Bolaños y Vallejo. 2024. Número de réplicas en un diseño experimental Unifactorial y Multifactorial. Revista Sigma, 20 (2). Páginas 9–15.

REVISTA SIGMA

Departamento de Matemáticas y Estadística

Universidad de Nariño

Volumen XX № 2 (2024), páginas 9–15

Número de réplicas en un diseño experimental Unifactorial y Multifactorial

Edwin Bolaños [1]

Jorge Vallejo [2]

Abstract: Experimental design requires valid results for decision-making and validation. It is supported by the number of experiment replications. However, deliberately executing multiple replications is not feasible, especially due to the cost associated with conducting research. For this reason, determining the necessary number of replications becomes a crucial point in the stages of experimental design. This article presents an indirect method for estimating this number and also highlights the need to implement code to perform this task.

Keywords. Experimental design, number of replicates, experimental error, predictive models, variability.

Resumen: El diseño de experimentos requiere de unos resultados validos para la toma de decisiones y la validación de estos está apoyado por el numero de replicas del experimento; sin embargo, no es factible ejecutar deliberadamente replicas, especialmente por el costo que toma conducir una investigación. Por esta razón, determinar el número de réplicas necesarias se convierte en un punto importante en las etapas del diseño experimental. En este artículo se presenta una manera de estimar este número de manera indirecta y además se menciona la necesidad de implementar un código que realice esta tarea. *Palabras Clave.* Diseño experimental, número de replicas, error experimental, modelos predictivos, variabilidad.

1. Introducción

El diseño de experimentos tiene como objetivo la recolección de datos a través de la realización de pruebas controladas, con el fin de obtener evidencia objetiva que permita responder

[1] Maestría en Estadística Aplicada, Facultad Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Nariño. Correo: edwin.andres.bd@gmail.com

[2] Maestría en Estadística Aplicada, Facultad Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Nariño. Correo: jorge010@udenar.edu.co

preguntas sobre fenómenos específicos. La validez de las conclusiones derivadas de un estudio depende de la calidad y cantidad de los datos obtenidos, lo cual está estrechamente ligado al uso de réplicas experimentales. Estas réplicas, al repetir el experimento bajo condiciones idénticas, son esenciales para asegurar la precisión de los resultados y su capacidad para responder adecuadamente las interrogantes planteadas.

En la investigación experimental, las réplicas juegan un papel crucial, ya que permiten controlar y comprender la variabilidad inherente al fenómeno estudiado. Según Kuehl (2001) [1], "las réplicas son fundamentales para estimar la varianza como error experimental y aplicar la aleatorización, lo que permite obtener una estimación válida de la varianza". Esto resulta clave no solo para mejorar la precisión del análisis estadístico, sino también para respaldar decisiones fundamentadas en los datos obtenidos.

El uso de réplicas implica realizar múltiples ensayos experimentales bajo las mismas condiciones y configuraciones, de manera independiente. Este proceso puede involucrar tanto un solo factor como combinaciones de varios factores y niveles, o incluso diseños experimentales completos. La réplica permite estimar el error experimental, lo cual es crucial para determinar si las diferencias observadas en los datos son estadísticamente significativas.

En este artículo se proponen expresiones matemáticas para estimar el número de réplicas necesarias para rechazar una hipótesis nula mediante un estadístico de prueba. Cabe señalar que este cálculo no se realiza de manera directa. A pesar de la importancia de esta estimación, en la literatura actual se observa una falta de expresiones directas y de herramientas computacionales implementadas para calcular el número óptimo de réplicas. Por tanto, este trabajo también invita a la investigación futura para cubrir dicha necesidad y mejorar los métodos existentes.

