第一节 全面试验的方差分析

设Y与自变量（因素）$X_1, \cdots, X_p$的关系为

$$Y = f\left(X_1, \cdots, X_p\right) + \varepsilon$$

● 在此，我们不关心f的形式，也不假设其（近似）为线性函数，而是在每个因素X_i仅取有限个值时，利用统计方法找到其（某个）组合，使得Y的期望达到最大（最小）。

● 也希望判断$X_1, \cdots, X_p$中，哪些对Y有显著影响，哪些没有。

● 当$p = 2$时，格子点方法，一般安排重复试验。

● p较大时，一般$X_1, \cdots, X_p$的所有取值可能太多，只能安排部分试验，重复试验?

若X_i有s_i个水平，则共有$s_1 \times \cdots \times s_p$个试验，若还安排重复试验?

● 如何安排部分试验？如何分析实验数据，是试验设计的重点问题。

第一节 全面试验的方差分析

本节讨论$p=1$、2的情形，全面试验，有重复。

一、单因素试验的方差分析

设仅有一个因素A，可取s个水平$A_1, \cdots, A_s$（$s \geq 2$）。目标：判断因素A对指标Y是否有影响？如有，哪个水平最好？

对每个水平均安排r次重复试验，设第i个水平的第j次试验结果为Y_{ij}，则模型为：

$$Y_{ij} = \mu_i + e_{ij} \qquad (i = 1, \cdots, s, \ j = 1, \cdots, r)$$

模型假设为$\{e_{ij}\}$相互独立同分布，共同分布为$N(0, \sigma^2)$，其中σ^2未知。

待检验的假设为

$$H_0: \mu_1 = \cdots = \mu_s$$

第一节 全面试验的方差分析

- 当$s=2$时，问题为两个正态总体的假设检验，第三章已给出标准方法。

- 当$s\geq 2$时，还可用方差分析的方法。

记$\bar{Y}_{i\cdot}=\frac{1}{r}\sum_{j=1}^{r}Y_{ij}$为在水平$i$下，样本$Y$的均值，

$\bar{Y}(=\bar{Y}_{\cdot\cdot})=\frac{1}{rs}\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}Y_{ij}=\frac{1}{s}\sum_{i=1}^{s}\bar{Y}_{i\cdot}$为总平均。

直观上，当H_0成立时，因为$\bar{Y}_{i\cdot}$是μ_i的无偏估计，且后者全相等，故$\bar{Y}_{1\cdot},\cdots,\bar{Y}_{s\cdot}$与$\bar{Y}$应相差不大，即所有$Y_{ij}$偏离$\bar{Y}$均由于随机误差。

Y的总变差有分解式:

$$S_T=\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}\left(Y_{ij}-\bar{Y}\right)^2=\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}\left[\left(Y_{ij}-\bar{Y}_{i\cdot}\right)+\left(\bar{Y}_{i\cdot}-\bar{Y}\right)\right]^2$$

$$=\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}\left(Y_{ij}-\bar{Y}_{i\cdot}\right)^2+\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}\left(\bar{Y}_{i\cdot}-\bar{Y}\right)^2+2\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}\left(Y_{ij}-\bar{Y}_{i\cdot}\right)\left(\bar{Y}_{i\cdot}-\bar{Y}\right)$$

$$=\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}\left(Y_{ij}-\bar{Y}_{i\cdot}\right)^2+r\sum_{i=1}^{s}\left(\bar{Y}_{i\cdot}-\bar{Y}\right)^2=:S_e+S_A$$

第一节 全面试验的方差分析

无论H_0成立与否，$S_e=\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}\left(Y_{ij}-\overline{Y}_{i\cdot}\right)^2$总是随机误差方差$\sigma^2$大小的刻画；而$S_A=r\sum_{i=1}^{s}(\overline{Y}_{i\cdot}-\overline{Y})^2$则刻画了因素$A$对$Y$的影响。

当H_0成立时，S_A相对于S_e应较小，故检验统计量取为：

$$F=\frac{S_A/(s-1)}{S_e/s(r-1)}$$

自由度的解释（从χ^2分布角度）……

证明（H_0成立时，$F\sim F(s-1,s(r-1))$）：

引入变量$x_i=\begin{cases}1 & \text{当因素}A\text{取水平}A_i\\ 0 & \text{否则}\end{cases}$，记

$Y=(Y_{11},Y_{12},\cdots,Y_{sr})'_{sr\times1}$，$E_r=(1,\cdots,1)'_r$，$e=(e_{11},e_{12},\cdots,e_{sr})'_{sr\times1}$，

