no exemplo dos lírios, $k=3$).

Admitimos que há $n$ observações independentes de $Y$, sendo $n_i$ $(i=1,...,k)$ correspondentes ao nível $i$ do factor. Logo, $\sum_{i=1}^{k} n_i = n$.

## Delineamentos equilibrados

No caso de igual número de observações em cada nível,

$$n_1 = n_2 = n_3 = \cdots = n_k \qquad (= n_c),$$

diz-se que estamos perante um delineamento equilibrado.

Os delineamentos equilibrados são aconselháveis (mas não obrigatórios), por várias razões que adiante se discutem.

# A dupla indexação de $Y$

Na regressão linear indexam-se as $n$ observações de $Y$ com um único índice, variando de 1 a $n$ $(\{Y_i\}_{i=1}^{n})$.

Neste novo contexto, é preferível usar dois índices para indexar as observações de $Y$:

- um ($i$) indica o nível do factor a que a observação corresponde;
- outro ($j$) permite distinguir as observações num mesmo nível.

Assim, a $j$-ésima observação de $Y$, no $i$-ésimo nível do factor, é representada por $Y_{ij}$ , (com $i = 1, ..., k$ e $j = 1, ..., n_i$) .

# A equação do modelo

A equação do modelo será mais simples do que na regressão: a única informação disponível para prever $Y_{ij}$ é que a observação corresponde ao nível $i$ do factor.

Não há informação no modelo para explicar diferentes valores de $Y$ em repetições num mesmo nível do factor: será considerada variação aleatória.

Uma primeira equação do modelo é:

$$Y_{ij} = \mu_i + \varepsilon_{ij} \qquad \text{com} \quad E[\varepsilon_{ij}] = 0 \ ,$$

onde $\mu_i$ representa o valor esperado das observações $Y_{ij}$ efectuadas no nível $i$ do factor: $\mu_i = E[Y_{ij}] = E[Y|\text{obs. nivel } i]$.

# Uma equação para $Y_{ij}$

Para poder enquadrar a ANOVA na teoria do Modelo Linear já estudada, é conveniente re-escrever as médias de nível na forma:

$$E[Y_{ij}] = \mu_i = \mu + \alpha_i \ .$$

O parâmetro $\mu$ é comum a todas as observações, enquanto os parâmetros $\alpha_i$ são específicos para cada nível ($i$) do factor.
Cada $\alpha_i$ é designado o efeito do nível $i$.

Admite-se que $Y_{ij}$ oscila aleatoriamente em torno do seu valor médio:

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij} \ ,$$

com $E[\varepsilon_{ij}] = 0$. Mas como relacionar esta equação do modelo com um Modelo Linear?

# O modelo ANOVA como um Modelo Linear

A equação geral $Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij}$, nas $n_1$ observações do nível $i = 1$ fica:

$$Y_{1j} = \mu + \alpha_1 + \varepsilon_{1j} \ ,$$

nas $n_2$ observações efectuadas no nível $i = 2$ fica:

$$Y_{2j} = \mu + \alpha_2 + \varepsilon_{2j} \ ,$$

etc.. Este conjunto de $k$ equações pode ser escrita como uma única equação geral, que é a equação dum modelo linear:

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_1 \mathscr{I}_{1_{ij}} + \alpha_2 \mathscr{I}_{2_{ij}} + \ldots + \alpha_k \mathscr{I}_{k_{ij}} + \varepsilon_{ij} \ ,$$

onde $\mathscr{I}_m$ é a variável indicatriz do nível $m$ do factor:

$$\mathscr{I}_{m_{ij}} = \begin{cases} 1 & , \quad \text{se } i = m \\ 0 & , \quad \text{se } i \neq m \end{cases}$$

# A relação de base em notação vectorial

Em notação matricial/vectorial, a equação de base será:

$$\begin{aligned} & \vec{\mathbf{Y}} = \mu\,\vec{\mathbf{1}}_n + \alpha_1\,\vec{\mathscr{I}}_1 + \alpha_2\,\vec{\mathscr{I}}_2 + \alpha_3\,\vec{\mathscr{I}}_3 + \ldots + \alpha_k\,\vec{\mathscr{I}}_k + \vec{\boldsymbol{\varepsilon}} \\ \Leftrightarrow \quad & \vec{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\vec{\boldsymbol{\beta}} + \vec{\boldsymbol{\varepsilon}}\,, \end{aligned}$$

As colunas de $\mathbf{X}$ são: o vector $\vec{\mathbf{1}}_n$ e os vectores das indicatrizes $\vec{\mathscr{I}}_i$.
O vector dos parâmetros $\vec{\boldsymbol{\beta}}$ tem elementos: $\mu$ e os efeitos $\alpha_i$.

Num exemplo com $n_1 = 3$, $n_2 = 4$ e $n_3 = 2$ observações:

$$\begin{bmatrix} Y_{11} \\ Y_{12} \\ Y_{13} \\ Y_{21} \\ Y_{22} \\ Y_{23} \\ Y_{24} \\ Y_{31} \\ Y_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{24} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{32} \end{bmatrix}$$

# O problema do excesso de parâmetros

Existe um problema "técnico": as colunas desta matriz **X** são linearmente dependentes (a soma das indicatrizes é o vector dos $n$ uns) , pelo que a matriz $\mathbf{X}^t\mathbf{X}$ não é invertível. Há um excesso de parâmetros no modelo.

Soluções possíveis na equação $Y_{ij} = \mu + \alpha_1 \mathscr{I}_{1_{ij}} + \alpha_2 \mathscr{I}_{2_{ij}} + \ldots + \alpha_k \mathscr{I}_{k_{ij}} + \varepsilon_{ij}$:

1. retirar o parâmetro $\mu$ do modelo.
   - corresponde a retirar a coluna de uns da matriz **X**;
   - cada $\alpha_i$ equivalerá a $\mu_i$, a média do nível;
   - não se pode generalizar a situações mais complexas;
   - mais difícil de encaixar na teoria já dada do Modelo Linear.
2. impor restrições aos parâmetros: e.g., $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i = 0$.
   - Foi a solução clássica, ainda hoje frequente em livros de ANOVA;
   - mais difícil de encaixar na teoria geral do Modelo Linear.
3. tomar $\alpha_1 = 0$: será a solução utilizada.
   - corresponde a excluir a 1a. variável indicatriz do modelo (e de **X**);
   - permite aproveitar a teoria do Modelo Linear e é generalizável.

Cada solução tem implicações na forma de interpretar os parâmetros.

# A matriz do modelo com a restrição $\alpha_1 = 0$

Com a restrição $\alpha_1 = 0$, a matriz do modelo **X** tem colunas $\vec{\mathbf{1}}_n, \vec{\mathscr{I}}_2, \ldots, \vec{\mathscr{I}}_k$.
No exemplo anterior, tem-se:

$$\begin{bmatrix} Y_{11} \\ Y_{12} \\ Y_{13} \\ Y_{21} \\ Y_{22} \\ Y_{23} \\ Y_{24} \\ Y_{31} \\ Y_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{24} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{32} \end{bmatrix}$$

Agora $\mu = \mu_1$ é o valor médio das observações do nível $i = 1$:

$$\begin{array}{lcccccccl} Y_{1j} & = & \mu + \varepsilon_{1j} & \Rightarrow & \mu_1 & = & E[Y_{1j}] & = & \mu & , \forall j = 1, \ldots, n_1 \\ Y_{2j} & = & \mu + \alpha_2 + \varepsilon_{2j} & \Rightarrow & \mu_2 & = & E[Y_{2j}] & = & \mu_1 + \alpha_2 & , \forall j = 1, \ldots, n_2 \\ Y_{3j} & = & \mu + \alpha_3 + \varepsilon_{3j} & \Rightarrow & \mu_3 & = & E[Y_{3j}] & = & \mu_1 + \alpha_3 & , \forall j = 1, \ldots, n_3 \end{array}$$

# Os efeitos de nível $\alpha_i$

Na equação duma ANOVA a um factor (acetato 260), e com a restrição $\alpha_1 = 0$, cada $\alpha_i$ ($i > 1$) representa o acréscimo que transforma a média do primeiro nível na média do nível $i$:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 0 \\ \alpha_2 &= \mu_2 - \mu_1 \\ \alpha_3 &= \mu_3 - \mu_1 \\ &\vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \alpha_k &= \mu_k - \mu_1 \end{aligned}$$

A igualdade de todas as médias populacionais de nível $\mu_i$ equivale a que todos os efeitos de nível sejam nulos: $\alpha_i = 0 \ , \quad \forall \ i$.

# O modelo ANOVA a 1 factor para efeitos inferenciais

Para completar o modelo ANOVA a um factor, admite-se que os erros aleatórios $\varepsilon_{ij}$ têm as mesmas propriedades que numa regressão linear:

## Modelo ANOVA a um factor, com $k$ níveis

Existem $n$ observações, $Y_{ij}$, das quais $n_i$ correspondem ao nível $i$ ($i = 1, ..., k$) do factor. Tem-se:

1. $Y_{ij} = \mu_1 + \alpha_i + \varepsilon_{ij}$ , $\forall i=1,...,k$ , $\forall j=1,...,n_i$ $(\alpha_1 = 0)$.
2. $\varepsilon_{ij} \frown \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ , $\forall i,j$
3. $\{\varepsilon_{ij}\}_{i,j}$ v.a.s independentes.

O modelo tem $k$ parâmetros: a média de $Y$ no primeiro nível do factor, $\mu_1$, e os acréscimos $\alpha_i$ $(i > 1)$ que geram as médias de cada um dos $k-1$ restantes níveis do factor. Ou seja,

$$\vec{\beta} = (\mu_1 , \alpha_2 , \alpha_3 , \cdots , \alpha_k)^t .$$

# O modelo ANOVA a um factor - notação vectorial

De forma equivalente, em notação vectorial,

## Modelo ANOVA a um factor - notação vectorial

O vector $\vec{\mathbf{Y}}$ das $n$ observações verifica:

1. $\vec{\mathbf{Y}} = \mu_1 \vec{\mathbf{1}}_n + \alpha_2 \vec{\mathscr{I}}_2 + \alpha_3 \vec{\mathscr{I}}_3 + \ldots + \alpha_k \vec{\mathscr{I}}_k + \vec{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{X}\vec{\boldsymbol{\beta}} + \vec{\boldsymbol{\varepsilon}}$ , sendo
   - $\vec{\mathbf{1}}_n$ o vector de $n$ uns e $\vec{\mathscr{I}}_2$, $\vec{\mathscr{I}}_3$, ..., $\vec{\mathscr{I}}_k$ as variáveis indicatrizes dos níveis indicados;
   - $\mathbf{X} = \left[ \vec{\mathbf{1}}_n \mid \vec{\mathscr{I}}_2 \mid \vec{\mathscr{I}}_3 \mid \cdots \mid \vec{\mathscr{I}}_k \right]$ a matriz $n \times k$ do modelo; e
   - $\vec{\boldsymbol{\beta}} = (\mu_1, \alpha_2, \alpha_3, \cdots, \alpha_k)^t$ o vector dos parâmetros.
2. $\vec{\boldsymbol{\varepsilon}} \frown \mathscr{N}_n(\vec{\mathbf{0}}, \sigma^2 \mathbf{I}_n)$, sendo $\mathbf{I}_n$ a matriz identidade $n \times n$.

Trata-se de um modelo análogo a um modelo de Regressão Linear Múltipla, diferindo apenas na natureza das variáveis preditoras, que são aqui variáveis indicatrizes dos níveis 2 a $k$ do factor.

# O teste aos efeitos do factor

A hipótese de que nenhum dos níveis do factor afecte a média da variável resposta corresponde à hipótese

$$\begin{aligned} & \alpha_2 = \alpha_3 = \ldots = \alpha_k = 0 \\ \Leftrightarrow \quad \mu_1 = & \mu_2 = \mu_3 = \cdots = \mu_k \end{aligned}$$

Dado o paralelismo com os modelos de Regressão Linear, esta hipótese corresponde a dizer que todos os coeficientes das "variáveis preditoras" (na ANOVA, as variáveis indicatrizes $\vec{\mathscr{I}}_i$) são nulos.

É possível testar esta hipótese, através dum teste $F$ de ajustamento global do modelo (ver acetato 214) que, no contexto, chamamos Teste $F$ aos efeitos do factor.

# O Teste $F$ aos efeitos do factor numa ANOVA

Muda-se a designação de QMR para QMF (Quadrado Médio do Factor):

## Teste $F$ aos efeitos do factor

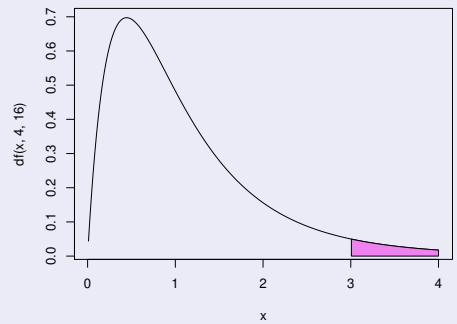
Hipóteses: $H_0 : \alpha_i = 0 \quad \forall i=2,\ldots,k$ vs. $H_1 : \exists i=2,..,k \text{ t.q. } \alpha_i \neq 0$.
[FACTOR NÃO AFECTA] vs. [FACTOR AFECTA $Y$]

Estatística do Teste: $F = \frac{QMF}{QMRE} \frown F_{(k-1,n-k)}$ se $H_0$.

Nível de significância do teste: $\alpha$

Região Crítica (Região de Rejeição): Unilateral direita

Rej. $H_0$ se $F_{calc} > f_{\alpha(k-1,n-k)}$



# Notação e graus de liberdade

Neste contexto, existem fórmulas simples para algumas quantidades.

Numa ANOVA a um factor, usamos SQF, em vez de SQR, para indicar a Soma de Quadrados associada aos efeitos do Factor, embora a sua definição seja idêntica (numerador da variância dos valores ajustados).

Numa ANOVA a um factor, o número de preditores do modelo (as variáveis indicatrizes dos níveis $2, 3, ..., k$) é $p = k-1$ e o número de parâmetros do modelo é $p+1 = k$. Logo, os graus de liberdade associados a cada Soma de Quadrados são:

| SQxx | g.l. |
|---|---|
| SQF | $k-1$ |
| SQRE | $n-k$ |

Os Quadrados Médios continuam a ser os quocientes das Somas de Quadrados a dividir pelos respectivos graus de liberdade.

