

823/95  
15811

现代应用数学丛书

# 统计分析

〔日〕森口繁一 著

上海科学技术出版社

現代应用数学丛书

# 統計分析

〔日〕森口繁一 著

刘 璋 温 譯

上海科学技术出版社

## 內 容 提 要

本书是日本岩波书店出版的现代应用数学丛书之一的中译本。結合試驗設計討論統計分析，而重点介紹正交設計的情形、并附有很多例題。本书可供高等学校师生、研究工作者和从事实际工作的工程技术人员参考。

现代应用数学丛书

## 統 計 分 析

原 书 名	統 計 解 析
原 著 者	(日) 森 口 繁 一
原 出 版 者	岩 波 书 店
譯 者	刘 璋 温

上海科学技术出版社出版

(上海瑞金二路450号)

上海市书刊出版业营业许可证出003号

新华书店上海发行所发行 各地新华书店經售

商务印书馆上海厂印刷

开本850×1168 1/32 印张3 14/32 字数79,000

1961年12月第1版 1961年12月第1次印刷

印数 1—10,000

統一书号: 13110 · 439

定 价: (十四) 0.60 元

## 出版說明

这一套书是根据日本岩波书店出版的“现代应用数学讲座”翻譯而成。日文原书共 15 卷 60 册,分成 A、B 两组,各編有序号。現在把原来同一題目分成两册或三册的加以合并,整理成 42 种,不另分組編号,陸續翻譯出版。

这套书涉及的面很广,其內容都和现代科学技术密切有关,有一定参考价值。每一本书收集的資料都比較丰富,而叙述扼要,篇幅不多,有利于讀者以較短時間掌握有关学科的主要內容。虽然,这套书的某些观点不尽适合于我国的情况,但其方法可供参考。因此,翻譯出版这一套书,对我国学术界是有所助益的。

由于日文原书是 1957 年起以讲座形式陸續出版的,写作時間和篇幅的限制不可避免地会影响原作者对內容的处理。为了尽可能地减少这种影响,我們在每一譯本中,特請譯者或校閱者撰写序或后記,以介紹有关学科的最近发展状况,并对全书內容作一些評价,提出一些看法,結合我国情况补充一些資料文献,在文內过于簡略或不足的地方添加了必要的注釋和改正原书中存在的一些錯誤。希望这些工作能对讀者有所帮助。

承担翻譯和校閱的同志,为提高书籍的质量付出了巨大劳动,在此特致以誠摯的謝意。

欢迎讀者对本书提出批評和意見。

上海科学技术出版社

## 譯 者 序

本书是从森口繁一著“統計解析”(岩波講座 現代应用数学)一书譯出的。如原序所說,本书以最小二乘法为理論依据,討論了試驗数据的統計分析,而重点介紹具有正交性的試驗設計和分析。正交設計是試驗設計中应用范围最广的一种,特別在工业試驗中,它發揮着較大的作用。作者十分強調正交設計的意义。

本书的主要特点是理論与实际兼顧。在叙述一段理論之后,接着就举出具体例題,由淺入深地說明分析方法,并具体地介紹計算步驟。

在翻譯过程中,譯者认为費解的地方,都作了一些注釋,指出文献的所在,并在书末补充了一些文献。

本书是一本入門书,它的叙述大致上参照了 Bose[6]。关于試驗設計中的估計和檢驗問題, Bose 的讲义是一本系統而簡明的著作,值得推荐。在本书的基础上,欲进一步深入,除上述 Bose[6]以外,对数学基础較好的讀者,可推荐 Mann[8], Kempthorne[9], Schoffé[28] 和增山[22], [31]; 而对从事实际工作的讀者,則推荐 Cochran-Cox[4], Bennett-Franklin[17] 和 Davies[29]。

本书譯稿承厦門大学李文清副教授审校,提出了不少宝贵意見。在譯稿整理阶段,又得到中国科学院数学研究所錢大同同志的帮助,譯者在此对他們表示感謝。

刘 璋 溫 1961 年 4 月北京

## 序

在一本篇幅較小的書籍中全面地讲解統計分析，就需要以一個原則為主題，研究它在各種場合下如何出現。這裡就實用上比較重要的幾種情形，討論最小二乘法這個原則所提供的一些標準方法。