第一节 全面试验的方差分析

$$X=\begin{pmatrix} E_r & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & E_r \end{pmatrix}_{sr\times s}$$，$\mu=(\mu_1,\cdots,\mu_s)'$，则模型为

$$Y=X\mu+e$$

又令$W=\mu(X)$，易知$dim(W)=s$。

记$H=\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & \cdots & 0 \\ & \cdots & & \cdots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 \end{pmatrix}$，则$H_0: H\mu=0$。

再记$W_0=\{\eta=X\mu: H\mu=0, \mu\in R^s\}$，则$dim(W_0)=1$。

对照第四章定理4.1，我们有

$$\| Y-\hat{\xi} \|^2=\| Y-X\hat{\mu} \|^2=\| Y-X(\bar{Y}_{1\cdot},\cdots,\bar{Y}_{s\cdot})' \|^2$$

$$=\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}\left(Y_{ij}-\bar{Y}_{i\cdot}\right)^2=S_e$$

$$\| \hat{\xi}-\hat{\xi}_0 \|^2=\| X\hat{\mu}-X\hat{\mu}_0 \|^2=\| X(\hat{\mu}-\hat{\mu}_0) \|^2$$

$$=\| X\begin{pmatrix} \bar{Y}_{1\cdot}-\bar{Y} \\ \\ \bar{Y}_{s\cdot}-\bar{Y} \end{pmatrix} \|^2=r\sum_{i=1}^{s}(\bar{Y}_{i\cdot}-\bar{Y})^2=S_A$$

第一节 全面试验的方差分析

最后研究自由度：定理4.1中的$\tilde{n}=sr$，$\tilde{r}=s$，$\tilde{q}=1$，故而

$$F=\frac{S_A/(s-1)}{S_e/s(r-1)}\sim F(s-1,\ s(r-1))$$

证毕。

● 另一种直观证明：对任意固定的$1\le i\le s$，利用第二章定理3.3，得

$$\overline{Y}_{i\cdot}\sim N\left(\mu_i,\ \frac{\sigma^2}{r}\right),\qquad \frac{1}{\sigma^2}\sum_{j=1}^{r}\left(Y_{ij}-\overline{Y}_{i\cdot}\right)^2\sim\chi^2(r-1)$$

且相互独立。再利用不同的i间的独立性，故而

$$\sum_{i=1}^{s}\frac{1}{\sigma^2}\sum_{j=1}^{r}\left(Y_{ij}-\overline{Y}_{i\cdot}\right)^2=\frac{1}{\sigma^2}S_e\sim\chi^2(s(r-1))$$

当H_0成立时，对$\overline{Y}_{1\cdot},\cdots,\overline{Y}_{s\cdot}$再次利用第二章定理3.3，得

$$\frac{1}{\sigma^2/r}\sum_{i=1}^{s}(\overline{Y}_{i\cdot}-\overline{Y})^2=\frac{1}{\sigma^2}S_A\sim\chi^2(s-1)$$

且仍有独立性，故$F\sim F(s-1,\ s(r-1))$，证毕。

第一节 全面试验的方差分析

例1.（教材P226，例1.2）

解：在此例中，设$H_0: \mu_1 = \mu_2 = \mu_3$。

此时$s = 3$，$r = 10$，$\overline{Y}_{1\cdot} = 1055$，$\overline{Y}_{2\cdot} = 1041$，$\overline{Y}_{3\cdot} = 1088$，

因此，$S_A = \cdots = 11675$，$S_e = \cdots = 5569$。又$s - 1 = 2$， $s(r - 1) = 27$，

所以$F = \frac{11675/2}{5569/27} \approx 28.3$。

查表，当$\alpha = 0.05$时，$\lambda = 3.35$；当$\alpha = 0.01$时，$\lambda = 5.49$。

故否定H_0，即认为三种饲料效果显著不同。显然，第三种最好。

● 习惯上，若在0.05水平否定H_0，称“显著不同”；若在0.01水平否定H_0，称“高度显著不同”。

● 实际操作人员常使用方差分析表（ANOVA，analysis of variance）：

第一节 全面试验的方差分析

ANOVA

来源	平方和	自由度	F值	显著性
因素A	$S_A = r\sum_{i=1}^{s}(\bar{Y}_{i\cdot}-\bar{Y})^2$	$s-1$	$\dfrac{S_A/(s-1)}{S_e/s(r-1)}$	
误差	$S_e = \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}(Y_{ij}-\bar{Y}_{i\cdot})^2$	$s(r-1)$		
总和	$S_T = \sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{r}(Y_{ij}-\bar{Y})^2$	$sr-1$		