# Estimadores de parâmetros na ANOVA a um factor

Na ANOVA a um factor, as $k$ colunas de $\mathbf{X}$ são os vectores $\vec{\mathbf{1}}_n$, $\vec{\mathscr{I}}_2$, $\vec{\mathscr{I}}_3$, ... , $\vec{\mathscr{I}}_k$. A matriz identifica as observações de cada nível do factor.

Dada a natureza especial da matriz $\mathbf{X}$, a fórmula dos parâmetros ajustados, $\hat{\vec{\boldsymbol{\beta}}} = (\mathbf{X}^t\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^t\vec{\mathbf{Y}}$ gera estimadores dos parâmetros populacionais que são as quantidades amostrais análogas. Sendo $\overline{Y}_{i.} = \frac{1}{n_i}\sum_{j=1}^{n_i} Y_{ij}$ a média amostral das $n_i$ observações de $Y$ no nível $i$, tem-se:

$$
\begin{array}{rcll}
 & \mu_1 & \longrightarrow & \hat{\mu}_1 = \overline{Y}_{1.} \\
\alpha_2 = & \mu_2 - \mu_1 & \longrightarrow & \hat{\alpha}_2 = \overline{Y}_{2.} - \overline{Y}_{1.} \\
\alpha_3 = & \mu_3 - \mu_1 & \longrightarrow & \hat{\alpha}_3 = \overline{Y}_{3.} - \overline{Y}_{1.} \\
 & \vdots & & \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\
\alpha_k = & \mu_k - \mu_1 & \longrightarrow & \hat{\alpha}_k = \overline{Y}_{k.} - \overline{Y}_{1.}
\end{array}
$$

# Os valores ajustados $\hat{Y}_{ij}$

## Valores ajustados $\hat{Y}_{ij}$

Do que foi visto, decorre que qualquer observação tem valor ajustado igual à média amostral das observações do seu nível:

$$\hat{Y}_{ij} = \underbrace{\hat{\mu}_1 + \hat{\alpha}_i}_{=\hat{\mu}_i} = \overline{Y}_{1.} + (\overline{Y}_{i.} - \overline{Y}_{1.}) = \overline{Y}_{i.} \, .$$

Os valores ajustados $\hat{Y}_{ij}$ são iguais para todas as observações num mesmo nível $i$ do factor. Tal como na Regressão, estes valores resultam de projectar ortogonalmente o vector $\vec{\mathbf{Y}}$ dos valores observados da variável resposta, sobre o subespaço $\mathscr{C}(\mathbf{X}) \subset \mathbb{R}^n$ gerado pelas colunas da matriz $\mathbf{X}$: $\vec{\hat{\mathbf{Y}}} = \mathbf{H}\vec{\mathbf{Y}}$.

Numa ANOVA a um factor, o subespaço $\mathscr{C}(\mathbf{X})$ tem natureza especial: todos os vectores de $\mathscr{C}(\mathbf{X})$ têm de ter valor igual nas posições correspondentes a observações dum mesmo nível do factor.

# Os resíduos e *SQRE*

Vimos que $\hat{Y}_{ij} = \hat{\mu}_i = \overline{Y}_{i\cdot}$.

O resíduo da observação $Y_{ij}$ é dado pela sua diferença em relação à média amostral de nível:

$$E_{ij} = Y_{ij} - \hat{Y}_{ij} = Y_{ij} - \overline{Y}_{i\cdot} ,$$

A Soma de Quadrados dos Resíduos é dada por:

$$SQRE = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} E_{ij}^2 = \sum_{i=1}^{k} \sum_{j=1}^{n_i} \left(Y_{ij} - \overline{Y}_{i\cdot}\right)^2 = \sum_{i=1}^{k} (n_i - 1)\, S_i^2 ,$$

onde $S_i^2 = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n_i} (Y_{ij} - \overline{Y}_{i\cdot})^2$ é a variância amostral das $n_i$ observações de $Y$ no $i$-ésimo nível do factor.

*SQRE* mede variabilidade no seio dos $k$ níveis.

# Fórmulas para delineamentos equilibrados

No caso de um delineamento equilibrado, i.e., $n_1 = n_2 = ... = n_k (= n_c)$ tem-se $n = n_c \cdot k$, e:

$$SQRE = (n_c - 1) \sum_{i=1}^{k} S_i^2$$

$$QMRE = \frac{n_c - 1}{n - k} \sum_{i=1}^{k} S_i^2 = \frac{n_c - 1}{k(n_c - 1)} \sum_{i=1}^{k} S_i^2 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^{k} S_i^2 \, .$$

Assim, em delineamentos equilibrados, o Quadrado Médio Residual é a média (simples) das $k$ variâncias de nível da variável resposta $Y$.

Em delineamentos não equilibrados, o QMRE é uma média ponderada dos $S_i^2$ (tendo cada parcela o peso $n_i - 1$).

# A Soma de Quadrados associada ao Factor

A Soma de Quadrados associada à Regressão toma, neste contexto, a designação Soma de Quadrados associada ao Factor e será representada por *SQF*. Sendo $\overline{Y}_{..} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i} Y_{ij}$ a média da totalidade das $n$ observações, tem-se:

$$SQF = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i}\left(\hat{Y}_{ij} - \overline{Y}_{..}\right)^2 = \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i}\left(\overline{Y}_{i.} - \overline{Y}_{..}\right)^2$$

$$\Leftrightarrow \quad SQF = \sum_{i=1}^{k} n_i\left(\overline{Y}_{i.} - \overline{Y}_{..}\right)^2$$

*SQF* mede variabilidade entre as médias amostrais de cada nível.

# Fórmulas para delineamentos equilibrados

No caso de um delineamento equilibrado $n_1 = n_2 = ... = n_k (= n_c)$,

$$SQF \quad = \quad n_c \sum_{i=1}^{k} (\overline{Y}_{i.} - \overline{Y}_{..})^2 \quad = \quad n_c (k-1) \cdot S^2_{\overline{Y}_{i..}} \ ,$$

onde $S^2_{\overline{Y}_{i..}} = \frac{1}{k-1} \sum_{i=1}^{k} (\overline{Y}_{i.} - \overline{Y}_{..})^2$ indica a variância amostral das $k$ médias de nível amostrais.

$$QMF \quad = \quad \frac{SQF}{k-1} \quad = \quad n_c \cdot S^2_{\overline{Y}_{i..}} \ .$$

Assim, em delineamentos equilibrados, o Quadrado Médio associado aos efeitos do Factor, *QMF*, é proporcional à variância das $k$ médias de nível da variável $Y$.

# A relação entre Somas de Quadrados

A relação fundamental entre as três Somas de Quadrados (mesmo com delineamentos não equilibrados) tem um significado particular:

$$\begin{array}{ccccc} SQT & = & SQF & + & SQRE \\ \sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{n_i}(Y_{ij}-\overline{Y}_{..})^2 & = & \sum_{i=1}^{k} n_i(\overline{Y}_{i.}-\overline{Y}_{..})^2 & + & \sum_{i=1}^{k}(n_i-1)S_i^2 \ . \end{array}$$

onde:

- $SQT = (n-1)s_y^2$ mede a variabilidade total das $n$ observações de $Y$;
- $SQF$ mede a variabilidade entre diferentes níveis do factor (variabilidade inter-níveis);
- $SQRE$ mede a variabilidade no seio dos níveis - e que portanto não é explicada pelo factor (variabilidade intra-níveis).

Esta é a origem histórica do nome "Análise da Variância": a variância de $Y$ é decomposta ("analisada") em parcelas, associadas a diferentes causas. Aqui, as causas podem ser o efeito do factor ou outras não explicadas pelo modelo (residuais).

# O quadro de síntese da ANOVA a 1 Factor

Pode-se coleccionar esta informação numa tabela-resumo da ANOVA:

| Fonte | g.l. | SQ | QM | $f_{calc}$ |
|---|---|---|---|---|
| Factor | $k-1$ | $SQF = \sum_{i=1}^{k} n_i \cdot (\overline{y}_{i.} - \overline{y}_{..})^2$ | $QMF = \frac{SQF}{k-1}$ | $\frac{QMF}{QMRE}$ |
| Resíduos | $n-k$ | $SQRE = \sum_{i=1}^{k} (n_i - 1)\, s_i^2$ | $QMRE = \frac{SQRE}{n-k}$ | |
| Total | $n-1$ | $SQT = (n-1)\, s_y^2$ | – | – |

# Factores no R

O R tem uma estrutura de dados específica para variáveis qualitativas (categóricas), designada factor , criado pelo comando `factor`, aplicado a um vector contendo os nomes dos vários níveis:

```
> factor(c("Adubo 1", "Adubo 1", ...  , "Adubo 5"))
```

NOTA: Explore o comando `rep` para criar repetições de valores.

## Factores no R

No objecto `iris`, a coluna `Species` é um factor. A função `summary`, com factores, devolve o número de observações em cada nível

```
> summary(iris)
  Sepal.Length    Sepal.Width     Petal.Length    Petal.Width          Species
 Min.   :4.300   Min.   :2.000   Min.   :1.000   Min.   :0.100   setosa    :50
 1st Qu.:5.100   1st Qu.:2.800   1st Qu.:1.600   1st Qu.:0.300   versicolor:50
 Median :5.800   Median :3.000   Median :4.350   Median :1.300   virginica :50
 Mean   :5.843   Mean   :3.057   Mean   :3.758   Mean   :1.199
 3rd Qu.:6.400   3rd Qu.:3.300   3rd Qu.:5.100   3rd Qu.:1.800
 Max.   :7.900   Max.   :4.400   Max.   :6.900   Max.   :2.500
```

# ANOVAs a um Factor no R

Para efectuar uma ANOVA a um Factor no R, convém organizar os dados numa `data.frame` com duas colunas:

1. uma para os valores (numéricos) da variável resposta;
2. outra para o factor (com a indicação dos seus níveis).

As fórmulas usadas no R para especificar uma ANOVA a um factor são semelhantes às da regressão linear, indicando o factor como variável preditora. O R cria as variáveis indicatrizes necessárias.

## Fórmulas para ANOVAs no R

Para efectuar uma ANOVA de larguras das pétalas sobre espécies, nos dados dos $n = 150$ lírios, a fórmula é:

$$\texttt{Petal.Width} \quad \sim \quad \texttt{Species}$$

uma vez que a *data frame* `iris` contém uma coluna de nome `Species` que foi definida como factor.

# ANOVAs a um factor no R (cont.)

Embora seja possível usar o comando `lm` para efectuar uma ANOVA (a ANOVA é caso particular do Modelo Linear), o comando `aov` organiza a informação da forma mais tradicional numa ANOVA.

## Uma ANOVA com os lírios

Eis a ANOVA da largura de pétalas sobre espécies, nos lírios:

```
> aov(Petal.Width ~ Species, data=iris)

Call:
   aov(formula = Petal.Width ~ Species, data = iris)
Terms:
                  Species Residuals
Sum of Squares  80.41333   6.15660
Deg. of Freedom         2       147

Residual standard error: 0.20465
```

# ANOVAs a um factor no R (cont.)

A função `summary` também pode ser aplicada ao resultado de uma ANOVA, produzindo o quadro-resumo completo da ANOVA.

## ANOVA da largura das sépalas

Eis o resultado da ANOVA do segundo exemplo do acetato 255:

```
> iris.aov <- aov(Sepal.Width ~ Species , data=iris)
> summary(iris.aov)
             Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
Species       2  11.35   5.672   49.16 <2e-16 ***
Residuals   147  16.96   0.115
```

Neste caso, rejeita-se claramente a hipótese de que os acréscimos de nível, $\alpha_i$, sejam todos nulos, pelo que se rejeita a hipótese de larguras médias de sépalas iguais em todas as espécies. Conclusão: o factor (espécie) afecta a variável resposta (largura da sépala).

# A exploração ulterior de $H_1$

A Hipótese Nula, no teste $F$ numa ANOVA a 1 Factor, afirma que todos os níveis do factor têm efeito nulo, isto é, que a média da variável resposta $Y$ é igual nos $k$ níveis do Factor:

$$\begin{aligned} & \alpha_2 = \alpha_3 = \ldots = \alpha_k = 0 \\ \Leftrightarrow \quad \mu_1 = & \mu_2 = \mu_3 = \cdots = \mu_k \end{aligned}$$

A Hipótese Alternativa diz que pelo menos um dos níveis do factor tem uma média de $Y$ diferente do primeiro nível:

$$\begin{aligned} & \exists\, i \quad \text{tal que} \quad \alpha_i \neq 0 \\ \Leftrightarrow \quad & \exists\, i \quad \text{tal que} \quad \mu_1 \neq \mu_i \end{aligned}$$

Ou seja, nem todas as médias de nível de $Y$ são iguais

# A exploração ulterior de $H_1$ (cont.)

Caso se opte pela Hipótese Alternativa, fica em aberto (excepto quando $k = 2$) a questão de saber quais os níveis do factor cujas médias diferem entre si.

Mesmo com $k = 3$, a rejeição de $H_0$ pode dever-se a:

$$\begin{aligned}
\mu_1 = \mu_2 \neq \mu_3 \quad & \text{i.e.,} \quad \alpha_2 = 0\,;\ \alpha_3 \neq 0 \\
\mu_1 = \mu_3 \neq \mu_2 \quad & \text{i.e.,} \quad \alpha_3 = 0\,;\ \alpha_2 \neq 0 \\
\mu_1 \neq \mu_2 = \mu_3 \quad & \text{i.e.,} \quad \alpha_2 = \alpha_3 \neq 0; \\
\mu_i \text{ todos diferentes} \quad & \text{i.e.,} \quad \alpha_2 \neq \alpha_3 \text{ e } \alpha_2, \alpha_3 \neq 0.
\end{aligned}$$

Como optar entre estas diferentes alternativas?

# A exploração ulterior de $H_1$ (cont.)

Podem efectuar-se testes *t-Student* aos $\alpha_i$s, com base na teoria já estudada anteriormente (recorde-se que um modelo ANOVA é um modelo linear).

Mas quanto maior for $k$, mais sub-hipóteses alternativas existem, mais testes haverá para fazer.

A multiplicação do número de testes faz perder o controlo do nivel de significância $\alpha$ global para o conjunto de todos os testes.

Testes de hipóteses alternativos, relativos a todas as diferenças $\mu_i - \mu_j$ de pares de médias populacionais de $Y$, permitem controlar o nível de significância global $\alpha$ do conjunto dos testes. Tais testes chamam-se testes de comparações múltiplas de médias.