第1章敘述基礎理論；第2章解說應用這些理論的重要輔助手段；第3章仔細討論占實用設計大部分的“正交”設計；第4章對正交設計的情形，敘述方差分析，而對檢驗問題，只簡單地提及；第5章進一步推廣前4章所討論的模型，並對多級“誤差”的情形作了討論。

不用說，這裡未提到的重要項目還有很多。但是，作為標準方法的理論基礎，本書如果在某種程度上能對讀者有所幫助，將使著者感到榮幸。書中雖然介紹了不少具體例子，但一般理論仍然講得多了一些，這可以說是不可避免的。因此在閱讀本書時，如能同時參看普通參考書中各個特殊情形的公式，將會有所裨益。

1957年2月 森口繁一

# 目 录

出版說明

譯者序

序

第1章 最小二乘法	1
§ 1 正規方程	1
§ 2 最小二乘估計的性質	3
§ 3 例題	7
§ 4 綫性估計理論	15
§ 5 正態估計理論	17
第2章 参数組的變換	22
§ 6 變換的一般公式	22
§ 7 无用参数存在的情形	24
§ 8 例題	30
§ 9 几何解釋	41
§ 10 正交多項式	46
第3章 正交設計	51
§ 11 秤量設計	51
§ 12 $2^m$ 型正交陣列	54
§ 13 $s^m$ 型正交陣列	57
§ 14 交互作用 ( $s^m$ 型的情形)	65
§ 15 多因子試驗模型	69
第4章 方差分析	78
§ 16 数据的分解	78
§ 17 平方和的分解	79
§ 18 $F$ 檢驗	86
第5章 綫区試驗	87
§ 19 分枝設計	87

§ 20 正交裂区試驗.....	90
§ 21 裂区試驗的估計理論.....	95
参考文献.....	100
譯者补充文献.....	102



# 第1章 最小二乘法

## §1 正規方程

統計分析的中心問題，就是用若干数据來估計參數。這時，“綫性回歸模型”

$$y_{\alpha} = x_{\alpha 1}\beta_1 + x_{\alpha 2}\beta_2 + \cdots + x_{\alpha p}\beta_p + \varepsilon_{\alpha} \quad (\alpha=1, 2, \cdots, N) \quad (1.1)$$

作為数据的構造來說，其適用範圍是相當廣的，此處  $y_1, y_2, \cdots, y_N$  是  $N$  個数据； $\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_p$  是  $p$  個參數（未知常數）；而係數  $x_{\alpha i} (\alpha=1, 2, \cdots, N; i=1, 2, \cdots, p)$  是已知常數；“誤差” $\varepsilon_{\alpha} (\alpha=1, 2, \cdots, N)$  一般滿足下列四個假定：

- (1) 獨立性 它們是相互獨立的隨機變數。
- (2) 無偏性 它們的數学期望都是 0。用式子來表達，就是

$$E(\varepsilon_{\alpha}) = 0. \quad (1.2)$$

- (3) 等方差性 它們的方差都相等，記為  $\sigma^2$ 。用式子來表達，就是

$$V(\varepsilon_{\alpha}) = \sigma^2. \quad (1.3)$$

- (4) 正態性 它們都遵循正態分布。

概括上面所述，可以簡單地描述為“誤差  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \cdots, \varepsilon_N$  相互獨立地遵循正態分布  $N(0, \sigma^2)$ 。”

[注 1] 下面敘述的理論，有許多用不着假定正態性也成立。有許多把獨立性的假定放寬為“無相關性”，其理論仍然成立。

[注 2] 一般，数据的標號用希臘字母  $\alpha$ ，參數的標號用羅馬字母  $i, j$  表示。總和記號  $\sum$  只添有  $\alpha$  或者  $i$  時， $\alpha$  表示從 1 到  $N$  的和， $i$  表示從 1 到  $p$  的和。

当找出了线性回归模型(1.1)中的参数  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$  的估计值  $b_1, b_2, \dots, b_p$  时, 满足下列关系的  $e_\alpha$  叫做残差:

$$y_\alpha = x_{\alpha 1}b_1 + x_{\alpha 2}b_2 + \dots + x_{\alpha p}b_p + e_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N). \quad (1.4)$$

最小二乘法的原则是, 定出估计值  $b_1, b_2, \dots, b_p$ , 使得残差的平方和

$$\sum_{\alpha} e_{\alpha}^2 = \sum_{\alpha} (y_{\alpha} - x_{\alpha 1}b_1 - x_{\alpha 2}b_2 - \dots - x_{\alpha p}b_p)^2 \quad (1.5)$$

