



Centro de Investigación en Matemáticas, A.C.

CIMAT

Análisis Estadístico de Fatiga Bajo Cargas Aleatorias

T E S I S

Que para obtener el grado de

**Maestro en Ciencias con Especialidad
en Probabilidad y Estadística**

P r e s e n t a

Boryana Cristina López Kolkovska

Dr. Enrique Villa Diharce

Director de Tesis

Guanajuato, Gto.. Agosto de 2010

Agradecimientos

Agradezco al Dr. Enrique Raúl Villa Diharce por su dirección y apoyo, sin los cuales no hubiese sido posible la realización de este trabajo. También deseo agradecer al Dr. Jorge Domínguez Domínguez y al Dr. Román de la Vara Salazar por sus revisiones del trabajo y sus valiosas observaciones, las cuales contribuyeron al mejoramiento de esta tesis.

Agradezco al CONACyT por haberme apoyado a lo largo de mis estudios de maestría, así como al Centro de Investigación en Matemáticas, A.C., por permitirme el uso de sus instalaciones, servicio de biblioteca y seminarios. Deseo agradecer especialmente a mis profesores de la maestría por su tiempo y dedicación, los cuales fueron cruciales para mi desarrollo y crecimiento académico y personal a lo largo de mis estudios.

Finalmente, deseo agradecer a mis padres por su apoyo y comprensión constante, a mis compañeros de la maestría por su ánimo, amabilidad e ímpetu a lo largo de nuestros estudios. De forma particular, deseo agradecer a Lina Vargas, Leticia Escobar, Selomit Ramírez, Diego Rivera y a Mario Santana por sus enseñanzas, retos y ánimos a lo largo de la maestría.

ÍNDICE GENERAL

1. INTRODUCCIÓN	1
2. INTRODUCCIÓN A LA OBTENCIÓN DE DATOS DE PROBETAS	3
2.1. Antecedentes y modelos posibles	3
2.2. Metodología experimental	5
3. MARCO TEÓRICO	8
3.1. Modelos lineales de efectos mixtos	8
3.1.1. Modelos de un solo nivel	8
3.1.2. La función de verosimilitud para modelos LME de un nivel	9
3.2. Modelos no lineales de efectos mixtos	10
3.2.1. Modelos de agrupamientos de un solo nivel	12
3.2.2. Estimación por máxima verosimilitud	13
3.2.3. Métodos computacionales	16
3.3. Degradación convexa (La fórmula de París)	18
3.4. Pruebas de hipótesis	20
3.4.1. Pruebas de hipótesis de normalidad multivariada	21
3.4.2. Prueba de hipótesis para igualdad de medias	22
3.4.3. Pruebas de hipótesis para homocedasticidad	23
4. MODELACIÓN DEL PROBLEMA DE CRECIMIENTO DE GRIETAS	
EN PROBETAS	25
4.1. Aplicación del modelo NLME a las bases de datos	26
4.2. Grupo de datos A-H25	27
4.3. Análisis y comparación de las cuatro muestras	36
5. CONCLUSIONES	43
6. APÉNDICE	46
6.1. Apéndice A: descomposiciones ortogonales-triangulares	46
6.2. Apéndice B: Evaluación de la función de verosimilitud mediante descomposiciones matriciales	47
7. REFERENCIAS	48

CAPÍTULO 1

INTRODUCCIÓN

Las fallas mecánicas han causado muchas lesiones y muchas pérdidas financieras a lo largo del tiempo, y es natural que se haya dedicado mucho trabajo de investigación con el propósito de modelar los fenómenos que llevan a dichas fallas. Estos deterioros involucran una interacción muy compleja entre la carga, el tiempo y el ambiente, dando lugar a una gran cantidad de modelos que intentan ligar estos fenómenos entre sí para inferir acerca de los crecimientos de pequeñas grietas en los materiales, que ocasionan eventualmente la falla de la pieza.

En este trabajo se estudian los deterioros de varios experimentos en probetas que fueron puestas a prueba mediante cargas variables, que en este caso, son pesos medidos en Newtons. A cada uno de estos grupos de datos se les aplicaron procesos de cargas aleatorios con distintas intensidades, a saber, de dos tipos: intensidades altas e intensidades bajas. Las cargas fueron creadas computacionalmente por medio de procesos gaussianos con una misma media y dos varianzas distintas, y es de nuestro interés el hacer uso de modelos y herramientas estadísticas para analizar dichos datos, determinar los parámetros involucrados en los modelos propuestos, y finalmente hacer comparaciones entre los cuatro grupos de datos usados. Todo esto es con el fin de determinar si la diferencia de intensidades y regularidades de carga aplicadas a las probetas influyen significativamente al aumento de las grietas que conllevan a la falla de la pieza. En este caso, consideraremos que la falla sucede cuando la grieta en una probeta llega a una longitud determinada.

En el siguiente trabajo se presentarán 5 secciones para lograr los objetivos mencionados. En la primera sección, La introducción a la obtención de datos de probetas, se plantean los métodos computacionales e ingenieriles que fueron empleados para registrar los datos correspondientes a los crecimientos de fracturas en las probetas. Así mismo, también se discuten algunos de los modelos propuestos por la estudiante de doctorado María Belén Moreno Morales, autora del experimento y obtención de los datos a tratar, quien realizó una labor extensa y precisa en la realización de los experimentos, siendo el objetivo de su tesis el lograr una gran precisión en el registro de los crecimientos de grietas.

La siguiente sección presentada es la correspondiente al Marco Teórico, donde se introduce al lector a los modelos no lineales de efectos mixtos y a la función de degradación de París; siendo sendas herramientas de gran relevancia para los modelos de fatiga como el que se trata aquí por razones tanto históricas como estadísticas. En esta sección se introducirá al lector inicialmente en los modelos lineales de efectos mixtos con el propósito de esclarecer con mayor facilidad los

modelos no lineales de efectos mixtos, que por naturaleza, están muy ligados entre sí. En segunda instancia, se introducirá al lector a pruebas de hipótesis de normalidad, homogeneidad de medias y homocedasticidad, todo esto para auxiliarnos durante la comparación de las distintas poblaciones de probetas consideradas.

La tercera sección a presentar, La modelación de crecimientos de grietas de probetas, consta de una breve explicación de las clases de grupos de datos a tratar, de un ejemplo concreto y más detallado a cerca de la obtención de resultados del grupo de datos A-H25 bajo los modelos no lineales de efectos mixtos (*nlme*, por sus siglas en inglés), para luego presentar los resultados de los cuatro grupos de datos conjuntamente. Luego de observar las estimaciones correspondientes, se pretende realizar las comparaciones pertinentes entre sus parámetros para determinar la relación de los grupos entre sí.

Finalmente se presentan las Conclusiones, donde se discuten los resultados obtenidos en la sección anterior y se contrastan los análisis entre los cuatro grupos de probetas, para así inferir si las aplicaciones de cuatro tipos de cargas es significativamente relevante para el crecimiento de las grietas en las piezas consideradas. Cabe mencionar que una breve sección de Apéndice fue agregada para complementar algunas sutilezas matemáticas utilizadas en la sección del Marco Teórico.

CAPÍTULO 2

INTRODUCCIÓN A LA OBTENCIÓN DE DATOS DE PROBETAS

2.1. Antecedentes y modelos posibles

El término fatiga se define en ingeniería como el fenómeno de rotura en un material debido a la acción repetida de tensiones o deformaciones por debajo de su límite de rotura. El proceso tiene lugar con la formación y crecimiento de grietas que progresan a través del material hasta producir el fallo de un componente, y el fenómeno puede producirse de diferentes formas debido a fluctuaciones de la carga a la que está sometido el componente.

Históricamente, el desarrollo de los métodos de análisis de fatiga ha sido promovido por dos razones diferentes. Por un lado la necesidad de proporcionar al ingeniero un método práctico de diseño, y por otro, la búsqueda de un mejor conocimiento del propio fenómeno. De las observaciones físicas, en el proceso de daño que se produce en el material, pueden distinguirse tres etapas: a) iniciación o nucleación de grieta, b) crecimiento estable y c) inestabilidad estructural o fallo catastrófico. La etapa de iniciación corresponde al crecimiento y coalescencia de microgrietas para formar grietas dominantes que, eventualmente, tras el crecimiento, pueden conducir al fallo catastrófico del componente.

La vida total de un componente por fatiga se define como la suma del número de ciclos necesarios para iniciar la grieta y el necesario para propagarla de forma estable hasta un tamaño final. Sin embargo, en nuestro caso, definiremos por razones prácticas al tiempo de vida de un componente sólo como la cantidad de ciclos necesarios para propagar una fractura inicial de forma estable hasta un tamaño determinado, pues sólo poseemos la información del agrietamiento una vez que una pequeña incisión había sido producida.

En el cálculo del tiempo de vida por fatiga durante la etapa de propagación de la grieta suele hacerse uso de los principios de la mecánica de fractura. Para que dichos principios sean aplicables, se requiere un tamaño inicial de grieta conocido, de ahí que en componentes libres de defectos sólo sean aplicables para el cálculo de la etapa de propagación. Sin embargo, en componentes reales en los que existen imperfecciones o defectos previos (como la presencia de poros en las soldaduras, defectos de fundición, inclusiones, etc.) sí puede ser asumido un tamaño inicial de grieta.

La velocidad de crecimiento de grietas sometidas a cargas cíclicas de amplitud constante se expresa en incrementos de longitud de grieta por ciclo, da/dN , y la modelación de dicha relación es nuestro primer objeto de interés, de forma que a continuación se muestran algunos de los modelos expuestos y propuestos en la tesis de doctorado de la alumna María Belén Moreno Morales. Hasta la década de los 60 muchos estudios experimentales condujeron a leyes de caracterización de la velocidad de crecimiento basadas en la longitud de grieta o en el rango de tensiones aplicadas $\Delta\sigma$:

$$\frac{da}{dN} = C \times a \quad \text{ó} \quad \frac{da}{dN} = C(\Delta\sigma)^m a^n,$$

donde C , m y n son constantes determinadas experimentalmente.

Páris sugirió en 1969 que para variaciones cíclicas del campo de tensiones aplicado, la caracterización de la velocidad de crecimiento de grieta podría basarse en el rango del factor de intensidad de tensiones calculado en base a

$$\Delta K = K_{\text{máx}} - K_{\text{mín}},$$

donde $K_{\text{máx}}$ y $K_{\text{mín}}$ son los valores máximo y mínimo respectivamente del factor de intensidad de tensiones (o también llamada intensidad de carga) durante un ciclo de tensión, que dependen de la geometría de la probeta y la longitud de grieta. Páris mostró que la velocidad de crecimiento podía relacionarse con ΔK a través de la siguiente ley:

$$\frac{da}{dN} = C(\Delta K)^m,$$

donde C y m son constantes.

Existen en la literatura numerosos modelos empíricos y semi-empíricos más complejos que la ley de Páris, tratando de incorporar el comportamiento de la grieta en el momento de la propagación de la misma y cuando los valores de ΔK son muy altos. De las muchas expresiones propuestas para tener en cuenta el efecto de las tensiones medias, puede citarse la debida a Walker (1970):

$$\frac{da}{dN} = C \left(\frac{\Delta K}{(1-R)^{1-m}} \right)^n,$$

donde

$$R = \frac{K_{\text{mín}}}{K_{\text{máx}}}.$$

La ecuación de Forman (1967) es una expresión que tiene en cuenta además del efecto de las tensiones medias, el efecto asintótico de la curva para valores de ΔK próximos a K_c , donde K_c es cierto valor crítico de K . Dicha expresión es

$$\frac{da}{dN} = \frac{C(\Delta K)^n}{(1-R)\Delta K_c - \Delta K}.$$

Para tener en cuenta el comportamiento en la región próxima al umbral de las cargas, ΔK_{th} , Donahue et al. plantearon en 1972 la siguiente expresión:

$$\frac{da}{dN} = \frac{A}{E\sigma_s}(\Delta K^2 - \Delta K_{th}^2),$$

donde E y σ_s son respectivamente el módulo de Young y el límite elástico del metal, A es una constante. B. Smith obtuvo una expresión similar ajustando los resultados de ensayos de soldadura bajo cierto ángulo de soldado:

$$\frac{da}{dN} = C(\Delta K - \Delta K_{th})^m.$$

Un ejemplo que combina las ideas anteriores es

$$\frac{da}{dN} = C \frac{(\Delta K - \Delta K_{th})^m}{(1 - R)K_c - K_{\text{máx}}},$$

esta expresión representa una modificación a la ecuación de Forman, teniendo en cuenta la expresión de Smith (1983).

2.2. Metodología experimental

Todos los ensayos fueron realizados en un laboratorio del área de Ciencia de Materiales e Ingeniería Metalúrgica de la Escuela Superior de Ingenieros Industriales de la Universidad de Málaga. El material de ensayo seleccionado es la aleación de aluminio 2024-T351, cuya composición está constituida por: silicio, hierro, cobre, magnesio, manganeso, cromo, zinc y titanio. El cobre es el principal elemento de la aleación junto con el magnesio. Estas aleaciones se tratan térmicamente para conseguir un aumento del límite elástico, su efecto sobre la tensión de rotura no es muy grande. Están particularmente indicadas para estructuras que requieren altas relaciones resistencia/peso, y comúnmente se usan en ruedas y suspensión de camiones y aviones, fuselajes y alas de aviones y componentes estructurales que requieren una buena resistencia a temperaturas superiores a $150^\circ C$.

Las probetas empleadas son de dimensiones: ancho $W = 50mm$ y espesor $B = 12mm$, y todas ellas fueron obtenidas de una misma chapa. La longitud de grieta en este tipo de probetas corresponde a la distancia al eje que une el centro de los taladros. Para cada probeta la longitud de la entalla a_0 ha sido medida haciendo uso de un proyector de perfiles con una precisión de $0,001mm$.

Los registros de carga empleados para llevar a cabo los ensayos representan cuatro procesos aleatorios distintos caracterizados por diferentes formas de la función de densidad espectral de las cargas nominales, S . Dichas funciones de densidad espectral corresponden a procesos aleatorios gaussianos, uni o bimodales, de media cero.

Para cada tipo de espectro se generan numéricamente por simulación distintas historias o registros aleatorios. La simulación se realizó mediante superposición de funciones senoidales de frecuencia y fase aleatoria con distribución aleatoria. Todas las funciones de densidad espectral así definidas representan procesos de carga de valor medio cero y cuya componente variable vendrá definida por su varianza, es decir, por el momento de orden cero de dicha función de densidad espectral

$$\sigma^2 = M_0 = \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega) d\omega.$$

Todos los procesos empleados en este estudio se han seleccionado de forma que todos tengan la misma componente de carga variable, definida ésta como la varianza o momento de orden cero de valor 35, para valores de carga expresados en Kg.

Para poder considerar distintos niveles de carga, los registros así obtenidos se multiplican por un factor de amplificación, de manera que todos los registros de un mismo proceso y nivel de carga tienen idéntica desviación estándar y carga media cero. Los niveles de carga seleccionados corresponden a una desviación estándar de las cargas nominales $\sigma_c = 638N$ para el denominado nivel bajo de carga o nivel *L*, y $\sigma_c = 1078N$ para el denominado nivel alto de carga o nivel *H*.

Con el fin de evitar las cargas de compresión, los registros son desplazados sumando un determinado valor medio. El nivel de carga establecido para todos los procesos considerados es de $\mu_c = 4851N$. De esta forma, los procesos quedan definidos por el valor medio de carga y el nivel y forma de la función de densidad espectral por el de su componente de carga variable.