对于例1，ANOVA为：

来源	平方和	自由度	F值	显著性
A	11675	2	28.3	**
误差	5569	27		
总和	17244	29		

第一节 全面试验的方差分析

● “显著*”、“高度显著**”分别对应5%、1%，历史原因。

●方差分析表在回归分析中也常用。

● 若$s=2$，第三章的方法与本章方法是否一样？哪个好？

● 请思考并推导：当因素A的各不同水平中，试验重复次数不同时，结论可否推广？如何证明？

二、两因素试验的方差分析

设因素A有s个水平，因素B有t个水平，对$s\times t$种组合中的任一种A_iB_j，都安排了r次试验，数据为$y_{ij1},\cdots,y_{ijr}$（$1\le i\le s,1\le j\le t$）。则模型为

$$Y_{ijk}=\mu_{ij}+e_{ijk}\qquad (1\le i\le s,1\le j\le t,1\le k\le r)$$

第一节 全面试验的方差分析

其中μ_{ij}为Y_{ijk}的期望，e_{ijk}为随机误差，皆相互独立，共同分布为$N(0, \sigma^2)$（σ^2未知）。

我们共有$st+1$个未知参数。这时，假设检验问题的提法一般不是期望是否全相等，而是分为：

① 因素A对Y有无影响；

② 因素B对Y有无影响；

③ 是否存在A与B的交互作用。

● 画图说明3种情况……

为便于做上述检验，做参数变换

$$\mu = \frac{1}{st}\sum_{i=1}^{s}\sum_{j=1}^{t}\mu_{ij}, \qquad \alpha_i = \frac{1}{t}\sum_{j=1}^{t}\mu_{ij} - \mu$$

$$\beta_j = \frac{1}{s}\sum_{i=1}^{s}\mu_{ij} - \mu, \qquad \lambda_{ij} = \mu_{ij} - \alpha_i - \beta_j - \mu$$

第一节 全面试验的方差分析

称$\{\alpha_i\}_{i=1}^{s}$为因素A的主效应；$\{\beta_j\}_{j=1}^{t}$为因素B的主效应；$\{\lambda_{ij}\}$为A与B的交互作用。容易验证，

$$\sum_{i=1}^{s}\alpha_i=\sum_{j=1}^{t}\beta_j=\sum_{i=1}^{s}\lambda_{ij}=\sum_{j=1}^{t}\lambda_{ij}=0$$

故新参数需满足上约束条件，新参数空间的维数（独立参数的个数）为：

$$1(\mu)+(s-1)(\alpha_i)+(t-1)(\beta_j)+(st-s-t+1)(\lambda_{ij})+1(\sigma^2)=st+1$$

与变换前一致。

参数变换后，模型可表示为：

$$Y_{ijk}=\mu+\alpha_i+\beta_j+\lambda_{ij}+e_{ijk}$$

待检验的假设为：

$$H_1:\ \alpha_1=\cdots=\alpha_s=0$$
$$H_2:\ \beta_1=\cdots=\beta_t=0$$
$$H_3:\lambda_{11}=\cdots=\lambda_{st}=0$$

第一节 全面试验的方差分析

定义

$$\bar{Y}_{ij\cdot} = \frac{1}{r}\sum_{k=1}^{r} Y_{ijk}$$

$$\bar{Y}_{i\cdot\cdot} = \frac{1}{tr}\sum_{j=1}^{t}\sum_{k=1}^{r} Y_{ijk} = \frac{1}{t}\sum_{j=1}^{t}\bar{Y}_{ij\cdot}$$

$$\bar{Y}_{\cdot j\cdot} = \frac{1}{sr}\sum_{i=1}^{s}\sum_{k=1}^{r} Y_{ijk} = \frac{1}{s}\sum_{i=1}^{s}\bar{Y}_{ij\cdot}$$

$$\bar{Y} = \bar{Y}_{\cdots} = \frac{1}{str}\sum_{ijk} Y_{ijk} = \frac{1}{s}\sum_{i=1}^{s}\bar{Y}_{i\cdot\cdot} = \frac{1}{t}\sum_{j=1}^{t}\bar{Y}_{\cdot j\cdot} = \frac{1}{st}\sum_{ij}\bar{Y}_{ij\cdot}$$