为最小。

当给定了  $y_1, y_2, \dots, y_N$  时, (1.5) 是  $b_1, b_2, \dots, b_p$  的函数(二次式)。因为这个式子是非负的, 所以最小值存在。欲求确定最小值的  $b_1, b_2, \dots, b_p$ , 就得使(1.5)中所有  $b_i$  的偏导数等于0。也就是求

$$\frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial b_i} \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2 = \sum_{\alpha} (y_{\alpha} - x_{\alpha 1}b_1 - x_{\alpha 2}b_2 - \dots - x_{\alpha p}b_p) (-x_{\alpha i}) = 0 \quad (i = 1, \dots, p) \quad (1.6)$$

的根。(1.6)是关于  $p$  个未知数  $b_1, b_2, \dots, b_p$  的  $p$  个联立方程。这种方程叫做正规方程。利用(1.4)可以把这个方程写成

$$\sum_{\alpha} x_{\alpha i} e_{\alpha} = 0 \quad (i = 1, \dots, p), \quad (1.7)$$

又可以整理为

$$\sum_j a_{ij} b_j = B_i \quad (i = 1, \dots, p), \quad (1.8)$$

此处左边的系数是

$$a_{ij} = \sum_{\alpha} x_{\alpha i} x_{\alpha j} \quad (i, j = 1, \dots, p), \quad (1.9)$$

而右边则为

$$B_i = \sum_{\alpha} x_{\alpha i} y_{\alpha} \quad (i = 1, \dots, p). \quad (1.10)$$

如果正规方程的系数矩阵  $[a_{ij}]$  是满秩的(其行列式  $|a_{ij}| \neq 0$ ), 那末解必存在, 而且是唯一确定的。我们可以把它写成形状

$$b_i = \sum_j c_{ij} B_j \quad (i = 1, \dots, p), \quad (1.11)$$

此处  $c_{ij}$  是  $[a_{ij}]$  的逆矩陣元素, 也就是

$$[c_{ij}] = [a_{ij}]^{-1}. \quad (1.12)$$

[注 3] 矩陣  $[a_{ij}]$  不是滿秩的情形 (当行列式  $|a_{ij}| = 0$  时), 将在 § 7 中討論, 本章只討論  $|a_{ij}| \neq 0$  的情形。

最小二乘估計值 (正規方程的解)  $b_1, b_2, \dots, b_p$  使得 (1.5) 为最小, 而計算这个最小值  $S_E$ , 可以利用下列公式:

$$S_E = \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \sum_i b_i B_i. \quad (1.13)$$

**証明** 从 (1.5) 出发, 应用 (1.6), 然后再用 (1.10) 便得

$$\begin{aligned} S_E &= \sum_{\alpha} (y_{\alpha} - \sum_j x_{\alpha j} b_j)^2 = \sum_{\alpha} (y_{\alpha} - \sum_j x_{\alpha j} b_j) (y_{\alpha} - \sum_j x_{\alpha j} b_j) \\ &= \sum_{\alpha} y_{\alpha} (y_{\alpha} - \sum_j x_{\alpha j} b_j) - \sum_j \sum_{\alpha} x_{\alpha j} b_j (y_{\alpha} - \sum_j x_{\alpha j} b_j) \\ &= \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \sum_{\alpha} \sum_j x_{\alpha j} y_{\alpha} b_j = \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \sum_j b_j B_j. \end{aligned} \quad \text{証毕}$$

(1.13) 的意义是, “最小二乘估計的殘差平方和, 可以从未加工数据的平方和减去正規方程的解与其右边乘积之和而得到。” 由此, 当  $N$  比  $p$  大时, 可以节省相当多的計算手續。

## § 2 最小二乘估計的性质

下面計算上节引进的各种量的数学期望, 方差和协方差。

首先, 对于数据  $y_1, y_2, \dots, y_N$ , 把 (1.2) 应用于 (1.1), 便知其数学期望是

$$E(y_{\alpha}) = \sum_i x_{\alpha i} \beta_i, \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N). \quad (2.1)$$

从 (1.3) 得方差为

$$V(y_{\alpha}) = \sigma^2 \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N). \quad (2.2)$$