El ancho de banda de los procesos de carga puede caracterizarse en función del factor de irregularidad ε , definido como

$$\varepsilon = \frac{M_2}{\sqrt{M_0 M_4}},$$

representando M_n el momento de orden n : $M_n = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^n S(\omega) d\omega$. El parámetro ε indicativo de la irregularidad de la carga varía desde 0 hasta 1 con valores tanto más cercanos a la unidad cuanto más estrecha sea la banda de frecuencias. Esto es,

$$\varepsilon = \frac{\text{Número de picos del proceso}}{\text{Número de cruces por la media del proceso}},$$

de forma que, para ε cercano a 1, se considera que el proceso es más regular, y para ε cercano a 0, que dicho proceso es más irregular.

Para identificar los procesos se usará la denominación *A*, *B*, *C* y *D*, según lo indicado en la tabla siguiente, y se distinguirán los niveles alto y bajo de cargas añadiendo respectivamente las letras *H* y *L*, donde los registros de carga así generados tienen una longitud finita y se han empleado registros de 5000, 25000 y

100000 ciclos.

Denominación de los registros	Tipo de proceso	Ancho de banda (ε)	Valor medio de carga (μ_c)	Nivel de carga (σ_c)	Longitud (ciclos)	No. de registros
C-H25	C	0,77	4851 N	1078 N	5000	30
A-H25	A	0,64				
B-H25	B	0,70	4851 N	1078 N	25000	20
C-H25	C	0,77				
D-H25	D	0,85				
A-L25	A	0,64				
C-L25	C	0,77	4851 N	638 N	25000	20
D-L25	D	0,85				
C-H100	C	0,77	4851 N	1078 N	100000	20

Con el fin de obtener un registro continuo del crecimiento de la grieta con el número de ciclos, se opta por hacer uso de un sistema de medida basado en la técnica de caída de potencial. Las técnicas de caída de potencial se basan en medir la caída de tensión sufrida en una probeta de un material conductor por el que se hace pasar una corriente eléctrica que puede ser continua o alterna. La resistencia eléctrica de la probeta se verá alterada por la presencia de grietas en el material, y el tamaño de éstas puede medirse indirectamente a partir de la variación en la caída de potencial entre el componente sin defecto y el componente agrietado.

Luego de la preparación de las probetas, del proceso de precreamiento de la grieta inicial de $15mm$ y el proceso de crecimiento de grieta, alcanzada la longitud final de la grieta el proceso se detiene automáticamente, a una longitud de $26mm$.

CAPÍTULO 3

MARCO TEÓRICO

Para problemas de fatiga se usan frecuentemente diversas herramientas como modelos de efectos mixtos, que pueden ser lineales o no lineales dependiendo del contexto del problema. Estos modelos a su vez requieren de identificar una función que describa las trayectorias de crecimiento de grietas, y computacionalmente también existen métodos para aplicar dichos modelos a los juegos de datos que se posean; un ejemplo de dichos métodos computacionales será el comando *nlme* del lenguaje de programación R, que se mencionará más adelante.

3.1. Modelos lineales de efectos mixtos

3.1.1. Modelos de un solo nivel

Para un solo nivel de agrupamiento, los modelos lineales de efectos mixtos (LME, por sus nombre en inglés, Linear Mixed Effects models) expresan el vector n_i -dimensional de respuesta y_i para el i -ésimo grupo como

$$\begin{aligned} y_i &= X_i\beta + Z_ib_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, M, \\ b_i &\sim N(0, \Sigma), \quad \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2 I), \end{aligned} \tag{3.1}$$

donde β es el vector p -dimensional de efectos fijos, b_i es el vector q -dimensional de efectos aleatorios, X_i (de tamaño $n_i \times p$) y Z_i (de tamaño $n_i \times q$) son matrices de regresión conocidas de los efectos fijos y los efectos aleatorios respectivamente, y ε_i es el error grupal n_i -dimensional con distribución Gaussiana esférica. La suposición de que $Var(\varepsilon_i) = \sigma^2 I$ puede relajarse. Suponemos además que los errores grupales ε_i y los efectos aleatorios b_i son independientes para diferentes grupos y son independientes del otro en cada grupo.

Dado que se supone que la distribución de los vectores de efectos aleatorios b_i es normal con media 0, ésta está completamente caracterizada por su matriz de varianzas y covarianzas Σ , donde dicha matriz debe ser simétrica y positivo definida, y podemos suponer esta restricción porque un modelo indefinido siempre puede reexpresarse como un modelo positivo definido de menor dimensión.

Los efectos aleatorios b_i se suponen con media 0 y por lo tanto toda media distinta de 0 para un término en los efectos aleatorios debe expresarse como parte

de los términos de efectos fijos. De aquí tenemos que las columnas de Z_i son usualmente subconjuntos de las columnas de X_i .

Cuando se trabaja con este modelo es conveniente expresar la matriz de varianzas-covarianzas en la forma de un *factor de precisión relativa*, Δ , la cual es cualquier matriz que satisfaga

$$\frac{\Sigma^{-1}}{1/\sigma^2} = \Delta^T \Delta.$$

Si Σ es positiva definida, tal Δ existirá, pero no será necesariamente única. La matriz Δ se llama *factor de precisión relativa* porque factoriza la matriz de precisión Σ^{-1} , de los efectos aleatorios, expresada con respecto a la precisión, $1/\sigma^2$, de los errores ε_i .

3.1.2. La función de verosimilitud para modelos LME de un nivel

Considerando el modelo (3.1), usamos θ para representar un conjunto de parámetros no restringido que determinan a Δ . La función de verosimilitud para el modelo es de la forma

$$L(\beta, \theta, \sigma^2 | y) = p(y | \beta, \theta, \sigma^2),$$

donde L es la verosimilitud, p es la función de densidad de probabilidad de y , y y es el vector de respuesta completo N -dimensional, con $N = \sum_{i=1}^M n_i$.

Como los efectos aleatorios no observables b_i , $i = 1, \dots, M$ son parte del modelo, debemos integrar la densidad condicional de los datos dados los efectos aleatorios, ésto con respecto a la densidad marginal de los efectos aleatorios, para así obtener la densidad marginal para los datos. Podemos usar la independencia entre b_i y ε_i para expresar esto como

$$L(\beta, \theta, \sigma^2 | y) = \prod_{i=1}^M p(y | \beta, \theta, \sigma^2) = \prod_{i=1}^M \int p(y | b_i, \theta, \sigma^2) p(b_i | \theta, \sigma^2) db_i, \quad (3.2)$$

donde la densidad condicional de y_i es normal multivariada:

$$p(y_i | b_i, \beta, \sigma^2) = \frac{\exp(-\|y_i - X_i\beta - Z_i b_i\|^2 / 2\sigma^2)}{(2\pi\sigma^2)^{n_i/2}} \quad (3.3)$$

y la densidad marginal de b_i también es normal multivariada:

$$p(b_i | \theta, \sigma^2) = \frac{\exp(-b_i^T \Psi^{-1} b_i)}{(2\pi)^{q/2} \sqrt{|\Psi|}} = \frac{\exp(-\|\Delta b_i\|^2 / 2\sigma^2)}{(2\pi\sigma^2)^{q/2} \text{abs}|\Delta|^{-1}}, \quad (3.4)$$

Aquí $|A|$ denota el determinante de la matriz A . Sustituyendo (3.3) y (3.4) en (3.2) podemos reescribir la verosimilitud como

$$L(\beta, \theta, \sigma^2 | y) = \prod_{i=1}^M \frac{abs|\Delta|}{(2\pi\sigma^2)^{n_i/2}} \int \frac{\exp\left(-\left\|\tilde{y}_i - \tilde{X}_i\beta - \tilde{Z}_i b_i\right\|^2 / 2\sigma^2\right)}{(2\pi\sigma^2)^{q/2}} db_i,$$

donde

$$\tilde{y}_i = \begin{bmatrix} y_i \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{X}_i = \begin{bmatrix} X_i \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{Z}_i = \begin{bmatrix} Z_i \\ \Delta \end{bmatrix},$$

son vectores de datos aumentados y matrices del modelo. Este método de cambiar la contribución de la distribución marginal de los efectos aleatorios en renglones adicionales para la respuesta y las matrices de diseño, se le llama el método de *pseudo-datos*, porque crea el efecto de la distribución marginal al agregar "pseudo."observaciones.

3.2. Modelos no lineales de efectos mixtos

Los modelos de efectos mixtos pueden considerarse como un compromiso entre un solo modelo que ignora los diferentes grupos de datos, y un modelo que provee ajustes separados para cada uno de los grupos. Probablemente la desventaja más importante del primer tipo de modelo es que nos impide comprender la estructura verdadera del conjunto de datos y de considerar las propias fuentes de variación que nos son de interés, pero por otra parte, considerar únicamente el segundo tipo de modelos no toma en cuenta las similitudes entre las curvas individuales. El segundo tipo de modelos es adecuado cuando uno está interesado en modelar el comportamiento de un conjunto fijo y específico de individuos; pero no es adecuado cuando los individuos bajo observación deben ser tratados como una muestra de una población de individuos similares, lo cual constituye la mayoría de las aplicaciones relacionadas a los grupos de datos. En nuestro caso, el interés está en estimar el comportamiento promedio de un individuo en una población y la variabilidad entre y dentro de los individuos; para lo cual los modelos de efectos mixtos están precisamente diseñados a hacer.

Los modelos de efectos mixtos se usan primordialmente para describir las relaciones entre una variable respuesta y algunas covariables en los datos que están agrupados según uno o más factores de clasificación. Algunos ejemplos de tales datos agrupados incluyen: datos longitudinales, datos de medidas repetidas, datos de varios niveles y diseños de bloques. Al asociar efectos aleatorios comunes a las observaciones que comparten el mismo nivel de factor de clasificación, los modelos de efectos mixtos flexiblemente representan la estructura de covarianza inducido por el agrupamiento de los datos.

Cuando una persona elige un modelo de regresión para describir cómo una variable respuesta varía con respecto a las covariables, uno usualmente tiene la opción de usar modelos, tales como los polinomiales, cuyos parámetros son lineales. Al incrementar el orden del modelo polinomial, obtenemos una aproximación cada vez más exacta de la función de regresión, que usualmente es no lineal.

Los modelos no lineales de efectos mixtos (NLME) son modelos de efectos mixtos en los cuales algunos, o todos, de los efectos fijos y aleatorios suceden no-linealmente en la función del modelo. Pueden verse como una extensión de los modelos lineales de efectos mixtos, en los cuales se permite ahora que la esperanza condicional de la respuesta dados los efectos aleatorios sea una función no lineal de los coeficientes. También puede verse como una extensión de los modelos no lineales de regresión para datos independientes, en donde los efectos aleatorios se incorporan en los coeficientes para permitirles el variar por grupo, y por lo tanto inducir la correlación entre grupos.

Existen muchas similitudes entre los modelos lineales y no lineales de efectos mixtos: ambos modelos se usan en datos agrupados y sirven el mismo propósito: el describir una variable respuesta como una función de covariables, tomando en cuenta la correlación entre las observaciones en el mismo grupo. Los efectos aleatorios se usan para representar la dependencia de los datos de un mismo grupo tanto en modelos lineales como no lineales de efectos mixtos.

La misma estrategia de construcción para el modelo se usa tanto para modelos lineales como no lineales de efectos mixtos: cuando sea plausible, comenzamos por obtener ajustes separados de un modelo para cada grupo, luego, se examinan estos ajustes individuales para ver cuáles coeficientes parecen ser comunes a todos los grupos y en cuáles los coeficientes parecen variar entre grupos. Después procedemos a ajustar un modelo general de efectos mixtos a los datos, usando términos de efectos aleatorios si parecen garantizados. Luego se realizan gráficas de diagnóstico para asegurar las suposiciones del modelo y decidir sobre los refinamientos del modelo inicial.

Por otra parte, los modelos no lineales están basados en modelos para el mecanismo que produce la respuesta; como consecuencia, los parámetros de un modelo no lineal generalmente tienen una interpretación física natural. Una ventaja adicional al usar esta clase de modelos es que incorporan características teóricas conocidas de los datos, tales como asíntotas y monotonidad, además de que usualmente utilizan menos parámetros que su modelo lineal competidor. Además, los modelos no-lineales proporcionan predicciones más confiables para la variable respuesta fuera del rango observado de los datos.

Los modelos no lineales de efectos mixtos extienden los modelos lineales de efectos mixtos al permitir que la función de regresión dependa no-linealmente en efectos fijos y aleatorios. Sin embargo, la mayor flexibilidad de los modelos no lineales de efectos mixtos no viene sin un costo. Dado que se permite trabajar con los efectos aleatorios de manera no lineal, la función de verosimilitud marginal,

obtenida al integrar la densidad conjunta de la respuesta y los efectos aleatorios, con respecto a estos últimos, la expresión no tiene una forma cerrada, como sucede con los modelos lineales de efectos mixtos. Como consecuencia, la función de verosimilitud aproximada debe usarse para la estimación de los parámetros, llevando a algoritmos de estimación computacionalmente más intensivos y a resultados de inferencia menos confiables.

Una diferencia sustancial entre los modelos lineales y no lineales de efectos mixtos, es que éstos últimos requieren valores estimados de comienzo para los coeficientes de efectos fijos. Se considera que el determinar estimadores de valores iniciales razonables para los parámetros de un modelo no lineal es de cierta forma un arte, aunque existen disponibles algunas recomendaciones generales al respecto. En muchas aplicaciones, se utiliza el mismo modelo no lineal varias veces a grupos de datos similares.

3.2.1. Modelos de agrupamientos de un solo nivel

Las aplicaciones más comunes para los modelos no lineales de efectos mixtos son en datos con medidas repetidas, en particular, datos longitudinales. El modelo de efectos mixtos no lineal para medidas repetidas propuesto por Lindstrom y Bates (1990) puede pensarse como un modelo gerárquico. En un nivel de la j -ésima observación del i -ésimo grupo, se modela como

$$y_{ij} = f(\phi_{ij}, v_{ij}) + \varepsilon_{ij}, \quad i = 1, \dots, M, \quad j = 1, \dots, n_i, \quad (3.5)$$

donde M es el número de grupos, n_i es el número de observaciones del i -ésimo grupo, f es una función diferencial general real-valuada de un vector de parámetros ϕ_{ij} específico al grupo, y de un vector de covariables v_{ij} ; y por último ε_{ij} es un término de error dentro del grupo distribuido como normal. La función f es no lineal en por lo menos un componente del vector de parámetros ϕ_{ij} , el cual se modela como

$$\phi_{ij} = A_{ij}\beta + B_{ij}b_i, \quad \text{con } b_i \sim N(0, \Psi), \quad (3.6)$$

donde β es un vector p -dimensional de efectos fijos y b_i es un vector q -dimensional de efectos aleatorios asociado con el i -ésimo grupo (que no varía con j) con una matriz de varianzas-covarianzas Ψ . Las matrices A_{ij} y B_{ij} son de dimensiones apropiadas y dependen del grupo y posiblemente de los valores de algunas de las covariables en la j -ésima observación. Se asume que las observaciones correspondientes a los diferentes grupos son independientes y que los errores dentro de los grupos ε_{ij} están independientemente distribuidos como $N(0, \sigma^2)$ e independientes de b_i . La suposición de independencia y homocedasticidad para los errores dentro de los grupos puede relajarse. En el uso del paquete **nlme** los argumentos fijo y aleatorio se usan para especificar las matrices A_{ij} y B_{ij} , respectivamente.