则相应的平方和分解式如下：

$$S_T = \sum_{ijk}\left(Y_{ijk} - \bar{Y}\right)^2$$

$$= \sum_{ijk}\left[\left(Y_{ijk} - \bar{Y}_{ij\cdot}\right) + \left(\bar{Y}_{ij\cdot} - \bar{Y}_{i\cdot\cdot} - \bar{Y}_{\cdot j\cdot} + \bar{Y}\right) + \left(\bar{Y}_{i\cdot\cdot} - \bar{Y}\right) + \left(\bar{Y}_{\cdot j\cdot} - \bar{Y}\right)\right]^2$$

$$= \sum_{ijk}\left(Y_{ijk} - \bar{Y}_{ij\cdot}\right)^2 + r\sum_{ij}\left(\bar{Y}_{ij\cdot} - \bar{Y}_{i\cdot\cdot} - \bar{Y}_{\cdot j\cdot} + \bar{Y}\right)^2$$

$$+t\cdot r\sum_{i}(\bar{Y}_{i\cdot\cdot} - \bar{Y})^2 + s\cdot r\sum_{j}\left(\bar{Y}_{\cdot j\cdot} - \bar{Y}\right)^2 =: S_e + S_{A\times B} + S_A + S_B$$

第一节 全面试验的方差分析

● 平方展开时，交叉乘积项皆为0。

从直观上看，无论H_1、H_2或H_3是否成立，S_e永远是对σ^2的刻画；

S_A、S_B和$S_{A\times B}$分别刻画了因素A的主效应、因素B的主效应、以及A与B的交互作用，对Y的总偏差S_T的影响大小。

当H_1成立时，相对于S_e，S_A应较小；H_2、H_3成立时类似。

相关检验统计量及其假设成立时的分布为：

$$F_1=\frac{S_A/(s-1)}{S_e/st(r-1)}\sim F\big(s-1,\ st(r-1)\big)$$

$$F_2=\frac{S_B/(t-1)}{S_e/st(r-1)}\sim F\big(t-1,\ st(r-1)\big)$$

$$F_3=\frac{S_{A\times B}/(s-1)(t-1)}{S_e/st(r-1)}\sim F\big((s-1)(t-1),\ st(r-1)\big)$$

第一节 全面试验的方差分析

- 上述关于分布的结论无相关性，可分别独立进行。
- 证明方法：与单因素方法类似，均利用第四章定理4.1，具体省略。
- 检验方法：计算检验统计量，查表……
- 方差分析表（ANOVA）：

方差来源	平方和	自由度	F值	显著性
A	S_A	$s-1$	F_1	
B	S_B	$t-1$	F_2	
$A\times B$	$S_{A\times B}$	$(s-1)(t-1)$	F_3	
误差	S_e	$st(r-1)$		
总和	S_T	$str-1$		

第一节 全面试验的方差分析

例2（教材P233，例1.3）：

解：此例中，$s=3$，$t=4$，$r=2$。相应的ANOVA为：

方差来源	平方和	自由度	F值	显著性
A	56.6	2	19.4	**
B	132.2	3	30.2	**
$A\times B$	4.7	6	0.55	
误差	17.5	12		
总和	211.0	23		

因此，结果为：因素A、因素B的主效应均高度显著，而A与B的交互作用不显著，即认为不存在交互作用。

- 因素A、因素B的最佳组合：A3B4。

第一节 全面试验的方差分析

进一步的分析：教材中给出了将$S_{A\times B}$与S_e合并后，新的方差分析表，结果仍为因素A、因素B的主效应均高度显著（见P234中间表格）。此做法的依据?