2. Número de réplicas

En el desarrollo de un diseño experimental en diversas disciplinas, es esencial estimar la variabilidad asociada al fenómeno de estudio. Como señala Kuehl (2001), "las réplicas desempeñan un papel fundamental como medio para estimar la varianza como error experimental y para aplicar la aleatorización, lo que permite obtener una estimación válida de la varianza"[1]. Este proceso es clave no solo para controlar la variabilidad inherente a los experimentos, sino también para mejorar la precisión en la interpretación de los resultados y facilitar una toma de decisiones más fundamentada.

La replicación se refiere a la ejecución de múltiples corridas experimentales bajo la misma configuración de factores, sometidas a las mismas fuentes de variabilidad, y realizadas de forma independiente. Es importante señalar que la replicación no se limita a un solo factor experimental, sino que puede incluir combinaciones de factores, niveles o incluso diseños experimentales completos. De esta manera, las réplicas permiten obtener una estimación precisa del error experimental, un aspecto crucial para garantizar la validez de los resultados y su capacidad para detectar diferencias significativas entre los tratamientos. [2] A pesar de los beneficios de la replicación, su implementación conlleva un aumento en los costos y recursos necesarios para el experimento. Por tanto, es esencial determinar el número óptimo de réplicas según las necesidades específicas del estudio. Por ejemplo, en diseños de cribado, donde el objetivo principal es identificar los factores más importantes, el número de réplicas puede ser menor [3]. En cambio, en modelos predictivos, aumentar el número de réplicas mejora la precisión del modelo y su capacidad para detectar efectos más sutiles. Además, en casos donde se busque validar datos o mejorar la confiabilidad del modelo, incrementar las réplicas se vuelve una estrategia indispensable.

La replicación es esencial para garantizar la validez de los experimentos, ya que implica la repetición independiente del modelo experimental bajo las mismas condiciones. Este proceso es crucial para diversas finalidades, entre las que destacan las siguientes [1]:

a. **Demostración de reproducibilidad**: La replicación permite verificar que los resultados pueden ser reproducidos bajo las mismas condiciones experimentales, lo que incrementa la confianza en la fiabilidad y consistencia de los hallazgos.

b. **Seguridad contra resultados anormales**: Al realizar réplicas, se reduce el impacto de resultados inesperados o anormales, ayudando a identificar posibles errores experimentales o influencias externas no controladas.

c. **Estimación de la varianza del error experimental**: La replicación proporciona una base sólida para calcular la varianza del error experimental mediante el análisis de las medias obtenidas en múltiples repeticiones, lo que es fundamental para evaluar la precisión de los resultados.

d. **Aumento de la precisión**: El aumento en el número de réplicas también incrementa la precisión en la estimación de las medias de los diferentes tratamientos, lo que permite una interpretación más confiable y robusta de los datos.

Conociendo la definición de réplica y su importancia en el diseño experimental, surge la pregunta clave: ¿cuál es el número adecuado de réplicas para obtener un modelo robusto? Este número depende de varios factores, como señalan Kuehl [1] y Valencia [4]:

a. **Varianza (σ^2)**: A mayor variabilidad en el fenómeno estudiado, mayor será el número de réplicas necesarias para obtener una estimación precisa de los efectos.

b. **Tamaño de la diferencia entre las medias (δ)**: Si se espera una diferencia considerable entre los tratamientos o condiciones experimentales, se requerirán menos réplicas para detectarla con precisión.

c. **Potencia de la prueba ($1-\beta$)**: La potencia estadística se refiere a la probabilidad de detectar una diferencia real entre los grupos cuando esta existe. Un mayor nivel de potencia requerirá un número mayor de réplicas para asegurar la detección de efectos significativos.

d. **Nivel de significancia (α)**: Este valor representa la probabilidad de cometer un error tipo I, es decir, rechazar incorrectamente la hipótesis nula. Un nivel de significancia más estricto influirá en la necesidad de más réplicas para mantener el control sobre este tipo de error.