Podemos reescribir las ecuaciones (3.5) y (3.6) pueden reescribirse como:

$$\begin{aligned} y_i &= f_i(\phi_i, v_i) + \varepsilon_i, \\ \phi_i &= A_i\beta + B_i b_i, \end{aligned}$$

para $i = 1, 2, \dots, M$, donde

$$\begin{aligned} y_i &= \begin{bmatrix} y_{i1} \\ \vdots \\ y_{in_i} \end{bmatrix}, \quad \phi_i = \begin{bmatrix} \phi_{i1} \\ \vdots \\ \phi_{in_i} \end{bmatrix}, \quad \varepsilon_i = \begin{bmatrix} \varepsilon_{i1} \\ \vdots \\ \varepsilon_{in_i} \end{bmatrix}, \quad f_i(\phi_i, v_i) = \begin{bmatrix} f(\phi_{i1}, v_{i1}) \\ \vdots \\ f(\phi_{in_i}, v_{in_i}) \end{bmatrix}, \\ v_i &= \begin{bmatrix} v_{i1} \\ \vdots \\ v_{in_i} \end{bmatrix}, \quad A_i = \begin{bmatrix} A_{i1} \\ \vdots \\ A_{in_i} \end{bmatrix}, \quad B_i = \begin{bmatrix} B_{i1} \\ \vdots \\ B_{in_i} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

3.2.2. Estimación por máxima verosimilitud

Se han propuesto distintos métodos para estimar los parámetros en el modelo NLME descrito anteriormente. Dado que los efectos aleatorios son cantidades no-observadas, la estimación por máxima verosimilitud en modelos de efectos mixtos se basa en la densidad marginal de las variables respuesta y , las cuales, para el modelo con Q niveles de anidamiento, se calcula como

$$p(y|\beta, \sigma^2, \Psi_1, \dots, \Psi_Q) = \int p(y|b, \beta, \sigma^2) p(b|\Psi_1, \dots, \Psi_Q) db, \quad (3.7)$$

donde $p(y|\beta, \sigma^2, \Psi_1, \dots, \Psi_Q)$ es la densidad marginal de y , $p(y|b, \beta, \sigma^2)$ es la densidad condicional de y dados los efectos aleatorios b , y la distribución marginal de b es $p(b|\Psi_1, \dots, \Psi_Q)$. Ahora, para el modelo no-lineal de efectos mixtos de un solo nivel, $y_{ij} = f(\phi_{ij}, v_{ij}) + \varepsilon_{ij}$ para $i = 1, \dots, M$ y $j = 1, \dots, n_i$, podemos encontrar la densidad marginal de y dado que representemos la inversa de la matriz de varianzas y covarianzas $\Psi^{-1} = \sigma^{-2} \Delta^T \Delta$ en términos del factor de precisión Δ , y ésta densidad marginal es

$$p(y|\beta, \sigma^2, \Delta) = \frac{|\Delta|^M}{(2\pi\sigma^2)^{(N+M_q)/2}} \prod_{i=1}^M \int \exp \left\{ \frac{\|y_i - f_i(\beta, b_i)\|^2 + \|\Delta b_i\|^2}{-2\sigma^2} \right\} db_i, \quad (3.8)$$

donde $f_i(\beta, b_i) = f_i(\phi_i(\beta, b_i), v_i)$.

Dado que la función del modelo f puede ser no-lineal en los efectos aleatorios, la integral en (3.7) no tiene en general una expresión cerrada. Para volver a una optimización numérica de la función de verosimilitud un problema resoluble, se han propuesto diversas aproximaciones a (3.7). Algunos de estos métodos consisten

en tomar una expansión de Taylor de primer orden de la función del modelo f alrededor del valor esperado de los efectos aleatorios (Sheiner & Beal, 1980; Vonesh & Carter, 1992), o al rededor de los modelos condicionales (sobre Δ) de los efectos aleatorios (Lindstrom y Bates, 1990). También se han usado reglas de cuadraturas gaussianas (Davidian & Gallant, 1992).

El algoritmo de Lindstrom y Bates (1990), que es el cual se usa en los algoritmos de modelos no-lineales de efectos mixtos en los lenguajes de programación R y S-Plus, aproxima (3.7) por medio de la función de verosimilitud de un modelo de efectos mixtos lineal. A esto se le llama, también, aproximación LME (Linear Mixed Effects). Esto constituye la base del algoritmo para estimación implementado en la función *nlme* usada en R y S-Plus, y cabe mencionar que el algoritmo alternante es el único algoritmo de estimación usando en la función *nlme*; se implementa para la función de máxima verosimilitud y está restringida a la estimación por máxima verosimilitud de modelos no-lineales de efectos mixtos de un solo nivel.

El algoritmo de estimación descrito por Lindstrom y Bates alterna entre dos pasos, un paso de mínimos cuadrados no-lineales penalizados (PNLS, por sus nombre en inglés, Penalized Nonlinear Least Squares), y un paso de efectos mixtos lineales (LME), como se describirá a continuación para el caso de un modelo de un solo nivel.

En el paso PNLS, el estimador inicial del factor de precisión Δ se considera fijo, y los modelos condicionales de los efectos aleatorios b_i y los estimadores condicionales de los efectos fijos β se obtienen al minimizar una función objetivo de mínimos cuadrados no-lineales penalizados:

$$\sum_{i=1}^M [\|y_i - f_i(\beta, b_i)\|^2 + \|\Delta b_i\|^2].$$

El paso LME actualiza el estimador de Δ basado en una expansión de Taylor de primer orden de la función del modelo f alrededor de los estimadores actuales de β y las modas condicionales de los efectos aleatorios b_i , los cuales denotamos por $\hat{\beta}^{(w)}$ y $\hat{b}_i^{(w)}$, respectivamente. Si denotamos por

$$\begin{aligned} \hat{X}_i^{(w)} &= \frac{\delta f_i}{\delta \beta^T} \Big|_{\hat{\beta}^{(w)}, \hat{b}_i^{(w)}}, & \hat{Z}_i^{(w)} &= \frac{\delta f_i}{\delta b_i^T} \Big|_{\hat{\beta}^{(w)}, \hat{b}_i^{(w)}}, \\ \hat{w}_i^{(w)} &= y_i - f_i(\hat{\beta}^{(w)}, \hat{b}_i^{(w)}) + \hat{X}_i^{(w)} \hat{\beta}^{(w)} + \hat{Z}_i^{(w)} \hat{b}_i^{(w)}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

la función de log-verosimilitud aproximada usada para estimar a Δ es

$$\begin{aligned} l_{LME}(\beta, \sigma^2, \Delta | y) &= -\frac{N}{2} \log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \{ \log |\Sigma_i(\Delta)| \\ &\quad + \sigma^{-2} [\hat{w}_i^{(w)} - \hat{X}_i^{(w)} \beta]^T \Sigma_i^{-1}(\Delta) [\hat{w}_i^{(w)} - \hat{X}_i^{(w)} \beta] \}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde $\Sigma_i(\Delta) = I + \hat{Z}_i^{(w)} \Delta^{-1} \Delta \hat{Z}_i^{(w)T}$. Esta log-verosimilitud es idéntica a la obtenida por medio del modelo lineal de efectos mixtos, en el cual el vector respuesta está dado por $\hat{w}^{(w)}$ y las matrices de diseño de los efectos fijos y aleatorios están dados por $\hat{X}^{(w)}$ y $\hat{Z}^{(w)}$, respectivamente. Usando los resultados correspondientes a esta clase de modelos, podemos expresar los valores óptimos de β y σ^2 como funciones de Δ y trabajar con la log-verosimilitud perfil de Δ , simplificando así de gran manera el problema de optimización.

Lindstrom y Bates también propusieron un método de estimación de la función de verosimilitud restringida para Δ , el cual consiste en reemplazar la log-verosimilitud en el paso LME del algoritmo alternante por la log-verosimilitud restringida

$$l_{LME}^R(\sigma^2, \Delta|y) = l_{LME}(\beta(\Delta), \sigma^2, \Delta|y) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^M \log |\sigma^{-2} \hat{X}_i^{(w)T} \Sigma_i^{-1}(\Delta) \hat{X}_i^{(w)}|. \quad (3.11)$$

Nótese que, dado que $\hat{X}_i^{(w)}$ depende tanto de $\hat{\beta}^{(w)}$ como de $\hat{b}_i^{(w)}$, los cambios ya sea en el modelo de efectos fijos o en el modelo de efectos aleatorios, implican cambios en el factor de penalización para log-verosimilitud restringida (3.11). Por lo tanto, las log-verosimilitudes restringidas provenientes de modelos no-lineales de efectos mixtos con diferentes modelos de efectos fijos o aleatorios no son comparables.

El algoritmo alterna entre los pasos PNLs y LME hasta que se llega a un criterio de convergencia. Tales algoritmos alternantes tienden a ser más eficientes cuando los estimadores de los componentes de varianzas y covarianzas (Δ y σ^2) no están altamente correlacionados con los estimadores de los efectos fijos (β). Se ha demostrado que, en el caso de los modelos lineales de efectos mixtos, los estimadores de máxima verosimilitud de Δ y σ^2 son asintóticamente independientes de los estimadores de máxima verosimilitud de β . Estos resultados aún no se han extendido al caso de los modelos no-lineales de efectos mixtos.

Lindstrom y Bates sólo usan el paso LME para actualizar el estimador de Δ ; sin embargo, el paso LME también produce estimadores actualizados de β y las modas condicionales de b_i . Por lo tanto, uno puede iterar los pasos LME al re-evaluar (3.9) y (3.10) en los estimadores actualizados de β y b_i . Como los estimadores actualizados corresponden a los valores obtenidos en la primera iteración de un algoritmo Gauss-Newton para el paso PNLs, los pasos LME iterados convergerán a los mismos valores que el algoritmo alternante, aunque posiblemente no tan rápidamente.

El algoritmo alternante y la aproximación LME a la log-verosimilitud de un modelo no-lineal de efectos mixtos puede extenderse a modelos de varios niveles.

3.2.3. Métodos computacionales

Aquí describiremos métodos computacionalmente eficientes para estimar los parámetros en un modelo no-lineal de efectos mixtos usando el algoritmo alternante. El paso LME del algoritmo alternante consiste de optimizar la log-verosimilitud de un modelo lineal de efectos mixtos, o de optimizar la log-verosimilitud restringida de un modelo lineal de efectos mixtos, los cuales se describen para el caso lineal. Así pues, nos concentraremos en métodos computacionales para el paso PNLs del algoritmo alternante.

La función objetivo optimizada en el paso PNLs para un modelo no-lineal de efectos mixtos de un solo nivel es la suma de cuadrados penalizados

$$\sum_{i=1}^M [\|y_i - f_i(\beta, b_i)\|^2 + \|\Delta b_i\|^2]. \quad (3.12)$$

Al agregar "pseudo."observaciones a los datos, podemos convertir (3.12) en una suma de cuadrados no lineal simple. Definamos la variable respuesta aumentada y los vectores de la función del modelo como

$$\bar{y}_i = \begin{bmatrix} y_i \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tilde{f}_i(\beta, b_i) = \begin{bmatrix} f_i(\beta, b_i) \\ \Delta b_i \end{bmatrix}.$$

La suma de cuadrados penalizada (3.12) puede re-expresarse como

$$\sum_{i=1}^M \|\bar{y}_i - \tilde{f}_i(\beta, b_i)\|^2. \quad (3.13)$$

Se sigue de (3.13) que, condicionado a Δ , la estimación de β y b_i en el paso PNLs puede verse como un problema de mínimos cuadrados no-lineal estándar. Un método de estimación iterativa común para problemas de mínimos cuadrados no-lineales es el método de Gauss-Newton, donde un modelo no-lineal $f(\alpha)$ es reemplazado por una aproximación por medio de una serie de Taylor alrededor de los estimadores actuales $\hat{\alpha}^{(w)}$ como

$$f(\alpha) \approx f(\hat{\alpha}^{(w)}) + \frac{\delta f}{\delta \alpha^T} \Big|_{\hat{\alpha}^{(w)}} (\alpha - \hat{\alpha}^{(w)}).$$

El incremento en los parámetros, $\hat{\delta}^{(w+1)} = \hat{\alpha}^{(w+1)} - \hat{\alpha}^{(w)}$ para la w -ésima iteración se calcula como la solución del problema de mínimos cuadrados

$$\left\| \begin{bmatrix} y - f(\hat{\alpha}^{(w)}) \end{bmatrix} - \frac{\delta f}{\delta \alpha^T} \Big|_{\hat{\alpha}^{(w)}} (\alpha - \hat{\alpha}^{(w)}) \right\|^2.$$

El nuevo estimador se fija como $\hat{\alpha}^{(w)} + \hat{\delta}^{(w+1)}$ y se calcula el valor correspondiente de la función objetivo. Si dicho valor es menor que el valor en $\hat{\alpha}^{(w)}$, se retiene

el valor y el algoritmo procede al siguiente paso, o se declara convergencia. Sino, el nuevo estimador se fija como $\hat{\alpha}^{(w)} + \hat{\delta}^{(w+1)}/2$ y se repite el procedimiento, con el incremento siendo dividido a la mitad hasta que se observe un decrecimiento en la función objetivo o se alcance un tamaño de pasos mínimo predeterminado.

El algoritmo de Gauss-Newton se usa para estimar β y b_i en el paso PNLs del algoritmo alternante. Dada la estructura del problema PNLs, pueden emplearse algoritmos de mínimos cuadrados no-lineales.

Las matrices de derivadas para la optimización de Gauss-Newton de (3.13) son, para $i = 1, \dots, M$,

$$\begin{aligned} \frac{\delta \tilde{f}_i(\beta, b_i | \Delta)}{\delta \beta^T} \Big|_{\hat{\beta}^{(w)}, \hat{b}_i^{(w)}} &= \tilde{X}_i^{(w)} = \begin{bmatrix} \hat{X}_i^{(w)} \\ 0 \end{bmatrix}, \\ \frac{\delta \tilde{f}_i(\beta, b_i | \Delta)}{\delta b_i^T} \Big|_{\hat{\beta}^{(w)}, \hat{b}_i^{(w)}} &= \tilde{Z}_i^{(w)} = \begin{bmatrix} \hat{Z}_i^{(w)} \\ \Delta \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

con $\hat{X}_i^{(w)}$ y $\hat{Z}_i^{(w)}$ definidos como en (3.9). El problema a resolver de mínimos cuadrados en la iteración de Gauss-Newton es

$$\sum_{i=1}^M \left\| \left[\tilde{y}_i - \tilde{f}_i(\hat{\beta}^{(w)}, \hat{b}_i^{(w)}) \right] - \tilde{X}_i^{(w)} (\beta - \hat{\beta}^{(w)}) - \tilde{Z}_i^{(w)} (b_i - \hat{b}_i^{(w)}) \right\|^2$$

o, equivalentemente,

$$\sum_{i=1}^M \left\| \tilde{w}_i^{(w)} - \tilde{X}_i^{(w)} \beta - \tilde{Z}_i^{(w)} b_i \right\|^2, \quad (3.14)$$

donde $\tilde{w}_i^{(w)} = \begin{bmatrix} \hat{w}_i^{(w)} \\ 0 \end{bmatrix}$, con $\hat{w}_i^{(w)}$ definido como en (3.9).

Haciendo uso de algunos métodos de descomposición de matrices para obtener un algoritmo eficiente, consideremos primero la descomposición ortogonal triangular que se detalla en el Apéndice:

$$\begin{bmatrix} \hat{Z}_i^{(w)} & \hat{X}_i^{(w)} & \hat{w}_i^{(w)} \\ \Delta & 0 & 0 \end{bmatrix} = Q_{1(i)} \begin{bmatrix} R_{11(i)} & R_{10(i)} & c_{1(i)} \\ 0 & R_{00(i)} & c_{0(i)} \end{bmatrix}, \quad (3.15)$$

donde se detiene la reducción a la forma triangular después de las primeras q columnas. Dado que suponemos que Δ es de rango completo, también lo es la matriz triangular superior $R_{11(i)}$ en (3.15).