- 合并后，新的模型为

$$Y_{ijk}=\mu+\alpha_i+\beta_j+e_{ijk} \qquad (1)$$

- 新模型的参数个数为……

- 新模型的平方和分解公式为……

- 新模型的检验法推导为……

请自行推导。

第一节 全面试验的方差分析

称模型（1）为可加模型，其中k可只取1（$r = 1$）。

● 可加模型的直观解释：各因素对指标Y的总影响，恰为每个因素对指标Y的影响的叠加。

● 可加模型的参数个数大为减少，模型复杂度显著降低。但减少参数的主要代价是：当确实存在交互作用时，模型假设错误。

●$r = 1$情形：可能因成本等因素，不安排重复实验。此时如果存在交互作用，则无法区分λ_{ij}与e_{ij}；如果不存在，则模型可估（参数个数/数据维数），但无法估计σ^2。

● 多因素可加模型：

$$Y = f(X_1, \cdots, X_m) + e = \mu + f_1(X_1) + \cdots + f_m(X_m) + e$$

其中$f_i(X_i)$需满足约束条件。

第二节 正交设计

设共有$m \geq 2$个因素，其中第i个因素F_i有s_i个水平（$s_i \geq 2$, $i = 1, \cdots, m$），则不同的试验（无重复）共有$s_1 \times \cdots \times s_m$个。当$m$较大时，几乎不可能安排全面试验。

可行的方案是：以模型假设的方式（如可加模型）减少参数个数以降低模型复杂度；从$s_1 \times \cdots \times s_m$个可能试验中挑选一部分安排试验，并科学分析数据。

----------------------end 20240523

试验设计（南开、北大）的方法很多，其中正交设计简单易行、应用价值高、实际效果好，受到广泛重视。

正交设计（不加说明地）研究可加模型，即m'个因素中，任意两个或多个因素间不存在交互作用，各个因素对指标的总影响为各自影响的简单叠加（实际中广泛存在）。

第二节 正交设计*

设共有$m \geq 2$个因素，其中第i个因素F_i有s_i个水平（$s_i \geq 2, i = 1, \cdots, m$），则不同的试验（无重复）共有$s_1 \times \cdots \times s_m$个。当$m$较大时，几乎不可能安排全面试验。

可行的方案是：以模型假设的方式（如可加模型）减少参数个数以降低模型复杂度；从$s_1 \times \cdots \times s_m$个可能试验中挑选一部分安排试验，并科学分析数据。

试验设计（南开、北大）的方法很多，其中正交设计简单易行、应用价值高、实际效果好，受到广泛重视。

正交设计（不加说明地）研究可加模型，即m'个因素中，任意两个或多个因素间不存在交互作用，各个因素对指标的总影响为各自影响的简单叠加（实际中广泛存在）。

第二节 正交设计

当因素F_i取水平λ_i时（$\lambda_i = 1, \cdots, s_i, \ i = 1, \cdots, m$），可加模型为

$$Y_{\lambda_1 \cdots \lambda_m} = \beta_0 + \sum_{i=1}^{m} \beta_i(\lambda_i) + e_{\lambda_1 \cdots \lambda_m}$$

其中β_0称为问题的一般平均，$\beta_i(\lambda_i)$称为因素F_i取水平λ_i时的主效应，$e_{\lambda_1 \cdots \lambda_m}$为零均值的随机误差，试情况可假设服从$N(0, \sigma^2)$。

主效应需满足约束条件：

$$\sum_{\lambda_i=1}^{s_i} \beta_i(\lambda_i) = 0$$

即给定i，$\beta_i(\lambda_i)$共有$s_i - 1$个独立参数；因此，模型共有

$$1(\beta_0) + \sum_{i=1}^{m} (s_i - 1) + 1(\sigma^2) = \sum_{i=1}^{m} s_i - m + 2$$

个独立参数。原模型参数个数为$s_1 \times \cdots \times s_m + 1$！

● 当交互作用存在，甚至多重交互作用存在时，正交设计一般不适用。

第二节 正交设计

- 当我们不做检验时，可不估计σ^2。

一般关心的问题为：

① 哪些因素对指标的影响大？哪些不显著？

② 如某因素显著，其哪个水平最好？

③ 哪种因素组合最佳（可加模型答案如②）？

正交设计的主要内容为：

① 如何从$s_1 \times \cdots \times s_m$个可能试验中挑选$n$个安排试验？

② 如何分析处理试验数据？

正交设计的主要思想为“搭配均衡”：

考虑任意两个因素F_{j_1}和F_{j_2}，其水平数分别为s_{j_1}和s_{j_2}（$j_1 < j_2$）。

不同的组合数共有$s_{j_1} \times s_{j_2}$种，“搭配均衡”意味着每种出现的次数相等。

若共安排n个试验，则每种出现次数皆为$n/$（$s_{j_1} \times s_{j_2}$）次。

第二节 正交设计

定义2.1. 设$\Lambda=(\lambda_{ij})$是$n\times m$矩阵，其第j列元素由数字$1,\cdots,s_j$所构成（$j=1,\cdots,m$）。如果对任意的$j_1<j_2$，$u\in\{1,\cdots,s_{j_1}\}$，$v\in\{1,\cdots,s_{j_2}\}$，有$\#\{i:(\lambda_{ij_1},\lambda_{ij_2})=(u,v)\}=\frac{n}{s_{j_1}\times s_{j_2}}$，则称$\Lambda$是一个正交表，记为$L_n(s_1\times\cdots\times s_m)$。