从假定 (1) 得协方差为

$$V(y_{\alpha}, y_{\beta}) = 0 \quad (\alpha \neq \beta). \quad (2.3)$$

其次, 从 (1.9) 可知, 正規方程左边的系数  $a_{ij}$  是常数, 但是右

边的  $B_i$  则随着数据的变化而变化。其性质如下:

$$E(B_i) = \sum_j a_{ij} \beta_j, \quad (2.4)$$

$$V(B_i) = a_{ii} \sigma^2, \quad V(B_i, B_j) = a_{ij} \sigma^2. \quad (2.5)$$

**証明** 利用(1.10), (2.1)和(1.9)便得

$$\begin{aligned} E(B_i) &= \sum_{\alpha} x_{\alpha i} E(y_{\alpha}) = \sum_{\alpha} x_{\alpha i} \left( \sum_j x_{\alpha j} \beta_j \right) \\ &= \sum_j \left( \sum_{\alpha} x_{\alpha i} x_{\alpha j} \right) \beta_j = \sum_j a_{ij} \beta_j. \end{aligned}$$

利用(1.10), (2.2)和(2.3)便得

$$V(B_i, B_j) = V\left(\sum_{\alpha} x_{\alpha i} y_{\alpha}, \sum_{\alpha} x_{\alpha j} y_{\alpha}\right) = \sum x_{\alpha i} x_{\alpha j} \sigma^2 = a_{ij} \sigma^2.$$

这里, 特别令  $j=i$ , 便得  $V(B_i) = a_{ii} \sigma^2$ . 証毕

逆矩阵的元素  $c_{ij}$ , 因其仅由左边的系数  $a_{11}, a_{12}, \dots, a_{pn}$  确定, 所以也是常数。这样, 解  $b_i$  的变化, 从(1.11)看来, 是由右边  $B_j$  的变化引起的。其数学期望、方差和协方差求得如下:

$$E(b_i) = \beta_i, \quad (2.6)$$

$$V(b_i) = c_{ii} \sigma^2, \quad V(b_i, b_j) = c_{ij} \sigma^2. \quad (2.7)$$

**証明** 利用(1.11), (2.4)和(1.12)使得

$$\begin{aligned} E(b_i) &= \sum_j c_{ij} E(B_j) = \sum_j c_{ij} \left( \sum_k a_{jk} \beta_k \right) \\ &= \sum_k \left( \sum_j c_{ij} a_{jk} \right) \beta_k = \sum_k \delta_{ik} \beta_k = \beta_i. \end{aligned}$$

( $\delta_{ik}$  是 Kronecker 记号, 即当  $i=k$  时等于 1, 当  $i \neq k$  时等于 0.)

其次, 利用(1.11), (2.5)和(1.12)使得

$$\begin{aligned} V(b_i, b_j) &= V\left(\sum_k c_{ik} B_k, \sum_h c_{jh} B_h\right) \\ &= \sum_k \sum_h c_{ik} c_{jh} V(B_k, B_h) = \sum_k \sum_h c_{ik} c_{jh} a_{kh} \sigma^2 \\ &= \sum_k c_{ik} \delta_{jk} \sigma^2 = c_{ij} \sigma^2. \end{aligned}$$

(计算中利用到对称性  $a_{ij} = a_{ji}$ .)

特別令  $j=i$ , 便得  $V(b_i) = c_{ii}\sigma^2$ . 証毕

(2.6) 表明  $b_i$  是  $\beta_i$  的无偏估計, 而 (2.7) 提供了有关精度的知識。当任意給定系数  $l_1, l_2, \dots, l_p$ , 并考虑参数的一次式

$$\theta = l_1\beta_1 + l_2\beta_2 + \dots + l_p\beta_p \quad (2.8)$$

时, 如果用

$$\hat{\theta} = l_1b_1 + l_2b_2 + \dots + l_pb_p \quad (2.9)$$

来估計 (2.8), 那末

$$E(\hat{\theta}) = \theta, \quad (2.10)$$

$$V(\hat{\theta}) = \sum_i \sum_j l_i l_j c_{ij} \sigma^2. \quad (2.11)$$

**証明** 利用 (2.9), (2.6) 和 (2.8), 便得

$$E(\hat{\theta}) = \sum_i l_i E(b_i) = \sum_i l_i \beta_i = \theta.$$

又利用 (2.9) 和 (2.7) 便得

$$V(\hat{\theta}) = V\left(\sum_i l_i b_i\right) = \sum_i \sum_j l_i l_j V(b_i, b_j) = \sum_i \sum_j l_i l_j c_{ij} \sigma^2. \quad \text{証毕}$$