La estimación del número de réplicas presentada en este trabajo se basa en el uso del estadístico de prueba F_0 , definido como:

$$F_0 = \frac{CMT}{CME},$$

donde CMT es el cuadrado medio de los tratamientos y CME es el cuadrado medio del error. El estadístico F_0 sigue una distribución F con v_1 y v_2 grados de libertad en el numerador y denominador, respectivamente. Si la hipótesis nula es falsa, F_0 seguirá una distribución F desplazada, con los mismos grados de libertad, y un parámetro de desplazamiento λ.

Para estimar el número adecuado de réplicas, es necesario calcular una función del parámetro ϕ, que requiere un valor para la varianza σ^2. Sin embargo, si σ^2 es desconocida, se puede utilizar el cuadrado medio del error (CME) como un estimador insesgado de la varianza. La forma específica de ϕ dependerá del tipo de modelo experimental, ya sea unifactorial o multifactorial.

En resumen, para realizar esta estimación se necesitan los siguientes elementos: los grados de libertad del estadístico v_1 y v_2, el valor de la función del parámetro de desplazamiento ϕ, el nivel de significancia α, y la potencia de la prueba $1-\beta$, que determinará la capacidad de rechazar correctamente la hipótesis nula.

Para obtener la estimación del número de réplicas, se utilizan las curvas de potencia de la prueba F, que son aplicables en el análisis de varianza con efectos fijos. El proceso implica proponer un valor inicial para el número de réplicas r, y verificar si este valor produce la potencia deseada en la curva de potencia. Si no se alcanza la potencia requerida, se ajusta el valor de r hasta lograr la aproximación buscada para $1-\beta$.

Es importante señalar que este método de estimación es indirecto y depende del uso de tablas de potencia, las cuales pueden ser incompletas. Además, las curvas de potencia no siempre reflejan todos los posibles grados de libertad, y la estimación visual desde la curva hasta el eje vertical puede introducir imprecisiones. Por estas razones, surge la necesidad de desarrollar un programa que permita realizar esta estimación de manera más precisa y automatizada. A continuación, se presentan las expresiones correspondientes para el parámetro de desplazamiento y la función asociada a este parámetro.

3. Réplicas en modelos unifactoriales

"Los valores de ϕ se aplican de manera directa a una prueba de diferencias entre las medias de celdas en el arreglo factorial y la hipótesis nula $H_0 : \mu_{11} = \mu_{12} = \ldots = \mu_{ab}$; en este caso, la estructura factorial se ignora y el modelo de medias de celda $y_{ijk} = \mu_{ij} + e_{ijk}$ expresado con la forma del modelo de efectos es $y_{ijk} = \mu + \tau_{ij} + e_{ijk}$ donde τ_{ij}, es el efecto de la ij-ésima combinación de tratamiento en el arreglo factorial. Entonces" [1]:

$$\phi^2 = \frac{r\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\tau_{ij}^2}{ab\sigma^2}$$

"Se usa para estimar el número de réplicas, a parir de gráficas basadas en los valores de la τ_{ij} necesarias para ser significativas. Si se requieren números de réplicas basados en los efectos factoriales, los parámetros no centrados son:" [1]

$$\lambda_a = br\sum_{i=1}^{a}\frac{\alpha_i^2}{\sigma^2}, \qquad \lambda_b = ar\sum_{j=1}^{b}\frac{\beta_j^2}{\sigma^2}, \qquad \text{y} \qquad \lambda_{ab} = r\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{b}\frac{(\alpha\beta)_{ij}^2}{\sigma^2}$$

Respectivamente, para los efectos principales de A y B y su interacción. Entonces ϕ se determina como $\phi = \sqrt{\lambda/(v_1+1)}$ donde v_1 son los grados de libertad para el numerador estadístico F_0.

Para obtener información más detallada sobre este tema, se recomienda consultar la sección 2.14 del libro de Kuehl (2001) [1]

Entre los métodos alternativos para el uso de gráficos basados en los valores τ_{ij} (pruebas de efectos fijos), se encuentran las siguientes aproximaciones: la aproximación de Kenward-Roger, la aproximación de Satterthwaite, los grados de libertad del numerador (GLNum) y el valor p en la prueba de efectos mixtos.