由定义，并对v求和，得到$\#\{i:\lambda_{ij_1}=u\}=\frac{n}{s_{j_1}}$，即因素$j_1$各水平出现次数相同。

若$s_1=\cdots=s_m=s$，则记Λ为$L_n(s^m)$。其中n表示试验次数， m表示（最多）可以有的因素个数， s表示每个因素的水平数。

常用的正交表有三类（P365-371附表10）：① 二水平正交表，如$L_4(2^3)$、$L_8(2^7)$、$L_{16}(2^{15})$等；② 三水平正交表，如$L_9(3^4)$、$L_{27}(3^{13})$等；③ 混合正交表，如$L_8(4^1\times 2^4)$等。

第二节 正交设计

$L_4(2^3)$为: $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \end{pmatrix}$ 它是搭配均衡的。

● $L_4(2^3)$表示，用此正交表安排试验，共需4个，可有不超过3个2水平因素。
原参数个数（不含σ^2）为$2^3=8$。$2^3 \leftrightarrow 2\times 3-(3-1)=4$。

● $L_{16}(2^{15})$表示，用此正交表安排试验，共需16个，可有不超过15个2水平因素。
原参数个数（不含σ^2）为$2^{15}=32768$。$2^{15} \leftrightarrow 2\times 15-(15-1)=16$。

● $L_9(3^4)$表示，用此正交表安排试验，共需9个，可有不超过4个3水平因素。
原参数个数（不含σ^2）为$3^4=81$。$3^4 \leftrightarrow 3\times 4-(4-1)=9$。

● $L_{27}(3^{13})$表示，用此正交表安排试验，共需27个，可有不超过13个3水平因素。
原参数个数（不含σ^2）为$3^{13}=1594323$。$3^{13} \leftrightarrow 3\times 13-(13-1)=27$。

● 正交表必须满足n能够被任意的$s_{j_1}\times s_{j_2}$整除；但即使满足，也可能不存在，例如不存在$L_{36}(6^4)$。

第二节 正交设计

● 正交表的“正交性”：

★ 两因素全面试验方差分析中，$S_T = S_e + S_{A\times B} + S_A + S_B$。

★ 两因素可加模型方差分析中，$S_T = S_e + S_A + S_B$，多因素可加模型也可有类似分解。

★ 与多元回归比较，因素间正交≈协变量间独立，虽然因素可能没有随机性，甚至不是变量（如鸡吃3种饲料）。

★ 多元回归中，S_T只能分解为残差平方和+回归平方和，回归平方和一般无法进一步做正交分解（因为协变量间不正交），故而删除协变量的检验方法……。

★ 正交设计不管因素的天然分布，直接设计其为正交（如$L_4(2^3)$）。

★ 可否实现？工业试验没问题，涉及人较难，甚或有伦理道德问题（如食物热量/重量；病情危重程度/是否送ICU）。

第二节 正交设计

● 正交性是正交设计的优势，不仅使平方和可分解，而且使得数据分析简单、科学。

对模型

$$Y_{ik}=\beta_0+\sum_{j=1}^{m'}\beta_j(\lambda_{ij})+e_{ik}$$

的参数估计（$1\le i\le n$为正交表中第i个试验，$m'\le m$（相等时称饱和模型），$1\le k\le r$为其第k次重复，r可取1）：

令$B_{j\lambda}=\sum_{i:\,\lambda_{ij}=\lambda}\sum_{k=1}^{r}Y_{ik}$为因素$F_j$的$\lambda$水平下所有的相关数据之和，则可以证明，