Formando otra descomposición ortogonal triangular

$$\begin{bmatrix} R_{00(1)} & c_{0(1)} \\ \vdots & \vdots \\ R_{00(M)} & c_{0(m)} \end{bmatrix} = Q_0 \begin{bmatrix} R_{00} & c_0 \\ 0 & c_{-1} \end{bmatrix}$$

y al notar que $Q_{1(i)}$ y Q_0 son matrices ortogonales, podemos reescribir a (3.14) como

$$\sum_{i=1}^M \|c_{1(i)} - R_{11(i)}b_i - R_{10(i)}\beta\|^2 + \|c_0 - R_{00}\beta\|^2 + \|c_{-1}\|^2. \quad (3.16)$$

Suponemos que R_{00} es de rango completo, en cuyo caso (3.16) se minimiza de forma única por los estimadores de mínimos cuadrados

$$\begin{aligned} \hat{\beta} &= R_{00}^{-1}c_0, \\ \hat{b}_i &= R_{11(i)}^{-1} \left(c_{1(i)} - R_{10(i)}\hat{\beta} \right), \end{aligned} \quad (3.17)$$

con $i = 1, \dots, M$. De aquí que los incrementos de Gauss-Newton se obtienen como la diferencia entre los estimadores de mínimos cuadrados (3.17) y los estimadores actuales $\hat{\beta}^{(w)}$ y $\hat{b}_i^{(w)}$.

El algoritmo de Gauss-Newton descrito arriba puede ser extendido a problemas de optimización PNLS de varios niveles.

3.3. Degradación convexa (La fórmula de París)

Los ingenieros y científicos físicos deben encontrar los modelos para fallas por degradación en su literatura, o desarrollarlos a partir de principios básicos relacionados al proceso de degradación en cuestión. Usualmente tales modelos comienzan con una descripción determinista del proceso de degradación (a menudo en la forma de una ecuación diferencial o un sistema de ecuaciones diferenciales); entonces la aleatoriedad puede ser introducida apropiadamente, usando distribuciones probabilistas para describir la variabilidad en las condiciones iniciales y modelar los parámetros como constantes de grados o propiedades del material.

El interés en el estudio de problemas de fatiga comenzó a crecer con el aumento del uso de estructuras férreas, particularmente puentes de ferrocarril. El primer estudio en fatiga de metales se inició en 1842 a raíz de un accidente de ferrocarril ocurrido en Versalles, Francia, en el que murieron entre 1500 y 1800 personas. En 1843 el ingeniero británico W. J. M. Rankine reconoció las características distintivas de la fractura por fatiga e hizo notar el peligro de los concentradores de tensión en los componentes de máquinas. La British Institution of Mechanical Engineers comenzó a estudiar la llamada teoría de cristalización, que atribuía la rotura por fatiga a que se producía una cristalización de los metales debido a las vibraciones de los elementos de servicio. Esta primera explicación surgió debido al aspecto cristalino de las superficies de fractura.

Los primeros estudios sistemáticos se debieron a August Wölher, un ingeniero de ferrocarriles alemán, cuyo trabajo permitió la caracterización del comportamiento a fatiga en base a las curvas de amplitud de tensiones frente a un número de

ciclos de carga hasta la rotura. También estableció el concepto de límite de fatiga al comprobar que las aleaciones de hierro parecían tener un límite de tensión por debajo del cual no se producía la rotura por muy grande que fuera el número de ciclos.

En 1874, el ingeniero alemán H. Gerber comenzó a desarrollar métodos para el diseño a fatiga, incluyendo métodos para el cálculo de los tiempos de vida por fatiga para diferentes niveles medios de la tensión cíclica. A principios de siglo, Ewing y Humfrey (1903) utilizaron el microscopio óptico y observaron la formación de líneas y bandas de deslizamiento que desembocaban en la formación de microgrietas en el material. Se descartó entonces la vieja teoría de la cristalización del material. Durante la primera mitad del siglo XX se obtuvieron gran cantidad de datos experimentales relacionando la resistencia a fatiga con factores tales como la geometría y tamaño de las piezas, condiciones ambientales, acabado superficial, etc. . Las investigaciones en este periodo permitieron el desarrollo de los modelos de daño acumulado para predecir el fallo por fatiga (Palmgren, 1924). La idea de que las deformaciones plásticas son las responsables del daño en el material fue establecida por Coffin y Manson, quienes en la década de los 60 propusieron una relación empírica entre el número de inversiones de carga hasta rotura y la amplitud de la deformación plástica.

A pesar de que desde principios de siglo se conocía que el fenómeno se debía a la formación y crecimiento lento de grietas, no estaba suficientemente desarrollada la herramienta matemática necesaria para cuantificar modelos de fallo por fatiga. Un avance en esta dirección vino con los estudios de Irwin (1957), quien mostró que la amplitud de la singularidad en tensiones delante de una grieta podría ser expresada en términos de una cantidad conocida como *factor de intensidad de tensiones*, K . Con el desarrollo de la mecánica de la fractura elástica lineal se intentó caracterizar el crecimiento de las grietas de fatiga también en términos del factor de intensidad de tensiones. París y Erdogan fueron los primeros en sugerir que el incremento de longitud de grieta por ciclo, da/dN , podía relacionarse con el rango del factor de intensidad de tensiones, ΔK . A continuación procederemos a mostrar la fórmula propuesta por París para el problema de crecimiento de grieta con respecto a la cantidad de ciclos y a la intensidad de tensiones.

Los ingenieros y científicos físicos deben encontrar los modelos para fallas por degradación en su literatura, o desarrollarlos a partir de principios básicos relacionados al proceso de degradación en cuestión. Usualmente tales modelos comienzan con una descripción determinista del proceso de degradación (a menudo en la forma de una ecuación diferencial o un sistema de ecuaciones diferenciales); entonces la aleatoriedad puede ser introducida apropiadamente, usando distribuciones probabilistas para describir la variabilidad en las condiciones iniciales y modelar los parámetros como constantes de grados o propiedades del material.

Los modelos para los cuales el grado de degradación aumenta con el nivel de fatiga son, por ejemplo, usados en modelos de crecimiento de rupturas por fatiga.

Sea $a(t)$ el tamaño de la grieta al tiempo t . Páris mostró que la velocidad de crecimiento podría relacionarse con

$$\frac{da(t)}{dt} = C \times [\Delta K(a)]^m,$$

provee un modelo útil para rupturas dentro de cierto rango de tamaños. Aquí C y m son propiedades del material y $\Delta K(a)$ (conocido como "la función del rango de intensidad") es una función del tamaño de ruptura a , del rango de estrés aplicado, dimensiones parciales y geometría. Por ejemplo, para modelar una fractura bidimensional de superficies en un recipiente con una fractura que es pequeña con respecto al espesor del recipiente, $\Delta K(a) = Stress\sqrt{\pi a}$. La solución determinista de la ecuación diferencial resultante es

$$a(t) = \begin{cases} \left[\{a(0)\}^{1-m/2} + (1 - m/2) \times C \times (Stress\sqrt{\pi})^m \times t \right]^{2/(2-m)}, & m \neq 2 \\ a(0) \times \exp \left[C \times (Stress\sqrt{\pi})^2 \times t \right], & m = 2 \end{cases}$$

Páris sugirió que para variaciones cíclicas del campo de tensiones aplicado, la caracterización de la velocidad de crecimiento de grieta podría basarse en el rango del factor de intensidad de tensiones calculado en base a la MFEL (mecánica de fractura elástica lineal). La mayor aportación de la mecánica de la fractura elástica lineal es que el factor de intensidad de tensiones, determinado por las tensiones remotas aplicadas y las dimensiones geométricas del componente agrietado, basta para caracterizar la propagación de la grieta. Este método no requiere un detallado conocimiento de los mecanismos de fractura por fatiga.

3.4. Pruebas de hipótesis

La prueba de hipótesis es una de las herramientas estadísticas que ha probado ser de mayor utilidad cuando se desea indagar a cerca de la naturaleza de uno o varios grupos de datos. Como nuestro principal propósito consiste en analizar el efecto que tienen la variabilidad y la regularidad del proceso de cargas aleatorias sobre el crecimiento de grietas, es inminente que se lleven a cabo comparaciones estadísticas entre los parámetros pertinentes, considerando los modelos que aplicamos a los datos. Dichas comparaciones estadísticas son realizadas aquí, principalmente, por medio de pruebas de hipótesis que en nuestro caso son de normalidad, homogeneidad de medias y homocedasticidad.

Como es de esperarse, las pruebas de hipótesis en un contexto multivariado son más complejas que las correspondientes en un ambiente univariado. En algunos casos, somos víctimas del dilema de elegir entre distintos estadísticos de prueba competitivos, y es por ello que en nuestros análisis se eligen hipótesis generales,

donde no se supone homogeneidad de medias ni varianzas para realizar las pruebas. De esta forma, podemos indagar el comportamiento de los parámetros con la mayor generalidad posible.

3.4.1. Pruebas de hipótesis de normalidad multivariada

Cuando se desea hacer una prueba sobre la normalidad multivariada de un grupo de datos, usualmente se intenta generalizar la teoría y las técnicas propias del caso univariado. Si consideramos una variable aleatoria x , d -dimensional y distribuida $N(\mu, \Sigma)$, entonces es particularmente útil el considerar las medidas multivariadas para la simetría y curtosis respectivas propuestas por K. V. Mardia,

$$\begin{aligned}\beta_{1,d} &= E[\{(x - \mu)^T \Sigma^{-1} (y - \mu)\}^3], \\ \beta_{2,d} &= E\left[\left\{(x - \mu)^T \Sigma^{-1} (x - \mu)\right\}^2\right],\end{aligned}$$

donde y es independiente de x pero tiene la misma distribución. Cuando x es $N_d(\mu, \Sigma)$, puede verse que $\beta_{1,d} = 0$ y $\beta_{2,d} = d(d + 2)$, y podemos realizar la prueba para estos valores usando los estimadores muestrales, considerando un tamaño de muestra n , como sigue:

$$b_{1,d} = \frac{1}{n^2} \sum_{h=1}^n \sum_{i=1}^n g_{hi}^3 \quad \text{y} \quad b_{2,d} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n g_{ii}^2,$$

donde

$$g_{hi} = (x_h - \bar{x})^T S^{-1} (x_i - \bar{x}).$$

Se ha dado un algoritmo para calcular los estimadores muestrales por K. V. Mardia y J. P. Zemrock en 1975. Ellos demostraron que, dado que x se distribuya como normal multivariada, se cumple asintóticamente que

$$A = \frac{1}{6} n b_{1,d} \sim \chi_f^2, \quad \text{donde} \quad f = \frac{1}{6} d(d + 1)(d + 2),$$

y

$$B = \frac{b_{2,d} - d(d + 2)}{[8d(d + 2)/n]^{1/2}} \sim N_1(0, 1).$$

Debe notarse que, desafortunadamente, en la mayoría de los casos se debe tener un n demasiado grande (por lo menos mayor a 5) para que estas aproximaciones sean satisfactorias. Sin embargo, Mardia proporciona tablas de percentiles aproximados para el caso bivariado y $n \geq 10$.

3.4.2. Prueba de hipótesis para igualdad de medias

Supongamos que tenemos dos muestras aleatorias v_1, \dots, v_{n_1} y w_1, \dots, w_{n_2} provenientes de las distribuciones $N_d(\mu_1, \Sigma_1)$ y $N_d(\mu_2, \Sigma_2)$ respectivamente, donde $n_1 \neq n_2$ y $\Sigma_1 \neq \Sigma_2$. Consideremos la hipótesis nula $H_0 : \theta = 0$ contra la hipótesis alternativa $H_1 : \theta \neq 0$, donde $\theta = \mu_1 - \mu_2$. En este caso, el problema correspondiente en el caso univariado de varianzas desiguales se conoce como el problema de Behrens-Fisher y se han propuesto varias soluciones. Una solución, propuesta por Scheffé en 1943, fue generalizada al caso multivariado por B. M. Bennett en 1951. A su vez, la prueba de Bennett usa el estadístico propuesto por G. S. James:

$$(\bar{v} - \bar{w})^T \left(\frac{1}{n_1} S_1 + \frac{1}{n_2} S_2 \right)^{-1} (\bar{v} - \bar{w}),$$

donde \bar{v} y \bar{w} son las medias muestrales de v_1, \dots, v_{n_1} y w_1, \dots, w_{n_2} respectivamente, mientras que S_1 y S_2 son los estimadores de máxima verosimilitud de Σ_1 y Σ_2 respectivamente.

Cuando n_1 y n_2 son muy grandes, el estadístico tiende a

$$(\bar{v} - \bar{w})^T \left(\frac{1}{n_1} \Sigma_1 + \frac{1}{n_2} \Sigma_2 \right)^{-1} (\bar{v} - \bar{w}),$$

el cual puede demostrarse que se distribuye aproximadamente como una χ_d^2 cuando H_0 es cierta. Usando expansiones de Taylor, James demostró que el valor crítico superior α para dicho estadístico es

$$k_\alpha = \chi_d^2(\alpha) [A + B\chi_d^2(\alpha)],$$

donde

$$\begin{aligned} A &= 1 + \frac{1}{2d} \sum_{i=1}^2 \frac{1}{n_i - 1} \left(\text{tr} \left[\frac{S_T^{-1} S_i}{n_i} \right] \right)^2, \\ B &= \frac{1}{d(d+2)} \left[\sum_{i=1}^2 \frac{1}{n_i - 1} \left\{ \frac{1}{2} \left(\text{tr} \left[\frac{S_T^{-1} S_i}{n_i} \right] \right)^2 + \text{tr} \left[\frac{S_T^{-1} S_i}{n_i} \right]^2 \right\} \right], \\ S_T &= \frac{1}{n_1} S_1 + \frac{1}{n_2} S_2, \end{aligned}$$

y $\chi_d^2(\alpha)$ es el valor del cuantil superior de nivel α de χ_d^2 , es decir, $P[\chi_d^2 \geq \chi_d^2(\alpha)] = \alpha$.

Debe considerarse que, lamentablemente, la prueba posee dos desventajas; la primera es que se necesitan elegir n_1 de las w_j observaciones aleatoriamente de las n_2 observaciones para calcular y_i , de forma que distintos estadísticos obtendrán

distintos valores de T^2 . La segunda desventaja consiste en que la potencia de la prueba estará muy lejos de ser la óptima si n_1 es mucho menor que n_2 , pues estamos ignorando $n_2 - n_1$ valores de w_j al calcular S_y . Sin embargo, una cualidad muy deseable es que es una prueba que parece ser robusta a no-normalidad y que, a pesar de que la potencia de la prueba dista de ser la óptima, sus niveles de significancia no resultan tan inflados como los correspondientes a otras pruebas.