3.1. Aproximación De Kenward-Roger

La aproximación de Kenward-Roger es una herramienta ampliamente utilizada en el análisis de datos, especialmente en la estimación de modelos de efectos mixtos. Estos modelos se aplican cuando los datos presentan correlación o tienen una estructura jerárquica, como en estudios longitudinales o de diseño en bloques. Esta técnica se emplea para ajustar los grados de libertad en las pruebas de hipótesis y para estimar intervalos de confianza de manera más precisa, especialmente en escenarios con muestras pequeñas o modelos complejos.

Al ajustar los grados de libertad y tener en cuenta la covarianza de los datos, la aproximación de Kenward-Roger ofrece estimaciones más precisas de los errores estándar, lo que mejora tanto la validez como la potencia estadística de las pruebas de hipótesis. Asimismo, contribuye a la obtención de intervalos de confianza más ajustados y robustos [5].

Cabe destacar que la aproximación de Kenward-Roger (KR) utiliza procedimientos avanzados para ajustar los grados de libertad, lo que la hace particularmente adecuada para modelos lineales mixtos. Esta técnica, disponible principalmente en el software SAS, suele mostrar un rendimiento óptimo en estos casos. Ejemplos de su aplicación se pueden encontrar en los trabajos de Vallejo et al. [6], Pablo Livacic-Rojas *et al.* [7].

3.2. Aproximación de Satterthwaite

La aproximación de Satterthwaite es una técnica utilizada para calcular los grados de libertad en pruebas de hipótesis cuando se ajustan modelos lineales mixtos. Este método resulta especialmente útil en situaciones donde la estimación exacta de los grados de libertad es complicada debido a la complejidad del modelo o la distribución no estándar de los datos.

El enfoque de Satterthwaite se basa en una fórmula que estima los grados de libertad efectivos al considerar la estructura de covarianza de los datos. Esta estimación permite obtener una medida más precisa de los grados de libertad en comparación con el enfoque tradicional de Pearson, lo que mejora la precisión en las pruebas de hipótesis. La técnica está implementada en el procedimiento PROC MIXED de SAS [5], [8].

En cuanto a la comparación entre los métodos de Satterthwaite y Kenward-Roger para la estimación de los grados de libertad en modelos mixtos, ambos buscan resolver el problema de determinar los grados de libertad relevantes para las pruebas F, en particular para la hipótesis nula relacionada con los efectos aleatorios o de agrupamiento. Estas dos aproximaciones proporcionan formas alternativas de estimar los grados de libertad de la distribución nula en pruebas de modelos mixtos [9].

4. Réplicas en modelos multifactoriales

El número de réplicas está definido en dos situaciones, una para modelos aleatorios y otro para modelos mixtos.

4.1. Modelos aleatorios

Para saber las contribuciones significativas de una componente de la varianza, el número de réplicas requiere un valor de λ constante, donde F_0 tiene una distribución central $F_{v1,v2}$ multiplicada por λ^2. En general se puede denotar como [1]

$$\lambda^2 = \frac{E(CMA)}{E[CM(AB)]} = \frac{\sigma^2 + r\sigma_{ab}^2 + rb\sigma_a^2}{\sigma^2 + r\sigma_{ab}^2} = 1 + \frac{rb\sigma_a^2}{\sigma^2 + r\sigma_{ab}^2}$$

4.2. Modelos mixtos

Para los modelos mixtos estos factores fijos, para el experimento mixto de dos factores requiere [1]

$$\phi^2 = \frac{br\sum_{i=1}^{t}\alpha_i^2}{\alpha(\sigma^2 + r\sigma_{ab}^2)}$$

Para la interpretación de esta ecuación cabe resaltar que hay que acudir a las gráficas. (Ver anexos del libro de Kuehl (2001) [1]).