# As comparações múltiplas

O nível de significância $\alpha$ nos testes de comparação múltipla é a probabilidade de rejeitar qualquer das hipóteses $\mu_i = \mu_j$, caso todas sejam verdade, ou seja, é um nível de significância global.

Alternativamente, podem-se construir intervalos de confiança para cada diferença $\mu_i - \mu_j$, com um nível $(1-\alpha) \times 100\%$ de confiança de que os verdadeiros valores de $\mu_i - \mu_j$ pertencem a todos os intervalos.

A mais frequente abordagem de comparações múltiplas leva o nome de Tukey, embora em rigor só seja válido para delineamentos equilibrados.

# Testes de Tukey na ANOVA a um factor

Dado um delineamento a um factor, equilibrado.

## Teste de Tukey às diferenças de médias de nível

Hipóteses: $H_0 : \mu_i = \mu_j, \forall\, i,j$ vs. $H_1 : \exists i,j \text{ t.q. } \mu_i \neq \mu_j$.
[FACTOR NÃO AFECTA] vs. [FACTOR AFECTA $Y$]

Nível de significância (global) do teste: $\alpha$

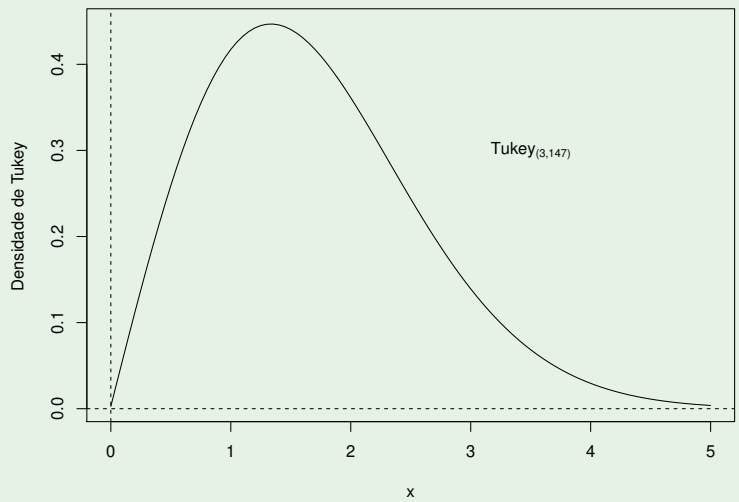
Regra: Rejeitar $\mu_i = \mu_j$ se $\left|\overline{Y}_{i.} - \overline{Y}_{j.}\right| > q_{\alpha\,(k,n-k)} \sqrt{\frac{QMRE}{n_c}}$,
sendo $q_{\alpha\,(k,n-k)}$ o valor que numa distribuição de Tukey com parâmetros $k$ e $n-k$, deixa à direita uma região de probabilidade $\alpha$.

O teste permite não apenas rejeitar $H_0$ globalmente, como identificar o(s) par(es) de níveis $(i,j)$ responsáveis pela rejeição (a diferença das respectivas médias amostrais excede o termo de comparação), permitindo assim conclusões sobre diferenças significativas em cada par de médias.

# Distribuição de Tukey

## Distribuição Tukey na ANOVA a um factor: lírios

Eis a função densidade da distribuição de Tukey, correspondente ao exemplo dos lírios, com $k = 3$ e $n - k = 147$:




Na *webpage* da disciplina encontra-se uma tabela da distribuição de Tukey.

# Intervalos de Confiança para $\mu_i - \mu_j$

Alternativamente, podem construir-se intervalos de confiança para todas as diferenças de pares de médias de nível, $\mu_i - \mu_j$, com um grau de confiança global $(1-\alpha)\times 100\%$.

Concretamente, tem-se $(1-\alpha)\times 100\%$ de confiança em como todas as diferenças de médias de nível $\mu_i - \mu_j$ estão em intervalos da forma:

$$\left] \quad (\overline{y}_{i\cdot} - \overline{y}_{j\cdot}) - q_{\alpha(k,n-k)}\sqrt{\frac{QMRE}{n_c}} \quad , \quad (\overline{y}_{i\cdot} - \overline{y}_{j\cdot}) + q_{\alpha(k,n-k)}\sqrt{\frac{QMRE}{n_c}} \quad \right[$$

Se para qualquer par $(i,j)$ de níveis, o intervalo correspondente não contém o valor zero, então $\mu_i = \mu_j$ não é admissível.

# Comparações Múltiplas de Médias no R

As comparações múltiplas de médias de nível, com base no resultado de Tukey, podem ser facilmente efectuadas no R.

O termo de comparação nos testes a $\mu_i - \mu_j = 0$ é $q_{\alpha\,(k,n-k)} \cdot \sqrt{\frac{QMRE}{n_c}}$.

Os quantis $q_{\alpha\,(k,n-k)}$ duma distribuição de Tukey são calculados no R, através da função `qtukey`.

O quantil de ordem $1-\alpha$ na distribuição de Tukey obtém-se assim:

```
> qtukey(1-α, k, n-k)
```

O valor de $\sqrt{QMRE}$ é dado pelo comando `aov`, sob a designação "*Residual standard error*".

# Comparações Múltiplas de Médias no R

O comando `TukeyHSD` calcula os intervalos de confiança a $(1-\alpha)\times 100\%$ para as diferenças de médias.

## Tukey nos lírios

```
> TukeyHSD(aov(Sepal.Width ~ Species, data=iris))
  Tukey multiple comparisons of means
    95% family-wise confidence level
$Species
                       diff         lwr        upr     p adj
versicolor-setosa    -0.658 -0.81885528 -0.4971447 0.0000000
virginica-setosa     -0.454 -0.61485528 -0.2931447 0.0000000
virginica-versicolor  0.204  0.04314472  0.3648553 0.0087802
```

O intervalo a 95% de confiança para $\mu_2 - \mu_1$ (`versicolor-setosa`) é

$$]\ -0.8189\ ,\ -0.4971\ [\ .$$

Nenhum dos intervalos inclui o valor zero, concluindo-se que $\mu_i \neq \mu_j$, para qualquer $i \neq j$, ou seja, todas as médias de espécie são diferentes.

# Comparações Múltiplas de Médias no R (cont.)

O valor de prova indicado (`p adj`) é o menor valor de $\alpha$ para o qual uma dada diferença de médias, $\overline{y}_{i.} - \overline{y}_{j.}$, seria considerada não significativa.

## Tukey nos lírios (cont.)

```
> TukeyHSD(aov(Sepal.Width ~ Species, data=iris))
  Tukey multiple comparisons of means
    95% family-wise confidence level
$Species
                       diff         lwr        upr     p adj
versicolor-setosa    -0.658 -0.81885528 -0.4971447 0.0000000
virginica-setosa     -0.454 -0.61485528 -0.2931447 0.0000000
virginica-versicolor  0.204  0.04314472  0.3648553 0.0087802
```

Assim, para $\alpha \leq 0.00878$, a diferença de médias amostrais para as espécies *virginica* e *versicolor* já seria considerada não significativa. Ou seja, apenas intervalos com mais de $(1 - \alpha) \times 100\% = 99.122\%$ de confiança para essa diferença de médias conteriam o valor zero.

# Representação gráfica das comparações múltiplas

A função `plot`, aplicada ao resultado da função `TukeyHSD`, permite visualizar os intervalos de confiança para as comparações das médias de nível.

## Tukey nos lírios (cont.)

```
> plot(TukeyHSD(aov(Sepal.Width ~ Species, data=iris)))
```

# Delineamentos não equilibrados

Quando o delineamento da ANOVA a um Factor não é equilibrado (isto é, existe diferente número de observações nos vários níveis do factor), os teste/ICs de Tukey agora enunciados não são, em rigor, válidos.

Mas, para delineamentos em que o desequilíbrio no número de observações não seja muito acentuado, é possível um resultado aproximado, que a função `TukeyHSD` do  incorpora.

# Análise de Resíduos na ANOVA a 1 Factor

A validade dos pressupostos do modelo estuda-se de forma idêntica ao que foi visto na Regressão Linear, tal como os diagnósticos para observações especiais. Mas há algumas particularidades.

Numa ANOVA a um factor, os resíduos aparecem empilhados em $k$ colunas nos gráficos de $e_{ij}$ vs. $\hat{y}_{ij}$, porque qualquer valor ajustado $\hat{y}_{ij} = \overline{y}_{i.}$ é igual para observações num mesmo nível do factor.

Este padrão não corresponde a qualquer violação dos pressupostos do modelo.

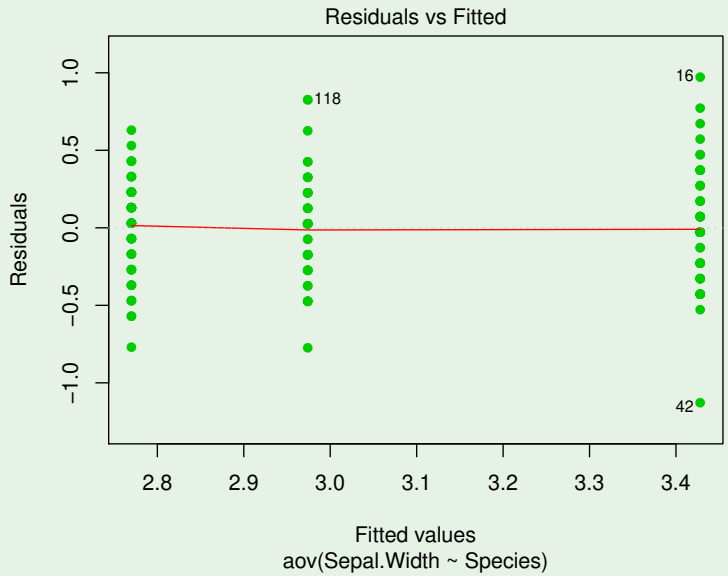
Por outro lado, todas as observações dum mesmo nível do factor terão idêntico efeito alavanca, igual a $\frac{1}{n_i}$. Sobretudo no caso de delineamentos equilibrados, isto torna os gráficos de efeitos alavanca pouco úteis neste contexto.

# Análise de Resíduos na ANOVA a 1 Factor (cont.)

Padrão de resíduos numa ANOVA a 1 Factor.

## Gráfico de resíduos nos lírios

```
> plot(aov(Sepal.Width ~ Species, data=iris), which=1, pch=16)
```




Estes gráficos continuam a ser úteis para validar o pressuposto de homogeneidade de variâncias dos erros aleatórios.

# Violações aos pressupostos da ANOVA

As $n_i$ repetições em cada um dos $k$ níveis do factor, permitem testar formalmente se as variâncias dos erros aleatórios diferem entre os níveis do factor (testes de Bartlett ou de Levene, que não são dados).

Violações aos pressupostos do modelo não têm sempre igual gravidade. Alguns comentários gerais:

- O teste $F$ da ANOVA e as comparações múltiplas de Tukey são relativamente robustos a desvios à hipótese de normalidade.
- As violações ao pressuposto de variâncias homogéneas são em geral menos graves no caso de delineamentos equilibrados, mas podem ser graves em delineamentos não equilibrados.
- A falta de independência entre erros aleatórios é a violação mais grave dos pressupostos e deve ser evitada, o que é em geral possível com um delineamento experimental adequado.

# Uma advertência

Na formulação clássica do modelo ANOVA a um Factor, e a partir da equação-base

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij} , \qquad \forall\, i,j$$

em vez de impor a condição $\alpha_1 = 0$, impõe-se a condição $\sum_i \alpha_i = 0$.

Esta condição alternativa:

- Muda a forma de interpretar os parâmetros ($\mu$ é agora uma espécie de média geral de $Y$ e $\alpha_i$ o desvio da média do nível $i$ em relação a essa média geral);
- Muda os estimadores dos parâmetros.
- Não muda o resultado do teste $F$ à existência de efeitos do factor, nem a qualidade global do ajustamento.

# Delineamentos factoriais a dois factores

Vamos agora considerar delineamentos experimentais com dois factores.

A existência de mais do que um factor pode resultar de:

- pretender-se realmente estudar eventuais efeitos de mais do que um factor sobre a variável resposta;
- a tentativa de controlar a variabilidade experimental.

Historicamente, à segunda situação corresponde a designação blocos. Na primeira fala-se apenas em factores. Mas são situações análogas.

# Um exemplo

Pretende-se analisar o rendimento de 5 diferentes variedades de trigo. Os rendimentos são também afectados pelos tipo de solos usados.

Nem sempre é possível ter terrenos homogéneos numa experiência. Mesmo que seja possível, pode não ser desejável, por se limitar a validade dos resultados a um único tipo de solos.

Admita-se que estamos interessados em quatro terrenos, com solos diferentes. Cada terreno pode ser dividido em cinco parcelas viáveis para o trigo, tendo-se ao todo 20 parcelas.

Em vez de repartir aleatoriamente as 5 variedades pelas 20 parcelas, é preferível forçar cada tipo de terreno a conter uma parcela com cada variedade. Apenas dentro dos terrenos haverá casualização.

# Um exemplo (cont.)

A situação descrita no acetato anterior é a seguinte:

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Terreno 1 | Var.1 | Var.3 | Var.4 | Var.5 | Var.2 |
| Terreno 2 | Var.4 | Var.3 | Var.5 | Var.1 | Var.2 |
| Terreno 3 | Var.2 | Var.4 | Var.1 | Var.3 | Var.5 |
| Terreno 4 | Var.5 | Var.2 | Var.4 | Var.1 | Var.3 |

Houve uma restrição à casualização total: dentro de cada terreno há casualização, mas obriga-se cada terreno a ter uma parcela associada a cada nível do factor variedade.

A situação agora descrita corresponde a ter introduzido um segundo factor, o factor terreno. Neste exemplo temos um delineamento factorial a dois factores (*two-way ANOVA*), sendo um dos factores a variedade de trigo e o outro o tipo de solos.