3.4.3. Pruebas de hipótesis para homocedasticidad

Con el propósito de estudiar la homogeneidad de varianzas en poblaciones normales multivariadas, supongamos que poseemos y_{ij} i. i.d. $N_d(\mu_i, \Sigma_i)$, con $j = 1, 2, \dots, n_i$ y además $i = 1, 2, \dots, I$, y consideramos la hipótesis nula $H_0 : \Sigma_1 = \Sigma_2 = \dots = \Sigma_I$, contra la hipótesis alternativa $H_1 : \Sigma_l \neq \Sigma_k$ para algunos $l \neq k$. La prueba más natural a considerar para dichas hipótesis son las basadas en la razón de verosimilitudes, la cual, para $i = 1, 2, \dots, I$ es

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{|\hat{\Sigma}|^{-n/2}}{|\hat{\Sigma}_1|^{-n_1/2} |\hat{\Sigma}_2|^{-n_2/2} \dots |\hat{\Sigma}_I|^{-n_I/2}} \\ &= \left(\prod_{i=1}^I |Q_i|^{n_i/2} n^{dn/2} \right) \Big/ \left| \sum_{i=1}^I Q_i \right|^{n/2} \prod_{i=1}^I n_i^{dn_i/2}, \end{aligned}$$

donde

$$n_i \hat{\Sigma}_i = Q_i = \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_i) (y_{ij} - \bar{y}_i)^T,$$

y $n = \sum_{i=1}^I n_i$. Cuando H_0 es cierto y n es grande, $-2 \log \lambda$ se distribuye aproximadamente como $\chi_{\nu_1}^2$, donde $\nu_1 = \frac{1}{2}d(d+1)(I-1)$. Sin embargo, puede obtenerse una mejor aproximación a la distribución chi-cuadrada al utilizar una pequeña modificación de λ . Dicha modificación consiste en reemplazar n_i por $f_i = n_i - 1$, lo cual nos lleva a una prueba insesgada dada por

$$M = \left(\prod_{i=1}^I |S_i|^{f_i/2} \right) \Big/ |S|^{f/2} = \left(\prod_{i=1}^I |Q_i|^{f_i/2} f^{dn/2} \right) \Big/ \left| \sum_{i=1}^I Q_i \right|^{f/2} \prod_{i=1}^I f_i^{df_i/2},$$

donde $f = \sum_i f_i = n - I$, $S_i = Q_i / f_i$, y $S = \sum_i Q_i / f = E / f$.

Existen dos aproximaciones a la distribución del estadístico M, ambas debidas a G. E. P. Box. La primera es una aproximación chi-cuadrada, que es un análogo multivariado de la prueba de homogeneidad de Bartlett, y cuyo nivel de significancia es más cercano al nivel de significancia nominal que el correspondiente a

$-2 \log \lambda$. La segunda aproximación es, sin embargo, más precisa, y ésta consiste de una aproximación a la distribución F haciendo uso del estadístico

$$-2b \log M, \text{ que es aproximadamente } F_{\nu_1, \nu_2},$$

donde $\nu_1 = \frac{1}{2}d(d-1)(I-1)$, $\nu_2 = (\nu_1 + 2) / |c_2 - c_1^2|$, $b = [1 - c_1 - (\nu_1/\nu_2)] / \nu_1$,

$$c_1 = \frac{2d^2 + 3d - 1}{6(d+1)(I-1)} \left(\sum_i f_i^{-1} - f^{-1} \right),$$

$$c_2 = \frac{(d-1)(d+2)}{6(I-1)} \left(\sum_i f_i^{-2} - f^{-2} \right).$$

Lo anterior se cumple para el caso en que $c_2 - c_1^2 > 0$. Si $c_2 - c_1^2 < 0$, entonces tenemos que

$$-\frac{2b_1\nu_2 \log M}{\nu_1 + 2b_1\nu_1 \log M} \text{ es aproximadamente } F_{\nu_1, \nu_2},$$

donde

$$b_1 = \frac{1 - c_1 - (2/\nu_2)}{\nu_2}.$$

Cuando los f_i son desiguales, se tiene poca información a cerca de cuán exactas son las aproximaciones anteriores, sin embargo, Box hizo algunas comparaciones. Sus conclusiones tentativas fueron que la aproximación F puede ser satisfactoria si $d \leq 5$, $I \leq 5$ y $f_i \geq 9$ ($i = 1, 2, \dots, I$), mientras que para valores de f_i pequeños, se necesitan más términos para la expansión de series de Box. En el caso en que los f_i son iguales, E. S. Pearson comparó las dos aproximaciones con una tabla similar y concluyó que la aproximación chi-cuadrada parece adecuada para la mayoría de los casos, y es notable que la aproximación F es muy exacta en este caso.

CAPÍTULO 4

MODELACIÓN DEL PROBLEMA DE CRECIMIENTO DE GRIETAS EN PROBETAS

El fallo por fatiga se da cuando se aplica una carga continua a un sistema mecánico que lleva a la aparición de pequeñas grietas en el material, que progresan y reducen la capacidad del material y puede desembocar en la fractura. Las propiedades del material y la carga son las principales incertidumbres que afectan el proceso de crecimiento de grietas por fatiga. Los tipos de fallas por fatiga son:

- a) por fluctuaciones de la carga a la que se somete el componente (fatiga mecánica),
- b) creep-fatiga: sometimiento a altas temperaturas,
- c) fatiga termodinámica: bajo acción combinada de cargas cíclicas y temperaturas fluctuantes,
- d) corrosión-fatiga: en ambientes químicamente corrosivos,
- e) fretting-fatigue: acciones fluctuantes asociadas a contactos con rozamiento entre materiales.

La vida total de un componente por proceso de fatiga se define como la suma del número de ciclos necesarios para iniciar la grieta y el necesario para propagarla de forma estable hasta un tamaño determinado.

Los principios de la Mecánica de Fractura Elástica Lineal (MFEL) se usan para relacionar la magnitud de las tensiones y su distribución cerca de la grieta. El estudio se basa en la aplicación de la teoría de elasticidad de cuerpos con grietas o defectos. La frecuencia de aplicación de la carga tanto en amplitud constante durante el pre-agrietamiento como con la carga variable durante el crecimiento de la grieta fue de 10Hz. Al inicio de un ensayo, dependiendo del material y tipo de probeta, es necesario ajustar los parámetros que optimizan la respuesta dinámica del sistema de cargas aplicadas por el equipo a las probetas. Aquí, este ajuste se realiza a través de una función propia de la máquina. En el caso concreto de los ensayos de fatiga, los parámetros ajustados pueden no ser igualmente válidos durante todo el ensayo debido a los cambios de rigidez en la probeta producidos por el avance de la grieta. Aquí el propio equipo tiene incorporado un sistema de control adaptativo que permite la modificación automática de los parámetros para optimizar el seguimiento de la carga.

4.1. Aplicación del modelo NLME a las bases de datos

Al realizar los experimentos de degradación de las probetas, se llevaron a cabo dos repeticiones de las pruebas, considerando dos procesos de cargas aleatorias que siguen un proceso gaussiano con media $\mu = 4851N$ y cuya diferencia se debe a que un proceso se considera alto si la desviación estándar de dicho proceso es $\sigma = 1078N$ y se considera baja si su desviación estándar es $\sigma = 638N$, además de considerar distintos niveles de regularidad, ε . Para cada experimento se pusieron a prueba 20 probetas y a partir de 104 mediciones de los crecimientos de fractura de cada una, se midió el número de ciclos transcurridos hasta cada medición. El primer grupo de ensayos realizados se categorizaron y denotaron como se muestra en la siguiente tabla.

Nombre de serie	Tipo de proceso	Nivel de carga	Número de ensayos
$A - H25$	$A (\varepsilon = 0,64)$	Alto: $\mu = 4851N$ $\sigma = 1078N$	20
$B - H25$	$B (\varepsilon = 0,70)$		
$C - H25$	$C (\varepsilon = 0,77)$		
$D - H25$	$D (\varepsilon = 0,85)$		
$A - L25$	$A (\varepsilon = 0,64)$	Bajo: $\mu = 4851N$ $\sigma = 638N$	20
$C - L25$	$C (\varepsilon = 0,77)$		
$D - L25$	$D (\varepsilon = 0,85)$		

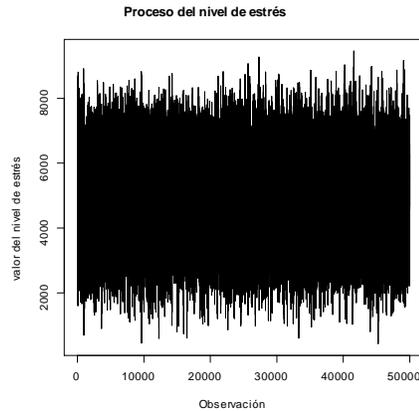
Aquí, ε es el parámetro de la densidad espectral, es decir, el nivel de irregularidad del proceso gaussiano, es decir

$$\varepsilon = \frac{\text{Número de picos del proceso}}{\text{Número de cruces por la media del proceso}}.$$

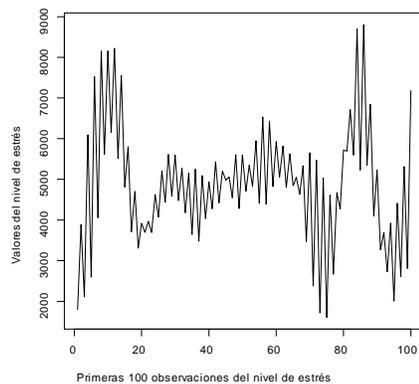
Dado que nosotros estamos interesados en observar si hay una diferencia significativa entre los procesos de degradación con cargas altas y bajas, y con irregularidades altas y bajas, tomamos como objetos de estudio a los grupos de datos $A - H25$, $A - L25$, $D - H25$ y $D - L25$, que son los grupos aparentemente más contrastantes en cuanto a cargas y parámetro espectral posibles. Con el propósito de ilustrar el procedimiento que se utilizó para encontrar los parámetros de los modelos no lineales de efectos mixtos, a continuación se presentan los pasos realizados con el grupo $A - H25$.

4.2. Grupo de datos A-H25

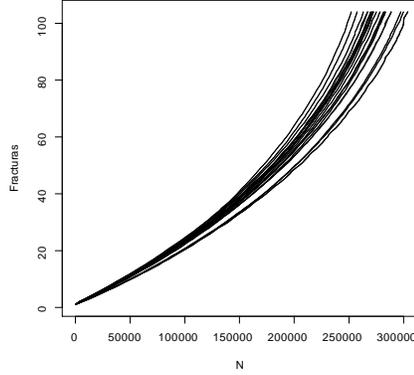
Considerando el grupo de datos $A - H25$ descrito anteriormente, tenemos que el proceso de degradación (o cargas) utilizado es el siguiente,



donde un acercamiento en la siguiente figura nos permite observar la naturaleza de los saltos del proceso.



En este caso, el rango del número de ciclos, N' , va desde 0 hasta 303699, mientras que los tamaños de grietas, Y' , comienzan desde $a'_0 = 15$ mm., y van en aumento hasta alcanzar un tamaño máximo de 25,3 mm. Por razones de simplicidad visual y para mantener una notación acorde a los ejemplos proporcionados en la literatura usual de problemas de fatiga, se reescaló al número de ciclos, $N = \frac{N'}{1000000}$, y el tamaño de las grietas, $Y = \frac{Y'}{10}$. Bajo estas consideraciones, a continuación se muestra una gráfica del crecimiento de grietas Y en las 20 distintas piezas con respecto al número de ciclos N .



Curvas de crecimiento del agrietamiento para el grupo A-H25.

Recordemos que nuestro interés está en modelar el crecimiento de las grietas tomando en cuenta tanto la variación dentro de los datos de cada pieza, como la variación presente entre las distintas probetas. Se observó que el comportamiento del crecimiento de las grietas entre piezas son similares entre sí, pero visiblemente existen diferencias de pieza a pieza, por lo cual se propone el usar un modelo no-lineal de efectos mixtos para así considerar la información proporcionada individual y grupalmente de las probetas. Así, el modelo propuesto sería

$$y_{ij} = a_{ij} + \varepsilon_{ij},$$

donde denotamos por $a(t)$ la trayectoria de degradación en un tiempo $t > 0$, y_{ij} es la degradación muestral observada de la pieza i en el número de ciclos j , $a_{ij} = a(t_{ij}; \beta_{1i}, \dots, \beta_{ki})$ es la trayectoria real de la pieza i en el momento t_{ij} , y ε_{ij} es una desviación residual para la pieza i en el momento j , y suponemos que $\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma_\varepsilon)$. A su vez, los parámetros $\beta_{1i}, \dots, \beta_{ki}$ se modelan como

$$\beta_{1i}, \dots, \beta_{ki} = A_{ij}\beta + B_{ij}b_i,$$

con b_i un vector q -dimensional de efectos aleatorios, β un vector p -dimensional de efectos fijos, A_{ij} y B_{ij} son matrices de dimensiones apropiadas y, finalmente, suponemos que b_i se distribuye como $N(0, \Psi)$, con Ψ una matriz de varianzas y covarianzas.

Como se mencionó en el capítulo de Marco teórico, las suposiciones que contemplan los modelos no-lineales de efectos mixtos son: que las observaciones entre las distintas probetas son independientes, que los errores dentro de los grupos

(probetas) ε_{ij} son independientes e idénticamente distribuidos como $N(0, \sigma_\varepsilon^2)$, y que los errores ε_{ij} son independientes de b_i .

Bajo este modelo se presentan dos cuestiones importantes: qué trayectoria de degradación $a(t)$ proponer, y qué valores iniciales de los parámetros dar para estimar las trayectorias correspondientes al modelo. Una función propuesta tradicionalmente para problemas de fatiga es la fórmula de París ya mencionada en el capítulo de Marco teórico, y si consideramos a C y m como propiedades que desconocemos del material de la probeta, entonces tendríamos que la función de trayectoria es de la forma

$$\frac{da(t)}{dt} = C \times [\Delta K(a)]^m,$$

donde $\Delta K(a)$ es una función del tamaño de fractura a . Frecuentemente se considera $\Delta K(a) = Stress\sqrt{\pi a}$, de forma que la solución, como se vio en el capítulo previo, es de la forma

$$a(t) = \begin{cases} \left[\{a(0)\}^{1-m/2} + \left(1 - \frac{m}{2}\right) \times C \times (Stress\sqrt{\pi})^m \times t \right]^{2/(2-m)}, & \text{si } m \neq 2, \\ a(0) \exp \left[C \times (Stress\sqrt{\pi})^2 \times t \right], & \text{si } m = 2. \end{cases}$$

A partir de esto llegamos a que los parámetros de nuestro modelo son C , $a(0) = a_0$, $Stress$ y m ; es decir, nuestro modelo es de la forma

$$y_{ij} = a_{ij} + \varepsilon_{ij},$$

con $a(t)$ la función de París, $a_{ij} = a(t_{ij}; C, Stress, m, a_0)$, con $\beta = (Stress, a_0)$ los efectos fijos, $b_i = (C, m)$ el vector de efectos aleatorios. Por el contexto de nuestros datos, sabemos que $a_0 = 1,5$ y por simplicidad tomamos $Stress = 1$.