$$\widehat{\beta}_0=\overline{Y}=\frac{1}{nr}\sum_{i,\,k}Y_{ik}$$

$$\widehat{\beta}_j(\lambda)=\frac{s_j}{nr}B_{j\lambda}-\overline{Y}$$

是β_0、$\beta_j(\lambda)$的最小二乘估计（直观：其他因素作用相互抵消）。

第二节 正交设计

相关假设检验：对某个$1 \le j \le m'$

$$H_{0j}\colon \beta_j(1) = \cdots \beta_j(s_j) = 0$$

令$T = \sum_{i,k} Y_{ik} = nr\overline{Y}$为全部数据之和，定义

$$\overline{Y}_{i\cdot} = \frac{1}{r}\sum_k Y_{ik}$$

$$S_{F_j} = \frac{s_j}{nr}\sum_{\lambda=1}^{s_j} B_{j\lambda}^2 - \frac{T^2}{nr}$$

$$Q = \sum_{i,k}(Y_{ik} - \overline{Y}_{i\cdot})^2$$

$$S_e = \sum_{i,k}\left(\widehat{Y}_{ik} - Y_{ik}\right)^2$$

其中$\widehat{Y}_{ik} = \widehat{\beta}_0 + \sum_{j=1}^{m'} \widehat{\beta}_j(\lambda_{ij})$，

则有平方和（方差）分解公式：

$$S_T = \sum_{i,k}(Y_{ik} - \overline{Y})^2 = Q + \sum_{j=1}^{m'} S_{F_j} + S_e$$

即在正交设计中，可以进行各因素对响应变量的偏差平方和的贡献S_{F_j}的正交分解（ Q 和S_e均为残差描述，当$r = 1$时， $Q = 0$）。

第二节 正交设计

情况1：$r>1$，此时Q为对误差方差最好的刻画。可以证明，

$$F^{(j)}=\frac{S_{F_j}/(s_j-1)}{Q/n(r-1)}\sim F(s_j-1,n(r-1))$$

情况2：$r=1$，但$f=n-\left(\sum_{i=1}^{m'}s_i-m'+1\right)>0$（$m'<m$（ m为正交表列数），模型不饱和）时，

$$F^{(j)}=\frac{S_{F_j}/(s_j-1)}{S_e/f}\sim F(s_j-1,f)$$

情况3：$r=1$，且$f=n-\left(\sum_{i=1}^{m'}s_i-m'+1\right)=0$（$m'=m$，模型饱和）时，无法做检验。

例1.（教材P225，例1.1；P239，例3.1；P250，例3.2）

解：① 安排试验。因每个因素有3个水平，因素个数$3<4$，故利用正交表$L_9(3^4)$，不妨仅利用其前3列。将三个因素及其水平按正交表填入后，得到9个试验方案（全部需27个），见P239表3.1。

第二节 正交设计

② 分析结果（P239表3.1）。直接看，第7个最好。计算分析方法如下：

将表3.1延续为

9	3(11%)	3(12′)	2(360kg)	23.1
B_{j1}	52.7	61.7	56.3	
B_{j2}	62.5	63.2	62.0	
B_{j3}	68.5	58.8	65.4	
R_j	15.8	4.4	9.1	
最好水平	3	2	3	

- B_{jk}是第j个因素取水平k时，所有试验的指标之和。例如 B_{11} =52.7=16.9+19.1+16.7。亦可计算$\bar{B}_{jk}$。

- R_j称为极差，为B_{jk}中（固定j）最大值减去最小值。

第二节 正交设计

● R_j反映了因素F_j各水平的最大差距。此时，因为“搭配均衡”，其他因素的影响在求差时，恰好全部抵消！即：B_{j1}、B_{j2}和B_{j3}是可比的。

● 哪些因素对指标的影响大？从极差看，依次为成型水分A、一次碾压料重C和碾压时间B。

● 各因素哪个水平最好？显然为A_3、B_2和C_3。

● 哪种因素组合最佳？显然是$A_3B_2C_3$，不包含于9个方案中。

● 检验：此时$r=1$，但$f=n-\left(\sum_{i=1}^{m'}s_i-m'+1\right)=9-(9-3+1)=2>0$，故可以做检验。我们省略计算的细节，直接给出相关的方差分析表:

第二节 正交设计

ANOVA

方差来源	平方和	自由度	F值	显著性
A	43.89	2	4.46	
B	3.46	2	0.35	
C	14.96	2	1.52	
误差	9.85	2		
总和	72.13	8		

● **此时，$F_{0.95}(2,\ 2)=19.0$，故三个因素的作用都不显著。原因：可能数据量太少；可能自由度太小；可能可加模型不成立；可能就是不显著。**

● **进一步实验设计：因为试验是人为安排的，故可分多阶段，逐步寻找最优方案。**