# Representação delineamento factorial (2 factores)

Um delineamento factorial é um delineamento em que há observações para todas as possíveis combinações de níveis de cada factor.

| | | Factor B | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | Níveis | $B_1$ | $B_2$ | $B_3$ | $\ldots$ | $B_b$ |
| FACTOR A | $A_1$ | $\times\ \times\ \times$ | $\times\ \times\ \times$ | $\times\ \times\ \times$ | $\ldots$ | $\times\ \times\ \times$ |
| | $A_2$ | $\times\ \times\ \times$ | $\times\ \times\ \times$ | $\times\ \times\ \times$ | $\ldots$ | $\times\ \times\ \times$ |
| | $A_3$ | $\times\ \times\ \times$ | $\times\ \times\ \times$ | $\times\ \times\ \times$ | $\ldots$ | $\times\ \times\ \times$ |
| | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\ddots$ | $\vdots$ |
| | $A_a$ | $\times\ \times\ \times$ | $\times\ \times\ \times$ | $\times\ \times\ \times$ | $\ldots$ | $\times\ \times\ \times$ |

Atenção: Esta esquematização não corresponde a qualquer organização espacial.

Célula: cruzamento dum nível dum Factor com um nível do outro Factor. Corresponde a uma situação experimental. Nesta esquematização, há $ab$ células, cada uma com 3 observações.

# Modelos ANOVA a 2 Factores: notação

Admita-se a existência de:

- Uma variável resposta $Y$;
- Um Factor A, com $a$ níveis;
- Um Factor B, com $b$ níveis;
- $n$ observações, com pelo menos uma em cada uma das $ab$ situações experimentais (células).

O número de observações na célula correspondente ao nível $i$ do factor A, e $j$ do factor B é representado por $n_{ij}$.

O número total de observações é: $n = \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{b} n_{ij}$.

# Notação

Cada observação da variável resposta é identificada com três índices,

$$Y_{ijk}$$

onde:

- $i$ indica o nível $i$ do Factor A $\quad (i = 1, 2, ..., a)$.
- $j$ indica o nível $j$ do Factor B $\quad (j = 1, 2, ..., b)$.
- $k$ indica a repetição $k$ na célula $(i, j)$ $\quad (k = 1, 2, ..., n_{ij})$.

## Delineamento equilibrado

Se o número de observações for igual em todas as células, $n_{ij} = n_c$ , $\forall\, i, j$, estamos perante um delineamento equilibrado.

Estudaremos dois diferentes modelos ANOVA para um delineamento factorial com 2 factores.

# Modelo ANOVA a 2 factores (sem interacção)

Um primeiro modelo prevê a existência de dois diferentes tipos de efeitos associados aos níveis de cada factor. Admite-se que o valor esperado de cada observação $Y_{ijk}$ é da forma:

$$E[Y_{ijk}] \quad = \quad \mu_{ij} \quad = \quad \mu + \alpha_i + \beta_j \quad , \quad \forall\, i,j,k.$$

O parâmetro $\mu$ é comum a todas as observações.

Cada parâmetro $\alpha_i$ é um acréscimo que pode diferir entre níveis do Factor A, e é designado o efeito do nível $i$ do factor A.

Cada parâmetro $\beta_j$ é um acréscimo que pode diferir entre níveis do Factor B, e é designado o efeito do nível $j$ do factor B.

Admite-se que todos estes parâmetros são constantes.

Admite-se que a variação de $Y_{ijk}$ em torno do seu valor médio é aleatória e dada por um erro aleatório aditivo, $\varepsilon_{ijk}$ (com $E[\varepsilon_{ijk}] = 0$):

$$Y_{ijk} \;=\; \mu + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ijk} \;,$$

# As variáveis indicatrizes de nível de cada factor

A equação de base do modelo ANOVA a 2 factores (sem interacção) também pode ser escrita na forma vectorial, recorrendo a variáveis indicatrizes de pertença a cada nível de cada factor.

$\vec{\mathbf{Y}}$ o vector aleatório $n$-dimensional com a totalidade das observações da variável resposta.

$\vec{\mathbf{1}}_n$ o vector de $n$ uns.

$\vec{\mathscr{I}}_{A_i}$ a variável indicatriz de pertença ao nível $i$ do Factor A.

$\vec{\mathscr{I}}_{B_j}$ a variável indicatriz de pertença ao nível $j$ do Factor B.

$\vec{\boldsymbol{\varepsilon}}$ o vector aleatório dos $n$ erros aleatórios.

# A equação-base em notação vectorial (cont.)

Se se admitissem efeitos para todos os níveis de ambos os factores, temos a equação-base:

$$\vec{\mathbf{Y}} = \mu\vec{\mathbf{1}}_n + \alpha_1\vec{\mathscr{I}}_{A_1} + \alpha_2\vec{\mathscr{I}}_{A_2} + \ldots + \alpha_a\vec{\mathscr{I}}_{A_a} + \beta_1\vec{\mathscr{I}}_{B_1} + \beta_2\vec{\mathscr{I}}_{B_2} + \ldots + \beta_b\vec{\mathscr{I}}_{B_b} + \vec{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

A matriz do modelo $\mathbf{X}$ definida com base nesta equação teria como colunas os vectores $\vec{\mathbf{1}}_n$, $\vec{\mathscr{I}}_{A_1}$, $\vec{\mathscr{I}}_{A_2}$, ..., $\vec{\mathscr{I}}_{A_a}$, $\vec{\mathscr{I}}_{B_1}$, $\vec{\mathscr{I}}_{B_2}$, ..., $\vec{\mathscr{I}}_{B_b}$.

Nessa matriz haveria dependências lineares por duas diferentes razões:

- a soma das indicatrizes do Factor A daria a coluna dos uns, $\vec{\mathbf{1}}_n$;
- a soma das indicatrizes do Factor B daria a coluna dos uns, $\vec{\mathbf{1}}_n$.

Agora, são necessárias duas restrições aos parâmetros, não podendo estimar-se parâmetros $\alpha_i$ e $\beta_j$ para todos os níveis de cada Factor.

# A matriz $\mathbf{X}$ sem restrições no modelo

$$
\mathbf{X} = \left[\begin{array}{c|cccc|cccc}
1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\
1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\
1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\
1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\
\hline
1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\
1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\
1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\
1 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\
\hline
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\hline
1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \\
1 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 1
\end{array}\right]
$$

$$
\begin{array}{cccccccc}
\uparrow & \uparrow & \uparrow & & \uparrow & \uparrow & \uparrow & & \uparrow \\
\vec{\mathbf{1}}_n & \vec{\mathscr{I}}_{A_1} & \vec{\mathscr{I}}_{A_2} & \dots & \vec{\mathscr{I}}_{A_a} & \vec{\mathscr{I}}_{B_1} & \vec{\mathscr{I}}_{B_2} & \dots & \vec{\mathscr{I}}_{B_b}
\end{array}
$$

A exclusão da coluna $\vec{\mathbf{1}}_n$ não resolve o problema.

# Equação em notação vectorial, com restrições

Excluímos da equação do modelo as parcelas associadas ao primeiro nível de cada Factor, isto é, impõem-se as duas restrições:

$$\alpha_1 = 0 \qquad \text{e} \qquad \beta_1 = 0 \ ,$$

o que corresponde a excluir as colunas $\vec{\mathscr{I}}_{A_1}$ e $\vec{\mathscr{I}}_{B_1}$ da matriz $\mathbf{X}$.

A equação-base do modelo ANOVA a 2 Factores, sem interacção, fica:

$$\vec{\mathbf{Y}} = \mu \vec{\mathbf{1}}_{\mathrm{n}} + \alpha_2 \vec{\mathscr{I}}_{A_2} + \ldots + \alpha_a \vec{\mathscr{I}}_{A_a} + \beta_2 \vec{\mathscr{I}}_{B_2} + \ldots + \beta_b \vec{\mathscr{I}}_{B_b} + \vec{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

O parâmetro $\mu$ fica o valor esperado das observações na célula $(1,1)$:

$$Y_{11k} = \mu + \varepsilon_{11k} \qquad \Rightarrow \qquad E[Y_{11k}] = \mu = \mu_{11} \ .$$

# A matriz do delineamento na ANOVA a 2 Factores (sem interacção), com as restrições $\alpha_1 = 0$ e $\beta_1 = 0$

$$
\mathbf{X} = \left[\begin{array}{c|ccc|ccc}
1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
1 & 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 1 \\
1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 1 \\
\hline
1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 1 \\
1 & 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 1 \\
\hline
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\hline
1 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
1 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 1 \\
1 & 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 1
\end{array}\right]
\begin{array}{c|ccc|ccc}
\uparrow & \uparrow & & \uparrow & \uparrow & & \uparrow \\
\vec{1}_n & \vec{\mathscr{I}}_{A_2} & \cdots & \vec{\mathscr{I}}_{A_a} & \vec{\mathscr{I}}_{B_2} & \cdots & \vec{\mathscr{I}}_{B_b}
\end{array}
$$

# O modelo ANOVA a dois factores, sem interacção

Juntando os pressupostos necessários à inferência,

## Modelo ANOVA a dois factores, sem interacção

Existem $n$ observações, $Y_{ijk}$, $n_{ij}$ das quais associadas à célula $(i,j)$ $(i=1,...,a;\ j=1,...,b)$. Tem-se:

1. $Y_{ijk} = \mu_{11} + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ijk}$ , $\forall i=1,...,a;\ j=1,...,b;\ k=1,...,n_{ij}$ $\quad (\alpha_1 = 0; \beta_1 = 0)$.
2. $\varepsilon_{ijk} \frown \mathcal{N}(0, \sigma^2), \quad \forall i,j,k$
3. $\{\varepsilon_{ijk}\}_{i,j,k}$ v.a.s independentes.

O modelo tem $a+b-1$ parâmetros desconhecidos:

- o parâmetro $\mu_{11}$;
- os $a-1$ acréscimos $\alpha_i$ $(i>1)$; e
- os $b-1$ acréscimos $\beta_j$ $(j>1)$.

# Testando a existência de efeitos

Um teste de ajustamento global do modelo tem como hipótese nula que todos os efeitos, quer do factor A, quer do Factor B são simultaneamente nulos, mas não distingue entre os efeitos de cada factor.

Mais útil será testar separadamente a existência dos efeitos de cada factor. Seria útil dispôr de dois testes, para as hipóteses:

- Teste I: $H_0 : \alpha_i = 0\,, \quad \forall i = 2, ..., a$ ;
- Teste II: $H_0 : \beta_j = 0\,, \quad \forall j = 2, ..., b$.

# Teste aos efeitos do Factor B

O modelo ANOVA a 2 Factores, sem interacção (Acetato 311) tem equação vectorial:

$$\vec{\mathbf{Y}} = \mu\vec{\mathbf{1}}_n + \alpha_2\vec{\mathscr{I}}_{A_2} + \ldots + \alpha_a\vec{\mathscr{I}}_{A_a} + \beta_2\vec{\mathscr{I}}_{B_2} + \ldots + \beta_b\vec{\mathscr{I}}_{B_b} + \vec{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

Sendo um Modelo Linear pode-se aplicar a teoria conhecida para este tipo de modelos e testar as hipóteses:

$$H_0 : \beta_j = 0\,, \quad \forall j = 2,\ldots,b \qquad \text{vs.} \qquad H_1 : \exists j \quad \text{tal que } \beta_j \neq 0\ ,$$

através dum teste $F$ parcial comparando o modelo completo

$$(\text{Modelo } M_{A+B}) \qquad Y_{ijk} = \mu_{11} + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ijk}\ ,$$

com o submodelo de equação de base

$$(\text{Modelo } M_A) \qquad Y_{ijk} = \mu_{11} + \alpha_i + \varepsilon_{ijk}\ ,$$

que é um modelo ANOVA a 1 Factor (factor A).

# A construção do teste aos efeitos do Factor B

Assim,

- Ajusta-se o modelo completo $M_{A+B}$ e o submodelo $M_A$.
- Obtêm-se as respectivas Somas de Quadrados Residuais, que designamos $SQRE_{A+B}$ e $SQRE_A$.
- Efectua-se o teste $F$ parcial indicado. A estatística de teste é:

$$\text{(Efeitos Factor B)} \quad F = \frac{\overbrace{\frac{SQRE_A - SQRE_{A+B}}{b-1}}^{=SQB}}{\frac{SQRE_{A+B}}{n-(a+b-1)}} = \frac{QMB}{QMRE}$$

  definindo $QMB = \frac{SQB}{b-1} = \frac{SQRE_A - SQRE_{A+B}}{b-1}$.

- $F$ tem distribuição $F_{[b-1,\, n-(a+b-1)]}$ sob $H_0 : \beta_j = 0, \forall j$.

# A construção do teste aos efeitos do Factor A

Consideremos também um teste aos efeitos do Factor A, definido de forma um pouco diferente.

Defina-se:

- $SQA = SQF_A$, a Soma de Quadrados do Factor no Modelo $M_A$;
- $QMA = \frac{SQA}{a-1}$, o Quadrado Médio do Factor no Modelo $M_A$;
- $SQRE_{A+B}$ e $QMRE = \frac{SQRE_{A+B}}{n-(a+b-1)}$, como antes.

É possível provar que, caso $\alpha_i = 0$, $\forall_{i=2,\ldots,a}$, a estatística

$$F = \frac{QMA}{QMRE} = \frac{\frac{SQA}{a-1}}{\frac{SQRE_{A+B}}{n-(a+b-1)}}$$

tem distribuição $F_{(a-1,n-(a+b-1))}$.

# O Teste $F$ aos efeitos do factor A

Sendo válido o Modelo de ANOVA a dois factores, sem interacção:

## Teste $F$ aos efeitos do factor A

Hipóteses: $H_0 : \alpha_i = 0 \quad \forall i=2,...,a$ vs. $H_1 : \exists i=2,..,a \text{ t.q. } \alpha_i \neq 0.$

[A NÃO AFECTA $Y$] vs. [A AFECTA $Y$]

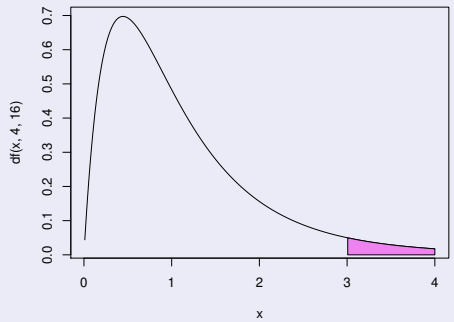
Estatística do Teste: $F = \frac{QMA}{QMRE} \frown F_{(a-1,n-(a+b-1))}$ se $H_0$.