5. Conclusiones

- Las réplicas son fundamentales en la investigación experimental, ya que proporcionan una validación robusta de los resultados. Su uso permite demostrar la reproducibilidad de los hallazgos y aumenta la confianza en la fiabilidad de los experimentos.
- Establecer el número adecuado de réplicas requiere equilibrar la precisión estadística deseada con el costo asociado. Es esencial considerar la variabilidad del fenómeno estudiado, la potencia de la prueba y el nivel de significancia para optimizar el diseño experimental y tomar decisiones informadas.
- Actualmente, no existe una fórmula directa para calcular el número de réplicas. En su lugar, se deben realizar estimaciones basadas en diversos factores y aproximaciones.
- Las aproximaciones de Kenward-Roger y Satterthwaite son técnicas valiosas para ajustar los grados de libertad en pruebas de hipótesis en modelos mixtos. Ambas aproximaciones consideran la covarianza de los datos, proporcionando estimaciones más precisas que mejoran la validez y la interpretación de los resultados.
- Tanto la aproximación de Kenward-Roger como la de Satterthwaite contribuyen a una mayor precisión y validez en las pruebas de hipótesis. Al ofrecer estimaciones más exactas de los grados de libertad, estas técnicas facilitan una interpretación más confiable de los resultados y una toma de decisiones más fundamentada en la investigación científica.

Referencias

[1] R. O. Kuehl, "Diseño de Experimentos, Principios Estadísticos de Diseño y Análisis de Investigación." Accessed: Feb. 11, 2024. [Online]. Available: https://www.researchgate.net/

publication/44361102_Diseno_de_Experimentos_Principios_Estadisticos_de_Diseno_y_Analisis_de_Investigacion

[2] Minitab, "Réplicas y repeticiones en experimentos diseñados." Accessed: Feb. 14, 2024. [Online]. Available: https://support.minitab.com/es-mx/minitab/21/help-and-how-to/statistical-modeling/doe/supporting-topics/basics/replicates-and-repeats-in-designed-experiments/

[3] J. C. Salazar and A. B. Zapata, "ANÁLISIS Y DISEÑO DE EXPERIMENTOS APLICADOS A ESTUDIOS DE SIMULACIÓN ANALYSIS AND DESIGN OF EXPERIMENTS APPLIED TO SIMULATION STUDIES," Año, vol. 76, pp. 249–257, 2009.

[4] G. Valencia, "CALCULO DEL NUMERO DE REPLICAS." Accessed: Feb. 11, 2024. [Online]. Available: https://www.academia.edu/35151431/CALCULO_DEL_NUMERO_DE_REPLICAS

[5] D. M. Arango Botero, "Impacto de especificar incorrectamente la distribución de los efectos aleatorios en los modelos lineales generalizados mixtos: caso Poisson y Binomial Negativa," 2016.

[6] G. Vallejo, M. P. Fernández, E. Tuero, and P. E. Livacic-Rojas, "Análisis de medidas repetidas usando métodos de remuestreo," *anales de psicología*, vol. 26, pp. 400–409, 2010.

[7] P. Livacic-Rojas, G. Vallejo, and P. Fernández, "Comparación de la potencia de nuevos enfoques para analizar datos de medidas repetidas," *Psicothema*, vol. 19, pp. 673–678, 2007, Accessed: Feb. 15, 2024. [Online]. Available: www.psicothema.com

[8] B. M. Bolker et al., "Generalized linear mixed models: a practical guide for ecology and evolution," *Trends Ecol Evol*, vol. 24, no. 3, pp. 127–135, Mar. 2009, doi: 10.1016/J.TREE.2008.10.008.

[9] F. Alvarez, "Recomendaciones y herramientas para el uso de modelos lineales con efectos mixtos," 2019.