Ahora, recordemos que un problema en particular con los modelos no-lineales de efectos mixtos es que la expresión de su función de verosimilitud no es cerrada y, por ello, es necesario el resolverlo numéricamente por medio de aproximaciones. Para poder realizar una solución numérica de dicha verosimilitud, se necesitan valores próximos a los reales de los parámetros. Es debido a esto que buscamos los estimadores de C y m por medio del método de Nelder-Mead aplicado a la log-verosimilitud de y_{ij} , y se encontraron los siguientes estimadores para los parámetros por cada pieza:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
C	0.01	0.02	0.02	0.02	0.01	0.02	0.02	0.02	0.01	0.01
m	6.42	5.99	5.74	5.82	6.28	5.60	6.03	6.10	6.21	6.09

Estos coeficientes nos sirven para corroborar los resultados de un paquete preliminar que se usó en *R*: *nlsList*, que realiza una regresión no lineal individual para

	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
C	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02
m	6.24	6.08	6.18	5.76	6.06	6.03	5.93	6.07	5.95	5.69

cada curva de degradación, considerando la función no lineal que se le indique. Al usar dicho comando podremos obtener los valores iniciales óptimos para calcular la regresión no lineal de efectos mixtos. Cabe mencionar que el método *nlsList* y *nlme* de *R* y *S-PLUS* son muy sensibles a los cambios de los parámetros C y m para la función de Páris, y es por ello que se le aplicó una transformación logarítmica a la función de Páris por ambos lados. Por simplicidad consideramos el parámetro $Stress = 1$, se denotó a_0 a $a(0)$ y de aquí tenemos los dos casos siguientes:

$$\text{Cuando } m \neq 2, a(t) = \left[a_0^{(1-m/2)} + (1 - m/2)C\pi^{m/2}t \right]^{2/(2-m)},$$

luego,

$$\begin{aligned} \log(a(t)) &= \left(\frac{2}{2-m} \right) \log \left(a_0^{(1-m/2)} + (1 - m/2)C\pi^{m/2}t \right) \\ &= \left(\frac{2}{2-m} \right) \log \left(a_0^{(1-m/2)} - \left(\frac{m}{2} - 1 \right) C\pi^{m/2}t \right) \\ &= \left(\frac{2}{2-m} \right) \log \left[a_0^{1-m/2} - a_0^{1-m/2} a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1 \right) \pi^{m/2} C t \right] \\ &= \left(\frac{2}{2-m} \right) \log \left\{ a_0^{1-m/2} \left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1 \right) \pi^{m/2} C t \right] \right\} \\ &= \left(\frac{2}{2-m} \right) \left\{ \log(a_0^{1-m/2}) + \log \left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1 \right) \pi^{m/2} C t \right] \right\} \\ &= \left(\frac{2}{2-m} \right) \left(1 - \frac{2}{m} \right) \log(a_0) + \left(\frac{2}{2-m} \right) \log \left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1 \right) \pi^{m/2} C t \right] \\ &= \log(a_0) + \left(\frac{2}{2-m} \right) \log \left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1 \right) \pi^{m/2} C t \right], \end{aligned}$$

y de aquí tenemos que

$$\begin{aligned} y_{ij} &= \log \left(\frac{a(t)}{a_0} \right) = \left(\frac{2}{2-m} \right) \log \left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1 \right) \pi^{m/2} C t \right] \\ &= - \left(\frac{2}{m-2} \right) \log \left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1 \right) \pi^{m/2} C t \right]. \end{aligned}$$

Ahora, observemos el segundo caso,

$$\text{cuando } m = 2, a(t) = a_0 \exp(C\pi t),$$

es decir,

$$\frac{a(t)}{a_0} = \exp(C\pi t)$$

y al aplicar el logaritmo por ambos lados, tenemos

$$y_{ij} = \log\left(\frac{a(t)}{a_0}\right) = C\pi t,$$

de donde concluimos que

$$y_{ij} = \log\left(\frac{a(t)}{a_0}\right) = \begin{cases} -\left(\frac{2}{m-2}\right) \log\left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1\right) \pi^{m/2} Ct\right], & m \neq 2, \\ C\pi t, & m = 2. \end{cases}$$

A ésta ecuación la denominaremos por log-función de Páris; cabe mencionar que los parámetros estimados a través de *nlme* y *nlsList* para la log-función de Páris, serán los mismos parámetros que se habrían estimado por medio de dichos comandos para la función de Páris, pero el aplicar el logaritmo simplifica los cálculos numéricos. Ahora, notemos que en el experimento realizado, la variable que estaba siendo controlada era el crecimiento de grieta, $a(t)$, mientras que las variables eran los números de ciclos N y no viceversa, por lo cual puede tener más sentido el modelar la cantidad de ciclos en función al crecimiento de grieta. Bajo estas consideraciones, calculamos la función inversa de la log-función de Páris como se muestra a continuación:

Para $m \neq 2$, teníamos que

$$\log\left(\frac{a(t)}{a_0}\right) = -\left(\frac{2}{m-2}\right) \log\left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1\right) \pi^{m/2} Ct\right], \text{ luego,}$$

$$-\left(\frac{m-2}{2}\right) \log\left(\frac{a(t)}{a_0}\right) = \log\left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1\right) \pi^{m/2} Ct\right], \text{ y por propiedades del logaritmo,}$$

$$\log\left(\frac{a(t)}{a_0}\right)^{-\left(\frac{m-2}{2}\right)} = \log\left[1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1\right) \pi^{m/2} Ct\right]. \text{ Aplicando la función}$$

exponencial de ambos lados,

$$\left(\frac{a(t)}{a_0}\right)^{-\left(\frac{m-2}{2}\right)} = 1 - a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1\right) \pi^{m/2} Ct, \text{ luego tenemos}$$

$$\left(\frac{a(t)}{a_0}\right)^{-\left(\frac{m-2}{2}\right)} - 1 = -a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1\right) \pi^{m/2} Ct, \text{ y de aquí concluimos que}$$

$$t = \frac{1 - \left(\frac{a(t)}{a_0}\right)^{-\left(\frac{m-2}{2}\right)}}{a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2} - 1\right) \pi^{m/2} C}.$$

Análogamente, para el caso en que $m = 2$ tenemos que la inversa es

$$t = \frac{\log\left(\frac{a(t)}{a_0}\right)}{C\pi},$$

y de aquí concluimos que la función inversa de la log-función de Páris es

$$t = \begin{cases} \frac{1 - \left(\frac{a(t)}{a_0}\right)^{-\left(\frac{m-2}{2}\right)}}{a_0^{m/2-1} \left(\frac{m}{2}-1\right) \pi^{m/2} C}, & m \neq 2, \\ \frac{\log\left(\frac{a(t)}{a_0}\right)}{C\pi}, & m = 2. \end{cases}$$

Aplicaremos ahora la función inversa de la log-función de Páris a un modelo no lineal por pieza, es decir, haciendo uso del comando *nlsList*, para el cual obtenemos que los efectos aleatorios \hat{C}_{rand} y \hat{m}_{rand} son: y dado que los efectos

	1	5	7	18	9	13	3	8	19	17
C	-0.0051	-0.0033	0.0003	-0.0006	-0.003	-0.002	0.006	-0.001	0.0008	0.001
m	0.435	0.276	0.017	0.059	0.209	0.188	-0.31	0.075	-0.049	-0.111

	15	2	4	6	16	20	14	11	10	12
C	-0.001	-0.0004	0.003	0.009	-0.001	0.005	0.003	-0.005	-0.003	-0.003
m	0.065	0.0004	-0.236	-0.514	0.048	-0.353	-0.274	0.254	0.116	0.101

fijos respectivos son

$$C_{fijo} = 0,01948, \quad m_{fijo} = 5,8438,$$

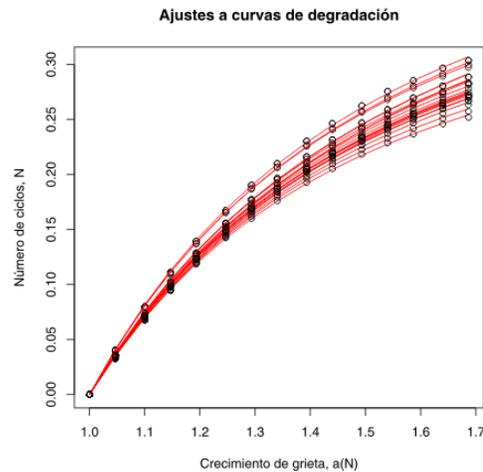
entonces tenemos que los coeficientes correspondientes a los modelos no lineales individuales son los siguientes:

	1	5	7	18	9	13	3	8	19	17
C	0.014	0.016	0.019	0.018	0.016	0.016	0.025	0.018	0.02	0.021
m	6.279	6.12	5.861	5.903	6.053	6.032	5.532	5.919	5.794	5.732

A partir de los coeficientes encontrados para la función inversa de la log-función de Páris, tenemos que los ajustes a las curvas de crecimiento de grietas son como se muestran a continuación, donde los puntos son las observaciones reales de la muestra, y de las cuales se muestran sólo 15 de las observaciones por pieza para facilitar la apreciación visual del ajuste. En dicha gráfica, las líneas continuas representan los ajustes por medio de la función inversa de la log-función

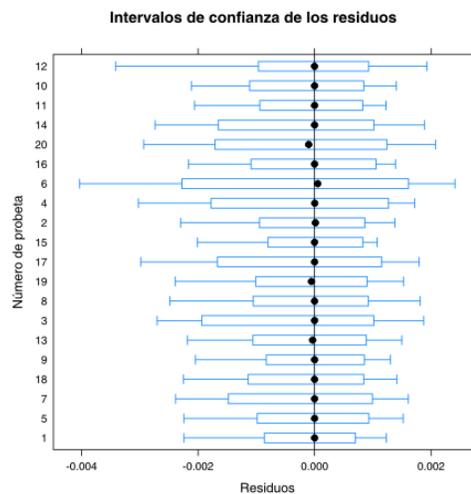
	15	2	4	6	16	20	14	11	10	12
C	0.018	0.019	0.023	0.029	0.017	0.025	0.023	0.014	0.015	0.015
m	5.909	5.844	5.607	5.329	5.892	5.49	5.569	6.098	5.96	5.945

de París.



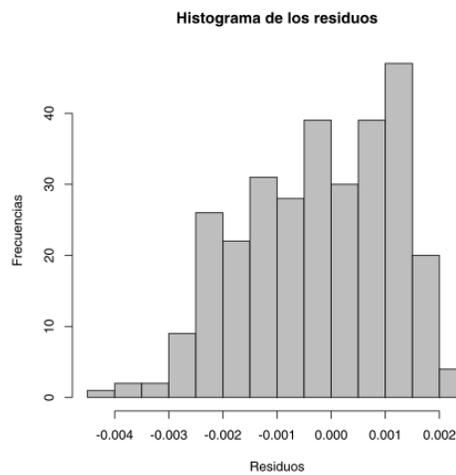
De aquí podemos observar a grandes rasgos que las aproximaciones por simulación a las curvas de degradación parecen ajustarse bien a los datos originales de forma individual.

Ahora veamos que, bajo dichos ajustes, los intervalos box-plot de los residuos correspondientes son como se muestran a continuación:



Aquí podemos observar que en general las medias de los residuos tienden a estar centradas en el cero y que sus intervalos de confianza del 95% varían en longitud

dependiendo del número de pieza. Dado que los cuadrados denotan las áreas donde se concentra el 50% de los datos, es intuitivamente claro que los datos tienden en su mayoría a situarse simétricamente alrededor de la media. Por otra parte, las rectas que parten de los cuadrados denotan los puntos alejados que no se consideran "outliers", y a partir de ellas podemos percibir que existen datos más alejados hacia la izquierda que hacia la derecha. Como se muestra en el siguiente histograma de los residuos, éstos parecen tener una forma unimodal y centrada en el cero, y aunque su forma puede no ser muy similar a una densidad normal, notemos que, dado que el orden de los datos originales es de 1.5 hasta 2.53 y los residuos caen entre -0.004 y 0.002, entonces los residuos se sitúan muy cercanos al cero.



Ahora, al aplicar el *nlme* a los datos, encontramos que los efectos aleatorios son

	1	5	7	18	9	13	3	8	19	17
C	-0.003	-0.002	0.0004	-0.0003	-0.002	-0.002	0.004	-0.0008	0.0008	0.001
m	0.288	0.195	0.015	0.045	0.157	0.144	-0.221	0.058	-0.041	-0.091

	15	2	4	6	16	20	14	11	10	12
C	-0.0009	-0.0002	0.003	0.007	-0.001	0.004	0.003	-0.005	-0.003	-0.003
m	0.051	-0.002	-0.205	-0.391	0.044	-0.313	-0.252	0.249	0.136	0.133

y como los efectos fijos del modelo no lineal de efectos mixtos son

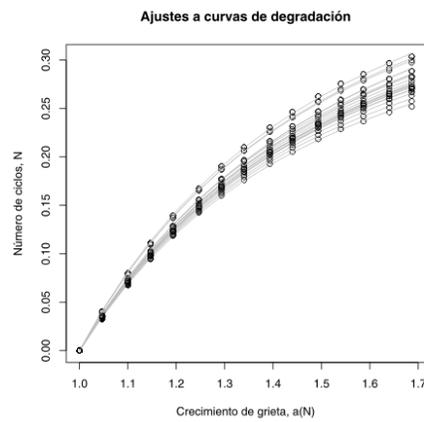
$$C_{fijo} = 0,0192, \quad m_{fijo} = 5,8475,$$

entonces tenemos que los coeficientes C y m correspondientes al *nlme* son

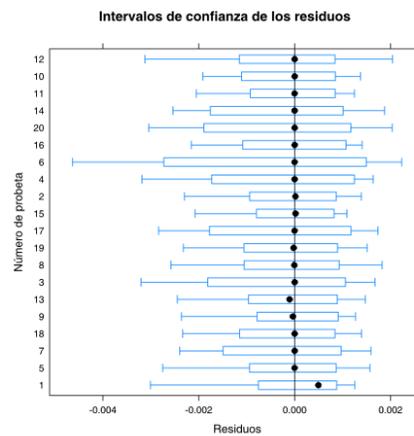
	1	5	7	18	9	13	3	8	19	17
C	0.016	0.017	0.019	0.018	0.017	0.017	0.023	0.018	0.02	0.02
m	6.135	6.042	5.863	5.892	6.004	5.992	5.625	5.905	5.805	5.755

	15	2	4	6	16	20	14	11	10	12
C	0.018	0.019	0.022	0.026	0.017	0.024	0.022	0.014	0.015	0.015
m	5.899	5.845	5.641	5.456	5.892	5.534	5.595	6.096	5.983	5.981

Notemos que a partir de dichos coeficientes obtenemos las curvas de regresión que se muestran a continuación, que son muy parecidas a las obtenidas individualmente en el *nlsList*.

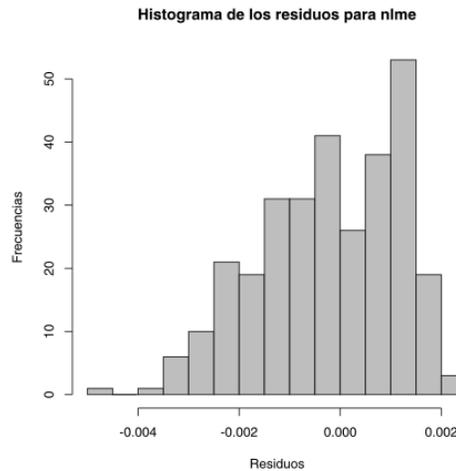


A partir de dichos ajustes, se llega a que los intervalos box-plot de los residuos son como se muestran a continuación



donde claramente las medias de dichos errores están centrados alrededor del cero, el 50 % de los datos se distribuyen intuitivamente asimétricamente en torno a la

media y el resto de los datos tienen una ligera asimetría hacia la izquierda. Sin embargo, como se puede ver en el histograma de residuos en la siguiente figura, aunque éstos realmente están sesgados más a la derecha, poseen una forma que podría asemejarse a una densidad normal centrada en el cero.



Notemos que no hay una diferencia muy grande entre los coeficientes estimados con individualmente por medio de *nlsList* y los coeficientes estimados tomando en cuenta toda la información poblacional por medio del *nlme*, por lo tanto, los modelos entre ambos métodos deben ser muy similares entre sí y ajustarse de forma similar a los datos originales.

4.3. Análisis y comparación de las cuatro muestras

Recordemos ahora que el propósito es analizar los cuatro juegos de datos proporcionados, $A - H25$, $A - L25$, $D - H25$ y $D - L25$. En la subsección anterior se llevaron a cabo los análisis preliminares del grupo de datos $A - H25$; y de forma análoga, al realizar los grupos de datos correspondientes y utilizar el comando *nlsList*, encontramos que para las regresiones individuales (para cada probeta sin considerar los efectos entre probetas), los efectos fijos de C y m para cada grupo son como se muestran en la siguiente tabla:

	Grupo	C	m
1	$A - H25$	0,019	5,8
2	$A - L25$	0,0027	6,4
3	$D - H25$	0,035	5,9
4	$D - L25$	0,0082	6

Ahora, como los efectos aleatorios estimados de C y m para los grupos de datos son como se muestran en el cuadro 4.1, tenemos que los coeficientes aproximados

\hat{C} y \hat{m} para cada grupo son como se muestran en el cuadro 4.2. Notemos que para los modelos *nlsList*, para la población $D - H25$ no pudieron calcularse los parámetros (C, m) para las piezas 2 y 7, pero para los modelos *nlme* sí fue posible el calcularlas, lo cual es más conveniente dado que en lo futuro trabajaremos sólo con los parámetros correspondientes al modelo *nlme*.