Nível de significância do teste: $\alpha$

Região Crítica (Região de Rejeição): Unilateral direita

Rejeitar $H_0$ se

$F_{calc} > f_{\alpha(a-1,n-(a+b-1))}$



# O Teste $F$ aos efeitos do factor B

Sendo válido o Modelo de ANOVA a dois factores, sem interacção:

## Teste $F$ aos efeitos do factor B

Hipóteses: $H_0 : \beta_j = 0 \quad \forall j=2,\ldots,b$ vs. $H_1 : \exists j=2,..,b \text{ t.q. } \beta_j \neq 0.$

[B NÃO AFECTA $Y$] vs. [B AFECTA $Y$]

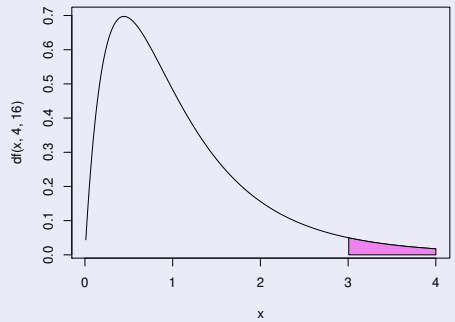
Estatística do Teste: $F = \frac{QMB}{QMRE} \overset{\cdot}{\sim} F_{(b-1,\,n-(a+b-1))}$ se $H_0$.

Nível de significância do teste: $\alpha$

Região Crítica (Região de Rejeição): Unilateral direita

Rejeitar $H_0$ se

$F_{calc} > f_{\alpha(b-1,n-(a+b-1))}$



# A nova decomposição de $SQT$

Tendo em conta as Somas de Quadrados antes definidas, tem-se:

$$\begin{aligned} SQB &= SQRE_A - SQRE_{A+B} \\ SQA &= SQF_A = SQT - SQRE_A \end{aligned}$$

Somando estas SQs a $SQRE_{A+B}$, obtém-se:

**A decomposição de $SQT$**

$$SQA + SQB + SQRE_{A+B} = SQT$$

que é uma nova decomposição de $SQT$, em três parcelas, associadas ao facto de haver agora dois factores com efeitos previstos no modelo, mais a variabilidade residual.

# Quadro-resumo ANOVA a 2 Factores (sem interacção)

| Fonte | g.l. | SQ | QM | $f_{calc}$ |
|---|---|---|---|---|
| Factor A | $a-1$ | $SQA = SQF_A$ | $QMA = \frac{SQA}{a-1}$ | $\frac{QMA}{QMRE}$ |
| Factor B | $b-1$ | $SQB = SQRE_A - SQRE_{A+B}$ | $QMB = \frac{SQB}{b-1}$ | $\frac{QMB}{QMRE}$ |
| Resíduos | $n-(a+b-1)$ | $SQRE = SQRE_{A+B}$ | $QMRE = \frac{SQRE}{n-(a+b-1)}$ | |
| Total | $n-1$ | $SQT = (n-1)\, s_y^2$ | – | – |

# ANOVA a dois Factores, sem interacção no R

Para efectuar uma ANOVA a dois Factores (sem interacção) no R, convém organizar os dados numa `data.frame` com três colunas:

1. uma para os valores (numéricos) da variável resposta;
2. outra para o factor A (com a indicação dos seus níveis);
3. outra para o factor B (com a indicação dos seus níveis).

As fórmulas utilizadas no R para indicar uma ANOVA a dois Factores, sem interacção, são semelhantes às usadas na Regressão Linear com dois preditores, devendo o nome dos dois factores ser separado pelo símbolo $+$:

```
y  ~  fA + fB
```

# Um exemplo clássico: os rendimentos de cevada

O rendimento de $a=5$ variedades de cevada (*manchuria, svansota, velvet, trebi* e *peatland*) foi registado em $b=6$ diferentes localidades [a]. Em cada localidade foi semeada (com casualização) uma parcela com cada variedade ($n=30$).

```
> summary(aov(Y1 ~ Var + Loc, data=immer))
            Df  Sum Sq Mean Sq F value    Pr(>F)
Var          4  2756.6   689.2  4.2309   0.01214 *
Loc          5 17829.8  3566.0 21.8923 1.751e-07 ***
Residuals   20  3257.7   162.9
```

Há indicação de efeitos significativos (ao nível $\alpha=0.05$) entre variedades e muito significativos entre localidades. Num modelo ignorando os efeitos de localidades, desaparecia a significância dos efeitos de variedade:

```
> summary(aov(Y1 ~ Var, data=immer))
            Df  Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
Var          4  2756.6   689.2   0.817 0.5264
Residuals   25 21087.6   843.5
```

[a] Dados em Immer, Hayes e LeRoy Powers, Statistical adaptation of barley varietal adaptation, Journal of the American Society for Agronomy, 26, 403-419, 1934.

# Trocando a ordem dos factores

Atenção: A forma como foram definidas as Somas de Quadrados de cada factor é diferente: $SQB = SQRE_A - SQRE_{A+B}$ e $SQA = SQF_A$.

A troca do papel dos factores A e B produz resultados diferentes em delineamentos não equilibrados. Designando por $M_B$ o modelo ANOVA a um factor, mas apenas com o factor que temos chamado $B$, tem-se:

$$\begin{aligned} SQB &= SQF_B = SQT - SQRE_B \\ SQA &= SQRE_B - SQRE_{A+B} \, . \end{aligned}$$

Continua a ser verdade que $SQT$ se pode decompor na forma

$$SQT = SQA + SQB + SQRE_{A+B} \, .$$

Justificam-se testes análogos aos dos acetatos 316 e 317.
Mas as duas formas alternativas de definir $SQA$ e $SQB$ apenas produzem resultados iguais no caso de delineamentos equilibrados, pelo que só nesse caso a ordem dos factores é arbitrária. (Ver também o Ex. ANOVA 9)

# As várias médias amostrais

Sejam, num delineamento equilibrado:

$\overline{Y}_{i..}$ a média amostral das $b\,n_c$ observações do nível $i$ do Factor A, $\overline{Y}_{i..} = \frac{1}{b\,n_c} \sum_{j=1}^{b} \sum_{k=1}^{n_c} Y_{ijk}$

$\overline{Y}_{.j.}$ a média amostral das $a\,n_c$ observações do nível $j$ do Factor B, $\overline{Y}_{.j.} = \frac{1}{a\,n_c} \sum_{i=1}^{a} \sum_{k=1}^{n_c} Y_{ijk}$

$\overline{Y}_{...}$ a média amostral da totalidade das $n = a\,b\,n_c$ observações, $\overline{Y}_{...} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{b} \sum_{k=1}^{n_c} Y_{ijk}$.

# *SQA* e *SQB* em delineamentos equilibrados

Num delineamento equilibrado, SQA é igual à Soma de Quadrados do Factor ($SQF_A$) do Modelo $M_A$, apenas com o Factor A (acetato 315).

Nesse modelo, os valores ajustados são $\hat{Y}_{ijk} = \overline{Y}_{i..}$ (acetato 272). Assim, num delineamento equilibrado, tem-se:

$$SQF_A = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n_c}(\underbrace{\hat{Y}_{ijk}}_{=\overline{Y}_{i..}} - \overline{Y}_{...})^2 = b\,n_c \cdot \sum_{i=1}^{a}(\overline{Y}_{i..} - \overline{Y}_{...})^2 = SQA\,.$$

Da mesma forma, num delineamento equilibrado, *SQB* é a Soma de Quadrados do Factor ($SQF_B$) do Modelo $M_B$, apenas com o Factor B. Nesse modelo, os valores ajustados são $\hat{Y}_{ijk} = \overline{Y}_{.j.}$, logo:

$$SQF_B = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n_c}(\underbrace{\hat{Y}_{ijk}}_{=\overline{Y}_{.j.}} - \overline{Y}_{...})^2 = a\,n_c \cdot \sum_{j=1}^{b}(\overline{Y}_{.j.} - \overline{Y}_{...})^2 = SQB\,.$$

# Fórmulas para delineamentos equilibrados (cont.)

Se o delineamento é equilibrado, ou seja, $n_{ij} = n_c \ , \ \forall\, i,j \ ,$ tem-se:

- $\hat{\mu}_{11} = \overline{Y}_{1..} + \overline{Y}_{.1.} - \overline{Y}_{...}$
- $\hat{\alpha}_i = \overline{Y}_{i..} - \overline{Y}_{1..}$
- $\hat{\beta}_j = \overline{Y}_{.j.} - \overline{Y}_{.1.}$

Tendo em conta a equação base do Modelo, os valores ajustados de cada observação dependem apenas das médias dos respectivos níveis em cada factor e da média geral de todas as observações:

$$\hat{Y}_{ijk} \quad = \quad \hat{\mu}_{11} + \hat{\alpha}_i + \hat{\beta}_j \quad = \quad \overline{Y}_{i..} + \overline{Y}_{.j.} - \overline{Y}_{...} \qquad , \quad \forall\, i,j,k$$

Aviso: Ao contrário do que sucede na ANOVA a um factor, os valores ajustados $\hat{Y}_{ijk}$ não são a média das observações de $Y$ na célula $(i,j)$.

# O quadro-resumo da ANOVA a 2 Factores (sem interacção; delineamento equilibrado)

| Fonte | g.l. | SQ | QM | $f_{calc}$ |
|---|---|---|---|---|
| Factor A | $a-1$ | $SQA = b\,n_c \cdot \sum_{i=1}^{a} (\overline{y}_{i..} - \overline{y}_{...})^2$ | $QMA = \frac{SQA}{a-1}$ | $\frac{QMA}{QMRE}$ |
| Factor B | $b-1$ | $SQB = a\,n_c \cdot \sum_{j=1}^{b} (\overline{y}_{.j.} - \overline{y}_{...})^2$ | $QMB = \frac{SQB}{b-1}$ | $\frac{QMB}{QMRE}$ |
| Resíduos | $n-(a+b-1)$ | $SQRE = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n_c} [y_{ijk} - (\overline{y}_{i..} + \overline{y}_{.j.} - \overline{y}_{...})]^2$ | $QMRE = \frac{SQRE}{n-(a+b-1)}$ | |
| Total | $n-1$ | $SQT = (n-1)\,s_y^2$ | – | – |

# A interpretação dos parâmetros

A interpretação do significado dos parâmetros do modelo depende da convenção usada para resolver o problema da multicolinearidade das colunas da matriz **X**.

Vejamos a interpretação dos parâmetros resultante da convenção $\alpha_1 = \beta_1 = 0$.

Uma observação de $Y$ efectuada na célula $(1,1)$, correspondente ao cruzamento do primeiro nível de cada factor, será da forma:

$$Y_{11k} = \mu_{11} + \underbrace{\alpha_1}_{=0} + \underbrace{\beta_1}_{=0} + \varepsilon_{11k} \qquad \Longrightarrow \qquad E[Y_{11k}] = \mu_{11}$$

O parâmetro $\mu_{11}$ corresponde ao valor esperado da variável resposta $Y$ na célula cujas indicatrizes foram excluídas da matriz do delineamento.

# A interpretação dos parâmetros $\alpha_i$

Uma observação de $Y$ efectuada na célula $(i,1)$, com $i>1$ (cruzamento dum nível do factor A diferente do primeiro, com o primeiro nível do Factor B) é da forma:

$$Y_{i1k} = \mu_{11} + \alpha_i + \underbrace{\beta_1}_{=0} + \varepsilon_{i1k} \qquad \Longrightarrow \qquad \mu_{i1} = E[Y_{i1k}] = \mu_{11} + \alpha_i$$

O parâmetro $\alpha_i = \mu_{i1} - \mu_{11}$ corresponde ao acréscimo no valor esperado da variável resposta $Y$ associado a observações do nível $i>1$ do Factor A (relativamente às observações do primeiro nível do Factor A), quando $j=1$. Designa-se o efeito do nível $i$ do factor A.

# Interpretação dos parâmetros $\alpha_i$

Tabela com médias populacionais de célula (situação experimental):

| | | Factor B | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | Níveis | $B_1$ | $B_2$ | $B_3$ | $\ldots$ | $B_b$ |
| FACTOR A | $A_1$ | $\mu_{11}$ | $\mu_{12}$ | $\mu_{13}$ | $\ldots$ | $\mu_{1b}$ |
| | $A_2$ | $\mu_{21} = \mu_{11} + \alpha_2$ | $\mu_{22}$ | $\mu_{23}$ | $\ldots$ | $\mu_{2b}$ |
| | $A_3$ | $\mu_{31} = \mu_{11} + \alpha_3$ | $\mu_{32}$ | $\mu_{33}$ | $\ldots$ | $\mu_{3b}$ |
| | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\ddots$ | $\vdots$ |
| | $A_a$ | $\mu_{a1} = \mu_{11} + \alpha_a$ | $\mu_{a2}$ | $\mu_{a3}$ | $\ldots$ | $\mu_{ab}$ |

# A interpretação dos parâmetros $\beta_j$

Uma observação de $Y$ efectuada na célula $(1,j)$, com $j>1$ (cruzamento do primeiro nível do factor A com um nível do Factor B diferente do primeiro) é da forma:

$$Y_{1jk} = \mu_{11} + \underbrace{\alpha_1}_{=0} + \beta_j + \varepsilon_{1jk} \qquad \Longrightarrow \qquad \mu_{1j} = E[Y_{1jk}] = \mu_{11} + \beta_j$$

O parâmetro $\beta_j = \mu_{1j} - \mu_{11}$ corresponde ao acréscimo no valor esperado da variável resposta $Y$ associado a observações do nível $j$ do Factor B (relativamente às observações do primeiro nível do Factor B), quando $i=1$. Designa-se o efeito do nível $j$ do factor B.

# Interpretação dos parâmetros $\beta_j$

Tabela com médias populacionais de célula (situação experimental):

| | | Factor B | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | Níveis | $B_1$ | $B_2$ | $B_3$ | $\ldots$ | $B_b$ |
| Factor A | $A_1$ | $\mu_{11}$ | $\mu_{12} = \mu_{11} + \beta_2$ | $\mu_{13} = \mu_{11} + \beta_3$ | $\ldots$ | $\mu_{1b} = \mu_{11} + \beta_b$ |
| | $A_2$ | $\mu_{21}$ | $\mu_{22}$ | $\mu_{23}$ | $\ldots$ | $\mu_{2b}$ |
| | $A_3$ | $\mu_{31}$ | $\mu_{32}$ | $\mu_{33}$ | $\ldots$ | $\mu_{3b}$ |
| | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\vdots$ | $\ddots$ | $\vdots$ |
| | $A_a$ | $\mu_{a1}$ | $\mu_{a2}$ | $\mu_{a3}$ | $\ldots$ | $\mu_{ab}$ |

# Observações de $Y$ no caso geral

Mas este modelo é pouco flexível: não existem mais parâmetros e os valores esperados nas restantes células já estão fixados.

Para observações de $Y$ efectuadas numa célula genérica $(i,j)$, com $i > 1$ e $j > 1$, tem-se:

$$Y_{ijk} = \mu_{11} + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ijk} \qquad \Longrightarrow \qquad \mu_{ij} = E[Y_{ijk}] = \mu_{11} + \alpha_i + \beta_j.$$

Todas as parcelas destes valores esperados de $Y$ já foram usados. Não há flexibilidade para descrever as médias de células com $i > 1$ e $j > 1$.

Um modelo sem efeitos de interacção é utilizado sobretudo quando existe uma única observação em cada célula, i.e., $n_{ij} = 1, \forall\ i,j$.

# Modelos com interacção

Um modelo ANOVA a 2 Factores, sem interacção, foi considerado para um delineamento factorial, isto é, em que se cruzam todos os níveis de um e outro factor. Mas trata-se dum modelo pouco flexível.

Na presença de repetições nas células, a forma mais natural de modelar um delineamento com dois factores é a de prever a existência de um terceiro tipo de efeitos: os efeitos de interacção.

A ideia é incorporar na equação base do modelo para $Y_{ijk}$ uma parcela $(\alpha\beta)_{ij}$ que permita que em cada célula haja um efeito específico associado à combinação dos níveis $i$ do Factor A e $j$ do Factor B:

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijk} \ .$$

# Os valores esperados de $Y_{ijk}$ (modelo com interacção)

Vamos admitir as seguintes restrições aos parâmetros:

$$\alpha_1 = 0 \quad ; \quad \beta_1 = 0 \quad ; \quad (\alpha\beta)_{1j} = 0 \ , \ \forall j \quad ; \quad (\alpha\beta)_{i1} = 0 \ , \ \forall i.$$

Tem-se, a partir da equação $Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijk}$:

- Para a primeira célula ($i = j = 1$): $\mu_{11} = E[Y_{11k}] = \mu$.
- Nas restantes células $(1, j)$ do primeiro nível do Factor A: $\mu_{1j} = E[Y_{1jk}] = \mu_{11} + \beta_j$.
- Nas restantes células $(i, 1)$ do primeiro nível do Factor B: $\mu_{i1} = E[Y_{i1k}] = \mu_{11} + \alpha_i$.
- Nas células genéricas $(i, j)$, com $i > 1$ e $j > 1$, $\mu_{ij} = E[Y_{ijk}] = \mu_{11} + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij}$.

Os efeitos $\alpha_i$ e $\beta_j$ designam-se efeitos principais de cada Factor.

# Os valores esperados de $Y_{ijk}$ (modelo com interacção)

Efeito das restrições $\alpha_1 = 0$ ; $\beta_1 = 0$ ; $(\alpha\beta)_{ij} = 0$ se $i = 1$ ou $j = 1$:

| FACTOR A | Níveis | Factor B: $B_1$ | $B_2$ | $B_3$ | ... | $B_b$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $A_1$ | × × × | × × × | × × × | ... | × × × |
| | $A_2$ | × × × | × × × | × × × | ... | × × × |
| | $A_3$ | × × × | × × × | × × × | ... | × × × |
| | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋮ | ⋱ | ⋮ |
| | $A_a$ | × × × | × × × | × × × | ... | × × × |

As observações que não estão associadas a $A_1$ (primeira linha) têm efeitos $\alpha_i$.

As observações que não estão associadas a $B_1$ (primeira coluna) têm efeitos $\beta_j$.

As observações que não são da primeira coluna nem da primeira linha têm efeitos de interacção $(\alpha\beta)_{ij}$.

# O modelo ANOVA a dois factores, com interacção

Juntando os pressupostos necessários à inferência,

## Modelo ANOVA a dois factores, com interacção (Modelo $M_{A*B}$)

Existem $n$ observações, $Y_{ijk}$, $n_{ij}$ das quais associadas à célula $(i,j)$ $(i=1,...,a;\ j=1,...,b)$. Tem-se:

1. $Y_{ijk} = \mu_{11} + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijk}$ , $\quad \forall i{=}1,...,a\ ;\ j{=}1,...,b\ ;\ k{=}1,...,n_{ij}$
   $(\alpha_1{=}0\ ;\ \beta_1{=}0\ ;\ (\alpha\beta)_{ij}{=}0$ , se $i{=}1$ e/ou $j{=}1)$.
2. $\varepsilon_{ijk} \frown \mathcal{N}(0, \sigma^2)$
3. $\{\varepsilon_{ijk}\}_{i,j,k}$ v.a.s independentes.

O modelo tem *ab* parâmetros desconhecidos:

- a 1 média da célula de referência, $\mu_{11}$;
- os $a-1$ acréscimos $\alpha_i$ $(i>1)$;
- os $b-1$ acréscimos $\beta_j$ $(j>1)$; e
- os $(a-1)(b-1)$ efeitos de interacção $(\alpha\beta)_{ij}$, para $i>1$, $j>1$.

# Variáveis indicatrizes de célula

A versão vectorial da equação do modelo com interacção associa os novos efeitos $(\alpha\beta)_{ij}$ a variáveis indicatrizes das respectivas células.

A equação-base do modelo ANOVA a 2 Factores, com interacção, é:

$$\begin{aligned}\vec{\mathbf{Y}} \;=\; & \mu\vec{\mathbf{1}}_{\mathrm{n}} + \alpha_2\vec{\mathscr{I}}_{A_2} + \ldots + \alpha_a\vec{\mathscr{I}}_{A_a} + \beta_2\vec{\mathscr{I}}_{B_2} + \ldots + \beta_b\vec{\mathscr{I}}_{B_b} + \\ & + (\alpha\beta)_{22}\vec{\mathscr{I}}_{A_2:B_2} + (\alpha\beta)_{23}\vec{\mathscr{I}}_{A_2:B_3} + \ldots + (\alpha\beta)_{ab}\vec{\mathscr{I}}_{A_a:B_b} + \vec{\boldsymbol{\varepsilon}}\end{aligned}$$

onde $\vec{\mathscr{I}}_{A_i:B_j}$ representa a variável indicatriz da célula correspondente ao nível *i* do Factor A e nível *j* do factor B.

Este modelo com *ab* parâmetros é designado modelo $M_{A*B}$

# Modelo ANOVA a 2 factores, com interacção (cont.)

A matriz **X** do delineamento é agora constituída por $ab$ colunas:

- uma coluna de uns, $\vec{\mathbf{1}}_n$, associada ao parâmetro $\mu_{11}$.
- $a-1$ colunas de indicatrizes de nível do factor A, $\vec{\mathscr{I}}_{A_i}$, $(i>1)$, associadas aos parâmetros $\alpha_i$.
- $b-1$ colunas de indicatrizes de nível do factor B, $\vec{\mathscr{I}}_{B_j}$, $(j>1)$, associadas aos parâmetros $\beta_j$.
- $(a-1)(b-1)$ colunas de indicatrizes de célula, $\vec{\mathscr{I}}_{A_i:B_j}$, $(i,j>1)$, associadas aos efeitos de interacção $(\alpha\beta)_{ij}$.

Como em modelos anteriores, $\hat{\vec{\mathbf{Y}}} = \mathbf{H}\vec{\mathbf{Y}}$, sendo **H** a matriz que projecta ortogonalmente sobre o espaço $\mathscr{C}(\mathbf{X})$ gerado pelas colunas desta matriz **X**.

E também, $SQRE_{A*B} = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n_{ij}}(Y_{ijk}-\hat{Y}_{ijk})^2$.

# Os três testes ANOVA

Neste delineamento, desejamos fazer um teste à existência de cada um dos três tipos de efeitos:

- Teste I: $H_0 : (\alpha\beta)_{ij} = 0\,, \quad \forall\, i = 2,...,a\,,\ \forall j = 2,...,b$ ;
- Teste II: $H_0 : \alpha_i = 0\,, \quad \forall i = 2,...,a$ ; e
- Teste III: $H_0 : \beta_j = 0\,, \quad \forall j = 2,...,b$ .

As estatísticas de teste para cada um destes três testes obtêm-se a partir da decomposição da Soma de Quadrados Total (ou seja, da *análise da variancia*) em parcelas convenientes.

# Testando efeitos de interacção

Para testar a existência de efeitos de interacção,

$$H_0 : (\alpha\beta)_{ij} = 0\,, \quad \forall\, i = 2,...,a\,,\ \forall j = 2,...,b\,,$$

pode efectuar-se um teste $F$ parcial comparando o modelo

$$(\text{Modelo } M_{A*B}) \qquad Y_{ijk} \;=\; \mu_{11} + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijk}\;,$$

com o submodelo sem efeitos de interacção

$$(\text{Modelo } M_{A+B}) \qquad Y_{ijk} \;=\; \mu_{11} + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ijk}\;,$$

Designa-se Soma de Quadrados associada à interacção à diferença

$$SQAB \;=\; SQRE_{A+B} - SQRE_{A*B}$$

# Testando os efeitos principais de cada Factor

Para testar os efeitos principais dos Factor B ($H_0 : \beta_j = 0\,,\ \forall j = 2, ..., b$ ) e do Factor A ($H_0 : \alpha_i = 0\,,\ \forall i = 2, ..., a$ ) pode partir-se dos modelos

$$\begin{aligned} (\text{Modelo } M_{A+B}) \qquad Y_{ijk} &= \mu_{11} + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ijk} \\ (\text{Modelo } M_A) \qquad Y_{ijk} &= \mu_{11} + \alpha_i + \varepsilon_{ijk}\ , \end{aligned}$$

Defina-se:

$$\begin{aligned} SQB &= SQRE_A - SQRE_{A+B} \\ SQA &= SQF_A = SQT - SQRE_A \end{aligned}$$

Nota: Estas duas Somas de Quadrados definem-se da mesma forma que no modelo sem efeitos de interacção.

# A decomposição de $SQT$

Definimos :

$$\begin{aligned} SQAB &= SQRE_{A+B} - SQRE_{A*B} \\ SQB &= SQRE_{A} - SQRE_{A+B} \\ SQA &= SQF_A = SQT - SQRE_A \end{aligned}$$

Somando estas Somas de Quadrados a $SQRE_{A*B}$, obtém-se:

$$SQT = SQRE_{A*B} + SQAB + SQA + SQB$$

Esta decomposição de $SQT$ gera as quantidades nas quais se baseiam as estatísticas dos três testes associados ao Modelo $M_{A*B}$.

# O quadro-resumo

Com base na decomposição do acetato 342 podemos construir o quadro resumo da ANOVA a 2 Factores, com interacção.

| Fonte | g.l. | SQ | QM | $f_{calc}$ |
|---|---|---|---|---|
| Factor A | $a-1$ | $SQA$ | $QMA = \frac{SQA}{a-1}$ | $\frac{QMA}{QMRE}$ |
| Factor B | $b-1$ | $SQB$ | $QMB = \frac{SQB}{b-1}$ | $\frac{QMB}{QMRE}$ |
| Interacção | $(a-1)(b-1)$ | $SQAB$ | $QMAB = \frac{SQAB}{(a-1)(b-1)}$ | $\frac{QMAB}{QMRE}$ |
| Resíduos | $n-ab$ | $SQRE$ | $QMRE = \frac{SQRE}{n-ab}$ | |
| Total | $n-1$ | $SQT = (n-1)\,s_y^2$ | – | – |

Os graus de liberdade de cada tipo de efeito são o número de parâmetros desse tipo que sobram após a imposição das restrições.

Como em qualquer modelo linear, os graus de liberdade residuais são o número de observações ($n$) menos o número de parâmetros do modelo ($ab$).

# O Teste $F$ aos efeitos de interacção

Sendo válido o Modelo ANOVA a dois factores, com interacção:

## Teste $F$ aos efeitos de interacção

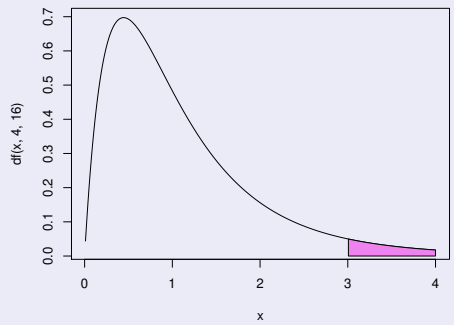
Hipóteses: $H_0 : (\alpha\beta)_{ij} = 0 \quad \forall i,j$ vs. $H_1 : \exists i,j \text{ t.q. } (\alpha\beta)_{ij} \neq 0$.
[NÃO HÁ INTERACÇÃO] vs. [HÁ INTERACÇÃO]

Estatística do Teste: $F = \frac{QMAB}{QMRE} \frown F_{((a-1)(b-1),n-ab)}$ se $H_0$.

Nível de significância do teste: $\alpha$

Região Crítica (Região de Rejeição): Unilateral direita

Rejeitar $H_0$ se
$F_{calc} > f_{\alpha((a-1)(b-1),n-ab)}$



# O Teste $F$ aos efeitos principais do factor A

Sendo válido o Modelo ANOVA a 2 factores com interacção tem-se:

## Teste $F$ aos efeitos principais do factor A

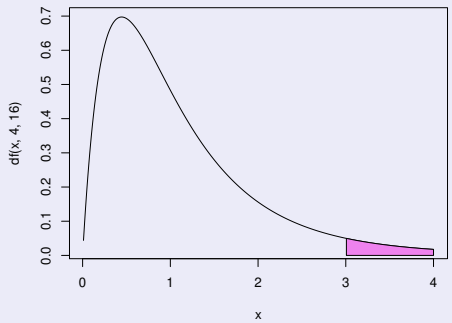
Hipóteses: $H_0 : \alpha_i = 0 \quad \forall i=2,...,a$ vs. $H_1 : \exists i=2,..,a \text{ t.q. } \alpha_i \neq 0$.
[$\nexists$ EFEITOS DE A] vs. [$\exists$ EFEITOS DE A]

Estatística do Teste: $F = \frac{QMA}{QMRE} \frown F_{(a-1,n-ab)}$ se $H_0$.