No. pieza	A-H25		A-L25		D-H25		D-L25	
	C	m	C	m	C	m	C	m
1	-0.0052	0.44	0.000059	0.034	0.001	0.052	-0.0014	0.2
2	-0.0034	0.28	0.00033	-0.11			0.0032	-0.39
3	0.0003	0.017	0.00016	-0.051	0.00042	0.022	0.015	-1.2
4	-0.00069	0.06	0.00031	-0.12	0.0017	-0.018	0.0017	-0.26
5	-0.003	0.21	0.0001	-0.048	0.0014	-0.011	-0.0015	0.17
6	-0.0029	0.19	0.0015	-0.52	-0.0052	0.2	-0.0023	0.29
7	0.0062	-0.31	-0.000071	0.019			-0.00045	-0.017
8	-0.0013	0.076	-0.00094	0.47	-0.0016	0.058	0.001	-0.22
9	0.00081	-0.049	0.00037	-0.17	-0.0033	0.11	0.000012	-0.086
10	0.0019	-0.11	-0.0003	0.11	0.0047	-0.15	0.0018	-0.31
11	-0.0013	0.066	0.00025	-0.13	0.0051	-0.16	0.0018	-0.32
12	-0.00047	0.00047	0.00052	-0.23	0.0039	-0.13	-0.000019	-0.096
13	0.0036	-0.24	-0.00039	0.14	0.0045	-0.15	-0.000052	-0.1
14	0.0099	-0.51	-0.000033	-0.029	-0.003	0.079	-0.00036	-0.066
15	-0.0016	0.049	0.00063	-0.28	0.0023	-0.089	-0.0033	0.46
16	0.0055	-0.35	-0.000027	-0.036	-0.00028	-0.016	-0.0041	0.67
17	0.0039	-0.27	-0.00051	0.17	-0.0086	0.28	-0.0014	0.074
18	-0.0053	0.25	-0.00093	0.4	-0.0071	0.19	-0.002	0.15
19	-0.0035	0.12	0.0000063	-0.084	-0.0044	0.069	-0.0028	0.31
20	-0.0036	0.1	-0.0011	0.48	0.0085	-0.33	-0.0046	0.75

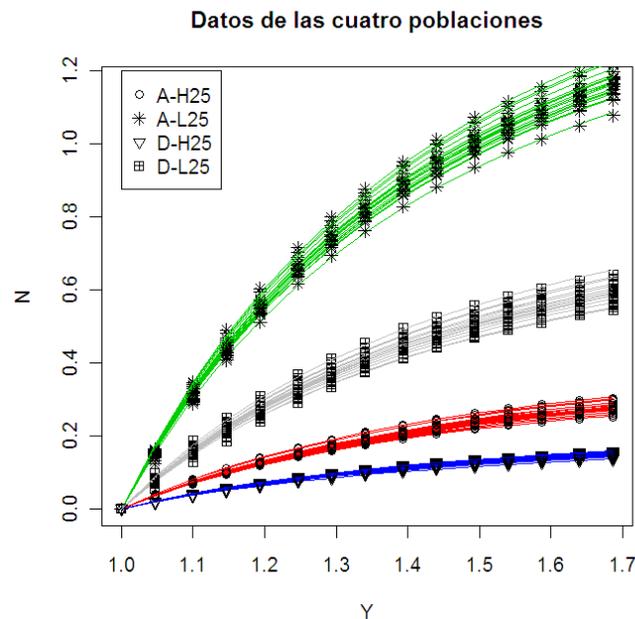
Cuadro 4.1: Efectos aleatorios estimados para C y m para cada uno de los grupos bajo el método *nlsList*.

A partir de dichas tablas tenemos que las gráficas de ajustes para las curvas de degradación correspondientes a $A - H25$, $A - L25$, $D - H25$ y $D - L25$ son

No. pieza	A-H25		A-L25		D-H25		D-L25	
	C	m	C	m	C	m	C	m
1	0.014	6.3	0.0028	6.5	0.036	5.9	0.0069	6.2
2	0.016	6.1	0.0031	6.3	0.031	6.06	0.011	5.6
3	0.02	5.9	0.0029	6.4	0.036	5.9	0.023	4.8
4	0.019	5.9	0.0031	6.3	0.037	5.9	0.0099	5.8
5	0.016	6.1	0.0028	6.4	0.037	5.9	0.0067	6.2
6	0.017	6	0.0043	5.9	0.03	6.1	0.006	6.3
7	0.026	5.5	0.0027	6.5	0.035	5.9	0.0078	6
8	0.018	5.9	0.0018	6.9	0.034	5.9	0.0093	5.8
9	0.02	5.8	0.0031	6.3	0.032	6	0.0082	6
10	0.021	5.7	0.0024	6.6	0.04	5.7	0.01	5.7
11	0.018	5.9	0.003	6.3	0.04	5.7	0.01	5.7
12	0.019	5.8	0.0033	6.2	0.039	5.7	0.0082	5.9
13	0.023	5.6	0.0024	6.6	0.04	5.7	0.0082	5.9
14	0.029	5.3	0.0027	6.4	0.032	5.9	0.0079	6
15	0.018	5.9	0.0034	6.2	0.038	5.8	0.0049	6.5
16	0.025	5.5	0.0027	6.4	0.035	5.9	0.0041	6.7
17	0.023	5.6	0.0022	6.6	0.027	6.1	0.0068	6.1
18	0.014	6.1	0.0018	6.8	0.028	6.1	0.0062	6.2
19	0.016	6	0.0027	6.4	0.031	5.9	0.0054	6.3
20	0.016	5.9	0.0017	6.9	0.044	5.5	0.0036	6.8

Cuadro 4.2: Coeficientes estimados de C y m para cada una de las 20 piezas por medio del método nlsList.

como se muestran en la siguiente figura.



En dicha gráfica se muestran 15 puntos por probeta, y de manera que los puntos de $A - H25$, $A - L25$, $D - H25$ y $D - L25$ se representan por círculos, estrellas, triángulos y cuadrados respectivamente. Las curvas continuas de cuatro intensidades representan sus respectivos ajustes de acuerdo a los parámetros del cuadro 4.2. Como se esperaba, es notorio que los respectivos ajustes a las curvas de crecimiento son en general buenas aproximaciones, y se observa además que cada grupo de probetas difiere en comportamiento de las demás, por lo cual esperaríamos una diferencia en las distribuciones conjuntas de (C, m) para las cuatro distintas muestras.

Ahora, con el propósito de analizar la naturaleza de los estimadores \hat{m} y \hat{C} para cada una de las cuatro poblaciones, comenzamos por indagar a cerca de su distribución conjunta. Dado que m y C son variables continuas que determinan la media del modelo de efectos mixtos no-lineal, una propiedad deseable es que éstas se distribuyeran como una variable normal bivariada, de ahí que realizaremos pruebas de hipótesis para ver si (C, m) cumple con dicha propiedad.

Realizando la prueba de normalidad proporcionada por K. V. Mardia y descrita en el capítulo de Marco teórico, tenemos que si $(C, m) \sim N_2(\mu, \Sigma)$, entonces, asintóticamente, $A = \frac{1}{6}nb_{1,d} \sim \chi_f^2$ y $B = \frac{b_{2,d}-d(d+2)}{[8d(d+2)/n]^{1/2}} \sim N_1(0, 1)$, donde $f = \frac{1}{6}d(d+1)(d+2)$. Como en este caso consideramos $d = 2$, entonces tenemos que $f = 4$. Además, se obtuvieron los siguientes valores de $b_{1,2}$ y $b_{2,2}$, los estimadores de simetría y curtosis, para cada población:

	$A - H25$	$A - L25$	$D - H25$	$D - L25$
$b_{1,2}$	0,49	0,903	0,423	0,844
$b_{2,2}$	6,818	7,719	3,824	7,702

y donde se obtuvieron los siguientes valores de A y B :

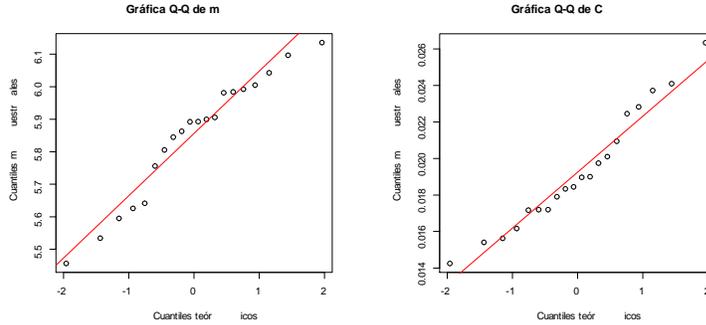
	$A - H25$	$A - L25$	$D - H25$	$D - L25$
A	1,634	3	1,267	2,814
B	-0,66	-0,157	-2,214	-0,166

A partir de dichos resultados, obsérvese que se obtienen los siguientes p-valores correspondientes a $A \sim \chi_4^2$ y $B \sim N(0, 1)$ respectivamente:

	$A - H25$	$A - L25$	$D - H25$	$D - L25$
A	0,197	0,443	0,133	0,411
B	0,254	0,437	0,013	0,434

De estos resultados podemos ver que los p-valores son bastante grandes excepto para la población $D - H25$, de forma que salvo dicho caso, no se encuentra suficiente evidencia para rechazar las hipótesis de normalidad. Para el caso de $D - H25$ realizamos un análisis exploratorio, y observamos que las gráficas Q-Q marginales

de m y C son de la siguiente forma



y la matriz de varianzas y covarianzas de C y m estimada está dada por

$$S = \begin{pmatrix} 1,4e^{-5} & -4,6e^{-4} \\ -4,6e^{-4} & 0,017 \end{pmatrix},$$

de forma que, como la correlación entre C y m es casi cero, y las gráficas Q-Q respectivas muestran un indicio de normalidad marginal, entonces tenemos indicios de que la distribución conjunta de (C, m) podría ser normal bivariada. Por esta razón, en adelante consideraremos a $(C, m) \sim N_2(\mu, \Sigma)$ para las cuatro poblaciones por razones prácticas.

Una vez que podemos suponer la binormalidad de los parámetros, nuestro próximo objeto de interés es el discernir si dichas variables (C, m) comparten la misma media y matriz de varianzas y covarianzas para cada par de poblaciones. Dado que desconocemos aún la naturaleza de las matrices de varianzas y covarianzas para cada población, haremos una prueba de homogeneidad de medias suponiendo que dichas matrices de dispersión no son iguales, teniendo en cuenta que los tamaños de muestra son de 20 datos por cada población.

Una prueba de hipótesis razonable para nuestro caso particular es la prueba de Bennett presentada anteriormente, que considera la diferencia de tamaños de muestra y la falta de homocedasticidad. Recordemos que en esta prueba usamos el estadístico

$$\kappa = (\bar{v} - \bar{w})^T \left(\frac{1}{n_1} S_1 + \frac{1}{n_2} S_2 \right)^{-1} (\bar{v} - \bar{w})$$

y comparamos contra un valor calculable

$$k_\alpha = \chi_2^2(\alpha) [A + B\chi_2^2(\alpha)],$$

donde v_1, \dots, v_{n_1} y w_1, \dots, w_{n_2} son las dos muestras a tratar.

Considerando A y B como se describió anteriormente, y tomando el valor $\alpha = 0,05$, obtenemos los siguientes valores de A , B , k_α y κ para las comparaciones

entre cada población, los cuales se muestran en la siguiente tabla de resultados:

Comparaciones	A	B	k_α	κ
$A - H25$ y $A - L25$	1,052	0,037	7,635	146,537
$A - H25$ y $D - H25$	1,028	0,02	6,869	752,697
$A - H25$ y $D - L25$	1,045	0,032	7,419	200,508
$A - L25$ y $D - H25$	1,058	0,041	7,829	1510,411
$A - L25$ y $D - L25$	1,054	0,038	7,692	16,327
$D - H25$ y $D - L25$	1,026	0,019	6,822	1723,023

Nótese que en cada uno de los casos considerados, siempre tenemos que $k_\alpha < \kappa$, y como k_α es el valor crítico superior de nivel α , entonces tenemos que en todos los casos se rechaza la hipótesis de igualdad de medias para cada par de poblaciones.

Bajo estos resultados, tenemos fuerte evidencia de que las variables 2-dimensionales (C, m) para las distintas poblaciones no comparten entre sí los valores de su media, de forma que nuestro siguiente propósito, el de estudiar su homogeneidad de varianzas, debe considerar este relevante hecho. Así pues, para cada par de poblaciones y considerando que $(C_i, m_i) \sim N_2(\mu_i, \Sigma_i)$ para $i = 1, 2, 3, 4$, realizaremos la prueba F propuesta por Box para la hipótesis nula $H_0 : \Sigma_i = \Sigma_j$ para cada $i, j = 1, 2, 3, 4$ y $i \neq j$, y la hipótesis alternativa $H_1 : \Sigma_i \neq \Sigma_j$ para cada $i, j = 1, 2, 3, 4$. Notemos que esta prueba tiene la propiedad de no asumir igualdad de medias entre las cuatro muestras, por lo cual nos resulta particularmente útil, y dado que se basa en el estadístico $-2b \log M$, que tiene una distribución aproximada F_{ν_1, ν_2} , siempre y cuando el par de constantes c_1 y c_2 cumplan que $c_2 - c_1^2 > 0$. Debido a esto calculamos dichos valores y observamos que $c_1 = 0,057$ y $c_2 = 0,004$, obteniendo así que $c_2 - c_1^2 = 0,0009 > 0$. De esta forma hemos comprobado que el estadístico $-2b \log M$ es el apropiado, y procedemos a mostrar en la siguiente tabla los valores obtenidos de M , $-2b \log M$ y el p-valor correspondiente a la distribución F_{ν_1, ν_2} , considerando $\alpha = 0,05$:

Comparaciones	M	$-2b \log M$	$p - \text{valor}$
$A - H25$ y $A - L25$	$1,98e^{-209}$	270,568	$7,28e^{-164}$
$A - H25$ y $D - H25$	$9,092e^{-7}$	8,707	$9,28e^{-6}$
$A - H25$ y $D - L25$	$4,538e^{-192}$	276,816	$2,1e^{-167}$
$A - L25$ y $D - H25$	$4,37e^{-206}$	295,996	$1,16e^{-176}$
$A - L25$ y $D - L25$	Indefinido	Indefinido	Indefinido
$D - H25$ y $D - L25$	$1,91e^{-188}$	270,569	$1,49e^{-162}$

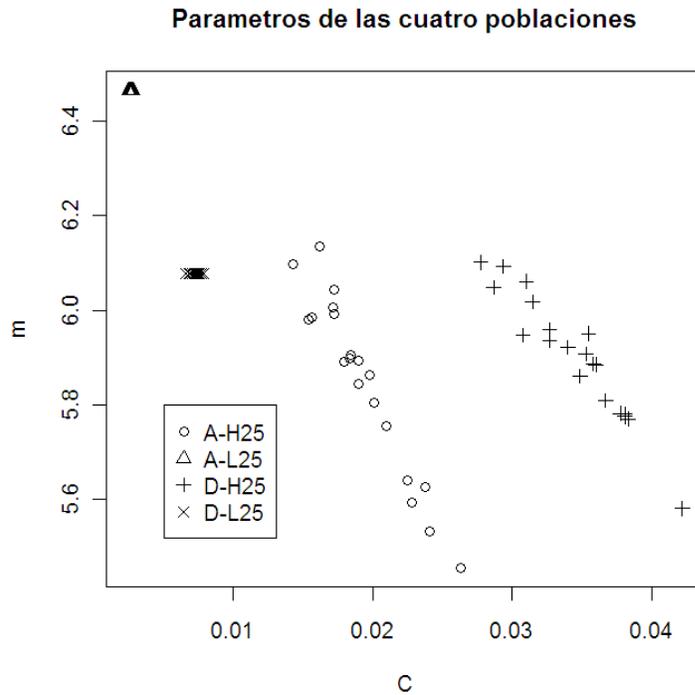
donde se obtiene que $b = 0,314$. Notemos que para la comparación entre $A - L25$ y $D - L25$, el valor de M es indefinido y por lo tanto el resto de los resultados lo son igualmente; esto se debe a que cuando se calculan los determinantes tanto de Q_i como de $\sum_i Q_i$, éstos son tan pequeños que al elevarlos a la potencia $f_i/2$ y

$f/2$ respectivamente, el numerador y el denominador en la expresión

$$M = \frac{\prod_{i=1}^I |Q_i|^{f_i/2} f^{dn/2}}{\left| \sum_{i=1}^I Q_i \right|^{f/2} \prod_{i=1}^I f_i^{df_i/2}},$$

se vuelven simultáneamente cero, ocasionando así el valor indefinido.