Nível de significância do teste: $\alpha$

Região Crítica (Região de Rejeição): Unilateral direita

Rejeitar $H_0$ se
$F_{calc} > f_{\alpha(a-1,n-ab)}$



# O Teste $F$ aos efeitos principais do factor B

Sendo válido o Modelo ANOVA a 2 factores com interacção tem-se:

## Teste $F$ aos efeitos principais do factor B

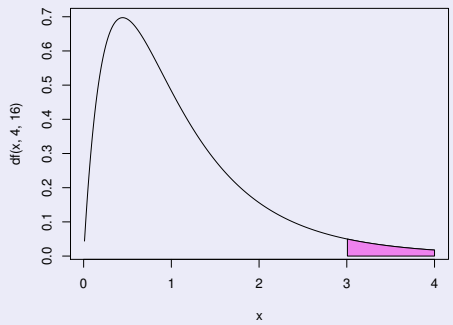
Hipóteses: $H_0 : \beta_j = 0 \quad \forall j=2,\ldots,b$ vs. $H_1 : \exists j=2,..,b \text{ t.q. } \beta_j \neq 0$.
[$\nexists$ EFEITOS DE B] vs. [$\exists$ EFEITOS DE B]

Estatística do Teste: $F = \frac{QMB}{QMRE} \frown F_{(b-1,n-ab)}$ se $H_0$.

Nível de significância do teste: $\alpha$

Região Crítica (Região de Rejeição): Unilateral direita

Rejeitar $H_0$ se
$F_{calc} > f_{\alpha(b-1,n-ab)}$



# ANOVA a dois Factores, com interacção no R

Para efectuar uma ANOVA a dois Factores, com interacção, no R, organizam-se os dados de forma igual à usada para o modelo sem interacção: uma `data.frame` com três colunas:

1. uma para a variável resposta;
2. outra para o factor A;
3. outra para o factor B.

As fórmulas utilizadas no R para indicar uma ANOVA a dois Factores, com interacção, recorrem ao símbolo $*$:

```
y  ~  fA * fB
```

sendo `y` o nome da variável resposta e `fA` e `fB` os nomes dos factores.

# Estimação da interacção necessita de repetições

Para se poder estudar efeitos de interacção, é necessário que haja repetições nas células.

Os graus de liberdade do *SQRE* neste modelo são $n - ab$. Se houver uma única observação em cada célula, tem-se $n = ab$, ou seja, tantos parâmetros quantas as observações existentes. Nesse caso, nem sequer será possível definir o Quadrado Médio Residual, *QMRE*.

Num delineamento com uma única observação por célula é obrigatório optar por um modelo sem interacção.

Havendo repetições, é mais natural considerar um modelo com interacção e deixar que a conclusão sobre a existência, ou não, desse tipo de efeitos resulte do estudo do modelo.

Não constando do modelo, eventuais efeitos de interacção irão inflacionar a variabilidade residual, não explicada pelo modelo.

# Valores ajustados de $Y$ no modelo com interacção

Às médias já definidas no estudo do modelo a dois Factores, sem efeitos de interacção, (acetato 323):

$\overline{Y}_{i..}$ - nível $i$ do Factor A;

$\overline{Y}_{.j.}$ - nível $j$ do Factor B;

$\overline{Y}_{...}$ - global;

acrescentam-se agora as médias de cada célula:

$$\overline{Y}_{ij.} = \frac{1}{n_{ij}} \sum_{k=1}^{n_{ij}} Y_{ijk} \ .$$

Os valores ajustados $\hat{Y}_{ijk}$ são iguais para todas as observações numa mesma célula, e são dados pela média amostral da célula:

$$\hat{Y}_{ijk} = \overline{Y}_{ij.} \ .$$

# Estimadores de parâmetros

Os estimadores dos parâmetros num modelo ANOVA a 2 Factores, com interacção, são dadas pelas quantidades amostrais correspondentes às definições populacionais de cada parâmetro (ver acetato 334):

- $\mu = \mu_{11} \quad \Rightarrow \quad \hat{\mu} = \hat{\mu}_{11} = \overline{Y}_{11\cdot}$
- $\alpha_i = \mu_{i1} - \mu_{11} \quad \Rightarrow \quad \hat{\alpha}_i = \overline{Y}_{i1\cdot} - \overline{Y}_{11\cdot} \qquad (i > 1)$
- $\beta_j = \mu_{1j} - \mu_{11} \quad \Rightarrow \quad \hat{\beta}_j = \overline{Y}_{1j\cdot} - \overline{Y}_{11\cdot} \qquad (j > 1)$
- $(\alpha\beta)_{ij} = \mu_{ij} - \cancel{\mu_{11}} - \underbrace{\alpha_i}_{=\mu_{i1}-\cancel{\mu_{11}}} - \underbrace{\beta_j}_{=\mu_{1j}-\mu_{11}} = \mu_{ij} + \mu_{11} - \mu_{i1} - \mu_{1j}$

  $\Rightarrow \quad \widehat{(\alpha\beta)}_{ij} = (\overline{Y}_{ij\cdot} + \overline{Y}_{11\cdot}) - (\overline{Y}_{i1\cdot} + \overline{Y}_{1j\cdot}) \qquad (i,j > 1)$

Intervalos de confiança ou testes de hipóteses para qualquer parâmetro individual, ou combinações lineares desses parâmetros, podem ser efectuados utilizando a teoria geral do Modelo Linear.

# Soma de Quadrados Residual

Como os valores ajustados correspondem às medias amostrais da célula onde se efectuaram as observações, $\hat{Y}_{ijk} = \overline{Y}_{ij.}$, tem-se:

$$SQRE = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n_{ij}} (Y_{ijk} - \hat{Y}_{ijk})^2 = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\sum_{k=1}^{n_{ij}} (Y_{ijk} - \overline{Y}_{ij.})^2$$

$$\Leftrightarrow \quad SQRE = \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b} (n_{ij} - 1) S_{ij}^2 \ ,$$

sendo $S_{ij}^2$ a variância amostral das observações de $Y$ na célula $(i,j)$.

Num delineamento equilibrado, tem-se $n = n_c ab$, e o Quadrado Médio Residual será a média simples das variâncias amostrais de célula, $S_{ij}^2$:

$$QMRE = \frac{SQRE}{n - ab} = \frac{\cancel{n_c - 1}}{ab(\cancel{n_c - 1})} \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b} S_{ij}^2 = \frac{1}{ab} \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b} S_{ij}^2 \ .$$

# Outras SQs para delineamentos equilibrados

Para delineamentos equilibrados (com $n_c$ observações por célula) é possível obter igualmente fórmulas simples para as Somas de Quadrados associadas aos efeitos principais de cada factor.

Estas fórmulas correspondem (tal como no modelo sem efeitos de interacção) às Somas de Quadrados associadas a cada factor, caso se ajustasse (aos mesmos dados) um modelo ANOVA apenas com esse factor:

$$SQA = bn_c \sum_{i=1}^{a} (\overline{Y}_{i..} - \overline{Y}_{...})^2$$

$$SQB = an_c \sum_{j=1}^{b} (\overline{Y}_{.j.} - \overline{Y}_{...})^2$$

# Um exemplo: Exercício ANOVA 9

## Dietas de leitões

Variável resposta: Coeficiente de Utilização Digestiva para a celulose (CEL).
Factor A: Fibra (a=2 tipos de fibra).
Factor B: Enzima (b=2 níveis – com e sem enzima na dieta).
Nas ab=4 situações experimentais há $n_{ij} = 12$ repetições (delineamento equilibrado).

```
> leitoes.aov <- aov(CEL ~ Fibra*Enzima , data=leitoes)
> summary(leitoes.aov)
             Df Sum Sq Mean Sq F value  Pr(>F)
Fibra         1 0.0239 0.02385   1.450 0.23500
Enzima        1 0.1376 0.13760   8.364 0.00593 **
Fibra:Enzima  1 0.0257 0.02567   1.560 0.21824
Residuals    44 0.7239 0.01645
```

Neste exemplo, apenas a adição de enzima tem efeito significativo sobre o coeficiente de utilização digestiva.

# Exemplo do Exercício 9

## Dietas de leitões

Como $a=b=2$, há apenas um efeito de cada tipo:

$$\vec{\mathbf{Y}} = \mu\vec{\mathbf{1}}_{\mathrm{n}} + \alpha_2\vec{\mathscr{I}}_{A_2} + \beta_2\vec{\mathscr{I}}_{B_2} + (\alpha\beta)_{22}\vec{\mathscr{I}}_{A_2:B_2} + \vec{\boldsymbol{\varepsilon}}$$

É fácil sintetizar as conclusões:

| | | | |
|---|---|---|---|
| Teste I: | $H_0 : \alpha_2 = 0$ | $p\text{-value} = 0.23500 \Rightarrow$ | Não rejeitar $H_0 : \alpha_2 = 0$ |
| Teste II: | $H_0 : \beta_2 = 0$ | $p\text{-value} = 0.00593 \Rightarrow$ | Optar por $H_1 : \beta_2 \neq 0$ |
| Teste III: | $H_0 : (\alpha\beta)_{2,2} = 0$ | $p\text{-value} = 0.21824 \Rightarrow$ | Não rejeitar $H_0 : (\alpha\beta)_{2,2} = 0$ |

| | | Enzima | |
|---|---|---|---|
| | | sem | com |
| Fibra | 1 | $\mu_{11}$ | $\mu_{12} = \mu_{11} + \beta_2$ |
| | 2 | $\mu_{21} = \mu_{11} + \alpha_2$ | $\mu_{22} = \mu_{11} + \alpha_2 + \beta_2 + (\alpha\beta)_{2,2}$ |

# Comparações múltiplas de médias de células

Havendo $ab$ células, a comparação das médias de cada par de células envolve $\binom{ab}{2}$ comparações.

O número potencialmente grande de comparações possíveis entre médias de célula aconselha a utilização de métodos de comparação múltipla, que permitam controlar globalmente o nível de significância do conjunto de testes de hipóteses (ou grau de confiança do conjunto de intervalos de confiança).

O mais utilizado dos métodos de comparação múltipla está associado ao nome de Tukey. Foi já introduzido no estudo de delineamentos a 1 Factor. Adapta-se facilmente à comparação múltipla de médias de células.

# O Teste de Tukey

## Teste de Tukey para médias de células

Admite-se que o delineamento é equilibrado, com $n_c > 1$ repetiçoes em todas as $ab$ células.

Rejeita-se a igualdade das médias das células $(i,j)$ e $(i',j')$, a favor da hipótese $\mu_{ij} \neq \mu_{i'j'}$, se

$$|\overline{Y}_{ij\cdot} - \overline{Y}_{i'j'\cdot}| \quad > \quad q_{\alpha\,(ab,n-ab)} \cdot \sqrt{\frac{QMRE}{n_c}} \ ,$$

sendo $q_{\alpha\,(ab,n-ab)}$ o valor que deixa à direita uma região de probabilidade $\alpha$ numa distribuição de Tukey com parâmetros $k = ab$ (o número total de médias de célula) e $\nu = n - ab$ (os graus de liberdade associados ao $QMRE$).

# Intervalos de Confiança para $\mu_{ij} - \mu_{i'j'}$

## Intervalos de Confiança de Tukey

Com grau de confiança global $(1-\alpha)\times 100\%$, todas as diferenças de médias de pares de células, $\mu_{ij} - \mu_{i'j'}$, estão em intervalos da forma:

$$\left]\ (\overline{y}_{ij\cdot} - \overline{y}_{i'j'\cdot}) - q_{\alpha(ab,n-ab)}\sqrt{\frac{QMRE}{n_c}} \quad , \quad (\overline{y}_{ij\cdot} - \overline{y}_{i'j'\cdot}) + q_{\alpha(ab,n-ab)}\sqrt{\frac{QMRE}{n_c}}\ \right[$$

Conclui-se que $\mu_{ij} \neq \mu_{i'j'}$ se o intervalo correspondente a este par de células não contém o valor zero.

# Tukey no R

A obtenção dos Intervalos de Confiança de Tukey no R, para a diferença da média de células, no caso de um delineamento a dois Factores, é análogo ao caso de um único factor:

```
>TukeyHSD(aov(y ~ fA * fB, data=dados))
```

O R produz também intervalos de confiança para as médias de nível de cada Factor isoladamente.

É possível representar graficamente estes Intervalos de Confiança encaixando o comando anterior na função `plot`.

# Visualização gráfica de efeitos de interacção

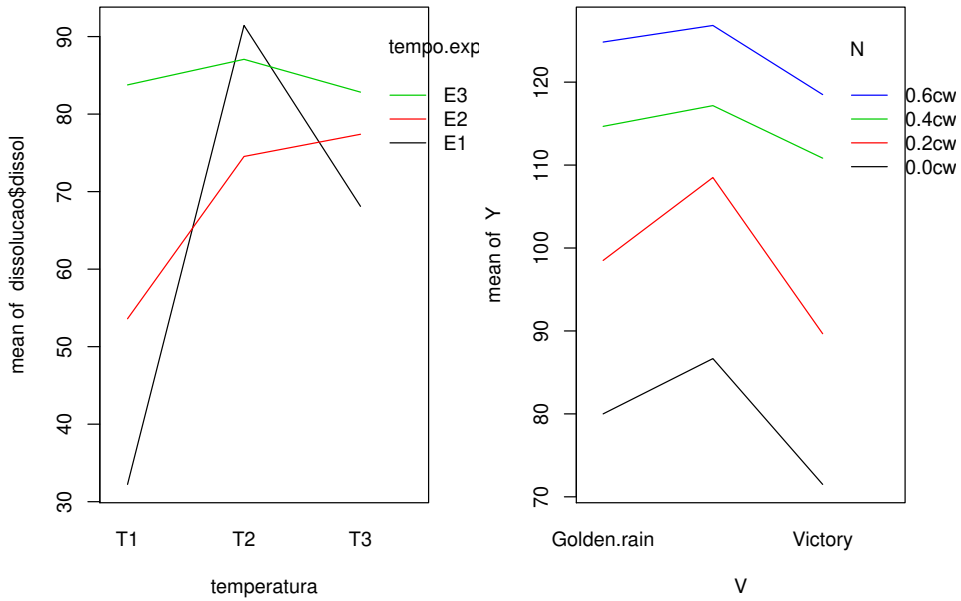
A existência de efeitos de interacção em delineamentos factoriais a dois factores transparece em gráficos onde:

- O eixo horizontal é associado aos níveis de um factor (e.g., *fA*);
- no eixo vertical são indicados os valores médios da variável resposta *Y* em cada célula;
- para cada célula, indica-se um ponto cujas coordenadas são determinadas pelo nível do primeiro factor e respectiva média de célula da variável resposta;
- unem-se com segmentos de recta os pontos correspondentes a um mesmo nível do segundo factor (e.g., *fB*).