Aún así, podemos observar que en general las hipótesis de homogeneidad de varianzas se rechazan para todos los demás casos, pues los p-valores resultan ser muy pequeños. Bajo los resultados de las tres pruebas de hipótesis, tenemos evidencia suficiente para creer que las variables bivariadas (C, m) se distribuyen como normales bivariadas, y que, para cada población, poseen una media y matriz de varianzas y covarianzas distintas. En la siguiente gráfica se muestran los parámetros C contra los parámetros m para las cuatro poblaciones.



Una vez que se observa la gráfica de los parámetros, es intuitivamente clara la diferencia de distribuciones entre las variables (C, m) en cada población, y que a pesar de que las varianzas pudieran parecer similares para $A - L25$ y $D - L25$, y al mismo tiempo de $A - H25$ y $D - H25$, las pruebas realizadas nos indican lo contrario con una evidencia bastante fuerte.

CAPÍTULO 5

CONCLUSIONES

Al realizar las primeras exploraciones de los datos de crecimiento de grietas para las cuatro poblaciones de probetas, se observa que como conjunto las curvas de crecimiento tienen un comportamiento similar entre los datos de cada población y es claro que el comportamiento del crecimiento de grieta es no-lineal. Más aún, al observar las gráficas notamos dos cosas: primero, que aquellas piezas a las cuales se les aplica una carga cuya varianza σ_c es mayor, tienden a tener una menor dispersión entre las curvas de crecimiento de grieta, y segundo, las piezas cuyas cargas poseían un valor de ε más cercano a cero (es decir, una mayor irregularidad en el proceso de cargas), y que en este caso eran $A - H25$ y $A - L25$, tienen una curva de crecimiento de grieta con una curvatura más pronunciada que sus recíprocos $D - H25$ y $D - L25$ respectivos, de menor irregularidad.

Ahora, al aplicar el modelo de Páris para la media de los modelos no-lineales de efectos mixtos, encontramos que los parámetros resultantes (C, m) producen curvas de crecimiento muy similares a las originales en cada una de las poblaciones. Tal precisión en los ajustes revela que a pesar de la simplicidad de la función de Páris, ésta posee una gran versatilidad en cuanto al rango de curvaturas para modelos de crecimientos de grietas y no parece haber una necesidad de recurrir a una función más compleja para lograr un buen ajuste.

Una importante sutileza que se encontró durante la experimentación con el método de modelos no-lineales de efectos mixtos, es que el software proporcionado en el lenguaje de programación R es muy sensible a valores pequeños de las muestras a considerar. En nuestro caso se soluciona de forma muy simple al aplicar una transformación logarítmica de ambos lados de la ecuación de Páris antes de aplicar el $nlme$, de forma que los parámetros estimados obtenidos de dicha ecuación son los mismos parámetros que se encontrarían sin la necesidad de aplicar la función logarítmica. Adicionalmente, al analizar los residuos correspondientes al modelo de $nlme$ aplicado a la población $A - H25$, observamos que los residuos sí tienden a centrarse en torno al cero y que la distribución de los mismos puede llegar a asemejarse a una densidad normal, pero sí existe un cierto sesgo a la derecha. Sin embargo, es importante recordar que los modelos no lineales de efectos mixtos tienen cierto nivel de robusticidad a las violaciones de supuestos de normalidad y varianza, por lo cual los modelos pueden, aún bajo las consideraciones de sesgo, ser bastante adecuadas para los datos tratados.

Una vez que se obtuvieron los parámetros estimados para cada una de las cuatro poblaciones, se notó que los grupos de (C, m) son muy parecidos entre sí

para cada población, al grado de que para las poblaciones $A-L25$ y $D-L25$ varían muy poco en cada una, sobre todo en el parámetro m . Sin embargo, una vez que se observan los ajustes a las curvas de crecimiento de grieta correspondientes a cada grupo de estimadores de (C, m) , notamos que cuanto menor es la dispersión de los parámetros, mayor es la dispersión entre las curvas correspondientes. Al realizar algunos experimentos con los parámetros, se observó que cuando se tiene poca variación de C y algo de variación de m , las curvas tienen una mayor dispersión que cuando ambos parámetros tienen una mayor variación. Lo análogo sucede cuando m posee poca variación y C tiene incluso poca dispersión. Por otra parte, observamos que las poblaciones cuya dispersión de los parámetros (C, m) es mayor son $A-H25$ y $D-H25$ que son, a su vez, las poblaciones cuyas piezas fueron sometidas a procesos de cargas con mayor varianza σ_c , y en las cuales las curvas de crecimiento son menos variables entre sí. Esto podría ser un indicio de que los parámetros (C, m) simulan de cierta forma la variabilidad del proceso de carga, y que cuanto mayor sea la varianza del mismo, la grieta de las piezas de dicha población tiende a crecer de forma más homogénea entre las piezas.

Por otra parte, al aplicar las tres pruebas de hipótesis a los parámetros: de normalidad, de homogeneidad de medias y de homocedasticidad, encontramos gran evidencia de que los grupos $A-H25$, $A-L25$ y $D-L25$ son tales que los parámetros (C, m) se distribuyen como binormales; y para el caso de $D-H25$, también existen indicios al respecto a pesar de que una de las pruebas simultáneas rechaza dicha hipótesis. Más aún, se obtuvo fuerte evidencia para creer que las variables (C, m) no comparten la misma media ni la misma varianza entre las cuatro poblaciones, tal como se intuye una vez que se observa la gráfica de los parámetros C contra los parámetros m . En dicha gráfica es notorio que los cuatro grupos se encuentran segregados unos de otros y que sus formas en efecto difieren igualmente. En el caso de la prueba de hipótesis de homocedasticidad para la comparación entre $A-L25$ y $D-L25$, como el estadístico M para la prueba F no puede ser calculado, sería conveniente que, dada la oportunidad, se lleve a cabo otra prueba de homocedasticidad o comparaciones gráficas para analizar más a fondo este caso.

A raíz de las estimaciones y pruebas llevadas a cabo, tenemos fuerte evidencia de que las diferencias entre varianzas del proceso de cargas, así como las diferencias de regularidad, influyen directamente en la velocidad del crecimiento de las grietas en las probetas. En estos datos se muestra claramente que el tamaño de la grieta aumenta más rápido (sobre todo considerando que realmente N está en la escala de 10000 ciclos) cuando la varianza del proceso de cargas σ_c es grande y a su vez el valor de ε es más grande, es decir, cuando el nivel de regularidad del proceso es mayor y por ende la cantidad de picos del proceso y la de veces que atraviesa la media son más parecidos. Este es el caso del conjunto de datos $D-H25$, donde además se observa en la gráfica de los parámetros que la dispersión con respecto al parámetro C es la más grande de las correspondientes a las cuatro poblaciones.

Conversamente, se observa que la velocidad de crecimiento de la grieta en las probetas es menor en la población $A - L25$, que es cuando el nivel de regularidad del proceso de cargas es más pequeño y a su vez cuando la varianza del mismo proceso es también pequeño. De manera similar, se observa que en este caso es cuando se observa la menor dispersión de los parámetros C de los cuatro conjuntos distintos de datos.

Finalmente, a raíz de las pruebas realizadas podemos concluir con una evidencia bastante fuerte que las variaciones del nivel de regularidad y de varianza del proceso de cargas sí influyen directamente la velocidad de crecimiento de grieta en las probetas. Un análisis que podría ser interesante en lo futuro sería el estudiar la relación existente entre los parámetros de la ecuación de París, (C, m) , y las dispersiones entre las curvas de crecimiento, así como el indagar a cerca del análisis que podría realizarse mediante la teoría en Confiabilidad de Pruebas de vida acelerada.

CAPÍTULO 6

APÉNDICE

6.1. Apéndice A: descomposiciones ortogonales-trianguulares

Los métodos de *descomposiciones ortogonales-trianguulares* para matrices rectangulares son usualmente preferibles en métodos numéricos para resolver problemas de mínimos cuadrados; también pueden ser llamados *descomposiciones QR*, pues la descomposición a menudo se escribe como

$$X = Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} = Q_t R,$$

donde X es una matriz $n \times p$ ($n \geq p$) de rango p , Q es una matriz $n \times n$ y ortogonal, R es una matriz de tamaño $p \times p$ y triangular superior, y Q_t (Q -truncado) consiste de las primeras p columnas de Q . Cuando decimos que Q es *ortogonal*, significa que $Q^T Q = Q Q^T = I$. Esto implica en particular que $Q_t^T Q_t = I$.

Una propiedad importante de las matrices ortogonales es que preservan normas de vectores bajo multiplicación, ya sea por Q o por Q^T . Es decir, la transformación representada por Q es una generalización de la rotación o reflexión en el plano. En particular,

$$\|Q^T y\|^2 = (Q^T y)^T Q^T y = y^T Q Q^T y = y^T y = \|y\|^2.$$

Si aplicamos esto al vector residual en un problema de mínimos cuadrados, obtenemos

$$\begin{aligned} \|y - X\beta\|^2 &= \|Q^T(y - X\beta)\|^2 \\ &= \|Q^T y - Q^T X\beta\|^2 \\ &= \left\| c - Q^T Q \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \beta \right\|^2 \\ &= \left\| c - \begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} \beta \right\|^2 = \|c_1 - R\beta\|^2 + \|c_2\|^2, \end{aligned}$$

donde $c = (c_1^T c_2^T)^T = Q^T y$ es el vector residual rotado. Los componentes c_1 y c_2 son de longitudes p y $n - p$ respectivamente.

6.2. APÉNDICE B: EVALUACIÓN DE LA FUNCIÓN DE VEROSIMILITUD MEDIANTE DESCOMPOSICIONES

Dado que X tiene rango p , la matriz R de tamaño $p \times p$ es no-singular y triangular superior. La solución por mínimos cuadrados de $\hat{\beta}$ se evalúa fácilmente como la solución a

$$R\hat{\beta} = c_1$$

y la suma de cuadrados residual es $\|c_2\|^2$. Nótese que la suma de cuadrados residual puede evaluarse sin tener que calcular $\hat{\beta}$.

6.2. Apéndice B: Evaluación de la función de verosimilitud mediante descomposiciones matriciales

Según el modelo lineal de efectos mixtos, tomamos una descomposición ortogonal-triangular de la matriz de diseño aumentada \tilde{Z}_i como

$$\tilde{Z}_i = Q_i \begin{bmatrix} R_{11(i)} \\ 0 \end{bmatrix},$$

donde $Q_{(i)}$ es una matriz de dimensiones $(n_i + q) \times (n_i + q)$, y $R_{11(i)}$ es una matriz de dimensiones $q \times q$; entonces

$$\begin{aligned} \left\| \tilde{y}_i - \tilde{X}_i\beta - \tilde{Z}_i b_i \right\|^2 &= \left\| Q_{(i)}^T \left(\tilde{y}_i - \tilde{X}_i\beta - \tilde{Z}_i b_i \right) \right\|^2 \\ &= \left\| c_{1(i)} - R_{10(i)}\beta - R_{11(i)}b_i \right\|^2 + \left\| c_{0(i)} - R_{00(i)}\beta \right\|^2, \end{aligned}$$

donde la matriz $R_{10(i)}$ es de dimensión $q \times p$, $R_{00(i)}$ es de dimensión $n_i \times p$, el vector $c_{1(i)}$ es de tamaño q y el vector $c_{0(i)}$ es de tamaño n_i y están definidos como

$$\begin{bmatrix} R_{10(i)} \\ R_{00(i)} \end{bmatrix} = Q_{(i)}^T \tilde{X}_i \text{ y } \begin{bmatrix} c_{1(i)} \\ c_{0(i)} \end{bmatrix} = Q_{(i)}^T \tilde{y}_i.$$

La forma peculiar de numerar todos los elementos para las submatrices y vectores se diseñó de esta forma para permitir una extensión simple al caso de efectos aleatorios de más de un nivel.

Otra manera de considerar estas matrices es como componentes en una descomposición ortogonal-triangular de una matriz aumentada

$$\begin{bmatrix} Z_i & X_i & y_i \\ \Delta & 0 & 0 \end{bmatrix} = Q_{(i)} \begin{bmatrix} R_{11(i)} & R_{10(i)} & c_{1(i)} \\ 0 & R_{00(i)} & c_{0(i)} \end{bmatrix},$$

donde la reducción a forma triangular se detiene después de las primeras q columnas.

CAPÍTULO 7

REFERENCIAS

BIBLIOGRAFÍA

- [1] "Mixed-Effects Models in S and S-PLUS", José C. Pinheiro, Douglas M. Bates, ed. Springer, 2000.

- [2] "Statistical Methods for Reliability Data", William Q. Meeker, Luis A. Escobar, Ed. Jhon Wiley and Sons, 1998.

- [3] "A Unified Statistical methodology for Modeling Fatigue Damage", Enrique Castillo, Alfonso Fernández-Canteli, Ed. Springer, 2009.

- [4] "Random fatigue: from data to theory", K. Sobczyk, B.F. Spencer, Jr., Ed. Academic Press, 1992.

- [5] "Stochastic Models for Fatigue Damage of Materials", K. Sobczyk, Polish Academy of Sciences, 1987.

- [6] "Variabilidad en el Crecimiento de Grietas por Fatiga bajo Cargas Aleatorias", Maria Belén Moreno Morales, Tesis de doctorado, Universidad de Málaga, 2002.

- [7] "Linear Mixed Models", Jhon Fox, S-PLUS Companion to Applied Regression, 2002.

- [8] "Metal Fatigue in Engineering", Ralph I. Stephens, Ali Fatemi, Robert R. Stephens, Henry O. Fuchs, Ed. Wiley Inter-Science, 2nd. edition, 2001.

- [9] "Fatigue Handbook, Offshore steel structures", A. Almar Naes et. al., Ed. Tapir, 1999.

- [10] "Multivariate Observations", G. A. F. Seber, Ed. John Wiley & Sons, 1984.

- [11] "Applied Multivariate Statistical Analysis", W. Härdle, L. Simar, Ed. Springer, 2nd. edition, 2007.

- [12] "An Introduction to Multivariate Statistical Analysis", T. W. Anderson, Ed. John Wiley & Sons, 1958.

- [13] "Methods of Multivariate Analysis", Alvin. C. Rencher, Ed. Jhon Wiley & Sons, 1995.