A cada problema correspondem sempre dois possíveis gráficos de interacção, pois é arbitrária a escolha de qual o factor associado ao eixo horizontal, e qual o que define os pontos a serem unidos.

# Como ler os gráficos de interacção

Havendo interacção, as linhas estarão longe de qualquer paralelismo (exemplo à esquerda). A inexistência de interacção significativa produz linhas aproximadamente "paralelas" (exemplo à direita).




A confirmação da significância dos efeitos de interacção exige que se efectue o respectivo teste $F$.

# Análise dos Resíduos

A validade dos pressupostos do Modelo relativos aos erros aleatórios pode ser estudada de forma análoga ao que foi visto para um delineamento a 1 Factor.

Os resíduos relativos a uma mesma célula aparecem em $ab$ colunas verticais num gráfico de $E_{ijk}$ vs. $\hat{Y}_{ijk}$.

A hipótese de heterogeneidade de variâncias entre diferentes células pode ser testada recorrendo a testes de hipóteses (como o Teste de Bartlett), mas essa matéria não será leccionada.

# Uma advertência

Na formulação clássica do modelo ANOVA a dois Factores, com interacção, e a partir da equação-base $Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijk}$, em vez de impor as condições $\alpha_1 = \beta_1 = (\alpha\beta)_{i1} = (\alpha\beta)_{1j} = 0$ $(\forall\, i, j)$, admitem-se as restrições:

- $\sum_i \alpha_i = 0$;
- $\sum_j \beta_j = 0$;
- $\sum_i (\alpha\beta)_{ij} = 0\ , \qquad \forall\, j$;
- $\sum_j (\alpha\beta)_{ij} = 0\ , \qquad \forall\, i$.

Estas condições alternativas:

- mudam a forma de interpretar os parâmetros;
- mudam os estimadores dos parâmetros;
- não mudam o resultado dos testes $F$ à existência de efeitos.

# Delineamentos e Unidades experimentais

No delineamento das experiências para posterior análise através duma ANOVA, as $n$ observações da variável resposta correspondem a $n$ diferentes unidades experimentais (indivíduos, parcelas de terreno, locais, etc.).
Princípios gerais a seguir:

## Casualização

A casualização, ou seja aleatoriedade na escolha das unidades experimentais e na associação que lhes é feita de um dado nível do factor. É importante para:

- se poder trabalhar com a Teoria de Probabilidades; e
- se evitar enviesamentos (mesmo inconscientes).

## Repetição

A repetição de observações independentes é necessária para se estimar a variabilidade associada à estimação (erros padrões) e minorar o impacte de observações atípicas.

# Repetições e pseudo-repetições

## Repetições e pseudo-repetições

Há que distinguir repetições e pseudo-repetições.

Por exemplo, num estudo sobre frutos do tomateiro, é diferente:

- seleccionar frutos dum mesmo tomateiro; ou
- seleccionar frutos de tomateiros diferentes.

As características genotípicas, fenotípicas e ambientais, são idênticas para frutos duma mesma planta. Trata-se de pseudo-repetições, que não são repetições independentes.

Pseudo-repetições podem ser úteis: substituindo cada grupo de pseudo-repetições por uma única observação média pode-se diminuir a variabilidade entre diferentes observações independentes, tornando a inferência mais precisa.

# Heterogeneidade nas unidades experimentais

Variabilidade nas unidades experimentais não atribuível aos preditores é associada aos erros aleatórios. Assim, heterogeneidade não controlada nas unidades experimentais contribui para aumentar o valor de *SQRE* e de *QMRE*.

Aumentar *QMRE* significa, nos testes *F*, diminuir o valor calculado da estatística *F*, afastando-a da região crítica. Assim,

## numa ANOVA

heterogeneidade não controlada nas unidades experimentais contribui para esconder a presença de eventuais efeitos do(s) factor(es).

## numa Regressão Linear

heterogeneidade não controlada nas unidades experimentais contribui para piorar a qualidade de ajustamento do modelo, diminuindo o seu Coeficiente de Determinação.

# Controlar a heterogeneidade

Na prática, é impossível tornar as unidades experimentais totalmente homogéneas: a natural variabilidade de plantas, animais, terrenos, localidades geográficas, células, etc. significa que existe variabilidade entre unidades experimentais.

Mesmo que seja possível ter unidades experimentais (quase) homogéneas, isso tem uma consequência indesejável: restringir a validade dos resultados ao tipo de unidades experimentais com as características utilizadas na experiência.

Caso se saiba que existe um factor de variabilidade importante nas unidades experimentais, a melhor forma de controlar os seus efeitos consiste em contemplar a existência desse factor de variabilidade no delineamento e no modelo, de forma a filtrar os seus efeitos.

# Delineamentos factoriais com vários factores

Um delineamento factorial (isto é, com observações para todas as combinações de níveis de cada factor) pode ser definido com qualquer número de factores.

Num delineamento factorial a três factores – A, B e C – cada observação da variável resposta indexa-se com quatro índices: $Y_{ijkl}$ indica a observação $l$ no nível $i$ do Factor A, nível $j$ do Factor B e nível $k$ do Factor C. A equação de base para $Y_{ijkl}$ prevê a existência de sete tipos de efeitos:

- três efeitos principais de cada factor, $\alpha_i$, $\beta_j$ e $\gamma_k$.
- três efeitos de interacção dupla associados a cada combinação de níveis de dois Factores diferentes: $(\alpha\beta)_{ij}$, $(\alpha\gamma)_{ik}$ e $(\beta\gamma)_{jk}$.
- um efeito de tripla interacção para as células onde se cruzam níveis dos três factores: $(\alpha\beta\gamma)_{ijk}$

# O modelo factorial a três factores

A equação de base do modelo é agora:

$$Y_{ijkl} = \mu_{111} + \alpha_i + \beta_j + \gamma_k + (\alpha\beta)_{ij} + (\alpha\gamma)_{ik} + (\beta\gamma)_{jk} + (\alpha\beta\gamma)_{ijk} + \varepsilon_{ijkl} \ .$$

A Soma de Quadrados Total é decomposta em oito parcelas: *SQA*, *SQB*, *SQC*, *SQAB*, *SQAC*, *SQBC*, *SQABC* e *SQRE*, de forma análoga ao visto antes.

Os graus de liberdade associados a cada tipo de efeito generalizam conceitos anteriores.

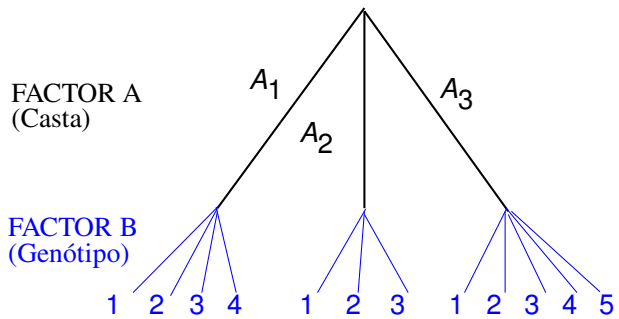
Há sete testes: um para cada tipo de efeitos. As estatísticas desses sete testes são todas do tipo $\frac{QMx}{QMRE}$, onde $x$ designa o tipo de efeitos em questão.

As estatísticas desses testes terão, sob $H_0$, distribuição $F$ com graus de liberdade dados pelos g.l. do numerador e do denominador, respectivamente.

# Outros delineamentos: delineamentos hierarquizados

Há delineamentos a dois factores que não são factoriais porque (por impossibilidade ou por opção) não se combinam todos os níveis de um e outro factor, sendo os níveis dum dos factores dependente dos níveis do outro factor.

Exemplo: Pretende-se saber se o rendimento, em videiras, varia entre castas (Factor A) e, dentro de castas, entre genótipos (Factor B). É impossível combinar cada casta com cada genótipo, sendo cada genótipo específico duma casta. Na representação desta situação substitui-se a grelha dos delineamentos factoriais por um dendrograma:




Um tal delineamento diz-se hierarquizado (*nested*, em inglês).

# Delineamentos hierarquizados (cont.)

Não faz sentido falar em efeitos do nível $j$ do Factor $B$, sem especificar qual o nível do Factor A a que nos referimos, nem falar em efeitos de interacção.

A equação base do modelo inclui efeitos de nível do Factor A e efeitos de nível do factor B (subordinado):

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_{j(i)} + \varepsilon_{ijk} \ .$$

Há dois testes de interesse:

- $H_0 : \alpha_i = 0\,, \quad \forall i=2,\ldots,a$ ; e
- $H_0 : \beta_{j(i)} = 0\,, \quad \forall i=1,\ldots,a$ e $j=2,\ldots,b_i$.

A Soma de Quadrados Total é agora decomposta em 3 parcelas, correspondentes aos dois tipos de efeito e à variabilidade residual.

Somas de quadrados, graus de liberdade e estatísticas dos testes definem-se de forma análoga à de modelos anteriores.

# Outros tipos de delineamentos experimentais

Apenas foi aflorada a teoria dos delineamentos experimentais. Existem numerosos outros delineamentos mais complexos.

Alguns delineamentos visam reduzir o número de situações experimentais que seria necessário estudar (objectivo que também pode motivar um delineamento hierarquizado). Entre estes, refiram-se:

- Os quadrados latinos; ou
- os delineamentos em blocos incompletos.

Outros delineamentos visam ultrapassar dificuldades práticas na execução de uma experiência, como é o caso dos delineamentos em parcelas divididas (*split plots*).

# ANOVAs como comparação de $k$ amostras

Alguns testes $F$ ANOVA generalizam os testes *t-Student* estudados nas disciplinas introdutórias de Estatística, para comparar de médias de duas populações:

- com amostras independentes (admitindo a igualdade de variâncias); e
- com amostras emparelhadas.

Ora,

- Numa ANOVA a 1 Factor com $k = 2$ níveis, a estatística $F$ no teste aos efeitos do factor é o quadrado da estatística $t$ à diferença de médias, no caso de duas amostras independentes.

- Numa ANOVA a dois factores (delineamento factorial) sem interacção em que o Factor B define o emparelhamento das unidades experimentais, e quando $a = 2$, a estatística $F$ do teste aos efeitos do Factor A é o quadrado da estatística $t$ à diferença de médias, no caso de duas amostras emparelhadas.

# Comparações múltiplas alternativas na ANOVA

A comparação múltipla de médias, que abordámos pela teoria de Tukey, tem alternativas.

A alternativa mais conceituada baseia-se na teoria de Scheffé. Tem tendência a produzir intervalos de confiança maiores (ao mesmo nível $(1-\alpha)\times 100\%$ de confiança) do que os intervalos de Tukey.

Quer Tukey, quer Scheffé, podem ser generalizados para obter testes/intervalos de confiança sobre combinações lineares genéricas das médias de nível ou de células. Nesse caso, a teoria de Scheffé tem melhor desempenho.

# Métodos não paramétricos de tipo ANOVA

Nos métodos não paramétricos não se exigem hipóteses tão fortes como os métodos clássicos, (e.g., a hipótese de normalidade). Em contrapartida, têm uma menor capacidade de rejeitar as hipóteses nulas caso elas sejam falsas (i.e., têm menor potência), quando os pressupostos adicionais dos métodos clássicos são válidos.

O teste Kruskal-Wallis é alternativa não paramétrica à ANOVA a 1 Factor.

O teste de Friedman é alternativa não paramétrica à ANOVA a dois factores, sem interacção, quando o segundo factor representa blocos e não há repetições nas células.

Em ambos os casos, as estatísticas de teste são funções das Somas de Quadrados usuais, aplicadas às ordens das observações, em vez de aos valores observados de $Y$.

Os métodos não paramétricos são uma alternativa viável quando há violações graves dos pressupostos dos modelos ANOVA clássicos.

# Efeitos aleatórios em modelos tipo ANOVA

Nos modelos ANOVA, admitiu-se sempre que as parcelas de efeitos nas equações dos modelos eram constantes. Este tipo de modelos dizem-se de efeitos fixos.

Uma outra grande classe de modelos alternativos designam-se modelos de efeitos aleatórios e caracterizam-se por os efeitos serem variáveis aleatórias.

Por exemplo, a equação base de um modelo a um factor com efeitos aleatórios, com $k$ níveis do factor, será

$$Y_{ij} = \mu + \boldsymbol{\alpha}_i + \boldsymbol{\varepsilon}_{ij} ,$$

sendo agora $\boldsymbol{\alpha}_i$ a variável aleatória do efeito do nível $i$ do factor.

Esta opção justifica-se quando os níveis do factor associados aos efeitos foram escolhidos aleatoriamente dum número muito grande, ou mesmo uma infinidade, de possíveis níveis. Esta situação surge com frequência quando os níveis dum factor são terrenos, genótipos ou outras entidades em que não é possível estudar a totalidade dos possíveis níveis do factor.

# Modelos tipo ANOVA com efeitos aleatórios (cont.)

Efeitos de blocos, ou de factores hierarquizados subordinados são, com muita frequência, mais correctamente descritos por efeitos aleatórios.

Não sendo, em rigor, Modelos Lineares, têm pontos de contacto importantes, em particular no caso dum modelo a um único factor.

Um modelo com alguns efeitos fixos e outros efeitos aleatórios diz-se um modelo misto.

As novas variáveis aleatórias na equação dum modelo exigem novos pressupostos.

Os pressupostos usuais em modelos com efeitos aleatórios são que os efeitos aleatórios do tipo $\boldsymbol{\alpha}_i$:

- têm distribuição $\boldsymbol{\alpha}_i \frown \mathscr{N}(0, \sigma^2_\alpha)$; e
- são independentes entre si e independentes dos erros aleatórios.

# Modelos tipo ANOVA com efeitos aleatórios (cont.)

Um teste à existência de efeitos do factor tem hipóteses:

$$H_0 : \sigma_\alpha^2 = 0 \qquad \text{vs.} \qquad H_1 : \sigma_\alpha^2 \neq 0$$

Embora este modelo a um factor não seja um Modelo Linear do mesmo tipo que o modelo de efeitos fixos antes estudado, o teste envolve uma estatística equivalente.

Em geral, com delineamentos mais complexos, testes à existência de efeitos aleatórios envolvem quocientes de Quadrados Médios, com distribuição $F$ sob $H_0$, mas nem sempre as estatísticas dos testes são iguais aos correspondentes casos de efeitos fixos.