(2.10) 表明  $\hat{\theta} = \sum_i l_i b_i$  是  $\theta = \sum_i l_i \beta_i$  的无偏估計, 而 (2.11) 表明  $\hat{\theta}$  的方差可以表示为以逆矩陣  $[c_{ij}]$  为系数矩陣的  $l_1, l_2, \dots, l_p$  的二次型与誤差方差的乘积。

現在, 把上面所考虑的  $y_\alpha, B_i, b_i$  等表达为参数  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$  和誤差  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$  的一次式。

首先, 从 (1.1) 得

$$y_\alpha = \sum_i x_{\alpha i} \beta_i + \varepsilon_\alpha. \quad (2.12)$$

把上式代入 (1.10), 并利用 (1.9) 便得

$$B_i = \sum_\alpha x_{\alpha i} \left( \sum_j x_{\alpha j} \beta_j + \varepsilon_\alpha \right) = \sum_j \alpha_{ij} \beta_j + \sum_\alpha x_{\alpha i} \varepsilon_\alpha. \quad (2.13)$$

再把上式代入 (1.11), 并利用 (1.12) 便得

$$\begin{aligned} b_i &= \sum_j c_{ij} B_j = \sum_j c_{ij} \left( \sum_k \alpha_{jk} \beta_k + \sum_\alpha x_{\alpha j} \varepsilon_\alpha \right) \\ &= \beta_i + \sum_\alpha \left( \sum_j c_{ij} x_{\alpha j} \right) \varepsilon_\alpha. \end{aligned} \quad (2.14)$$

可以說, 这些式子分別表示着  $y_\alpha$ ,  $B_i$  和  $b_i$  的构造。

这样, 如果我們考察 (1.4) 所定义的殘差  $e_\alpha$  的构造, 那末得到

$$\begin{aligned} e_\alpha &= y_\alpha - \sum_i x_{\alpha i} b_i \\ &= \left( \sum_i x_{\alpha i} \beta_i + \varepsilon_\alpha \right) - \sum_i x_{\alpha i} \left( \beta_i + \sum_\beta \sum_j c_{ij} x_{\beta j} \varepsilon_\beta \right) \\ &= \varepsilon_\alpha - \sum_\beta \left( \sum_i \sum_j x_{\alpha i} c_{ij} x_{\beta j} \right) \varepsilon_\beta \\ &= \sum_\beta \left( \delta_{\alpha\beta} - \sum_i \sum_j x_{\alpha i} c_{ij} x_{\beta j} \right) \varepsilon_\beta. \end{aligned} \quad (2.15)$$

由此可知, 第一, 殘差与参数  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$  无关, 它仅受誤差的影响; 第二,

$$E(e_\alpha) = 0; \quad (2.16)$$

第三, 还可以証明, 对任意的  $i$  和任意的  $\alpha$ ,

$$V(b_i, e_\alpha) = 0. \quad (2.17)$$

**証明** 由 (2.14) 和 (2.15) 得

$$\begin{aligned} V(b_i, e_\alpha) &= V \left( \beta_i + \sum_j c_{ij} x_{\gamma j} \varepsilon_\gamma, \varepsilon_\alpha - \sum_\beta \sum_h \sum_k x_{\alpha h} c_{hk} x_{\beta k} \varepsilon_\beta \right) \\ &= V \left( \sum_\gamma \sum_j c_{ij} x_{\gamma j} \varepsilon_\gamma, \varepsilon_\alpha \right) \\ &\quad - V \left( \sum_\gamma \sum_j c_{ij} x_{\gamma j} \varepsilon_\gamma, \sum_\beta \sum_h \sum_k x_{\alpha h} c_{hk} x_{\beta k} \varepsilon_\beta \right) \\ &= \sum_j c_{ij} x_{\alpha j} \sigma^2 - \sum_\beta \left( \sum_j c_{ij} x_{\beta j} \right) \left( \sum_h \sum_k x_{\alpha h} c_{hk} x_{\beta k} \right) \sigma^2 \\ &= \sum_j c_{ij} x_{\alpha j} \sigma^2 - \sum_j \sum_h \sum_k c_{ij} x_{\alpha h} c_{hk} x_{\beta k} \sigma^2 \\ &= \sum_j c_{ij} x_{\alpha j} \sigma^2 - \sum_j \sum_h c_{ij} x_{\alpha h} \delta_{hj} \sigma^2 = 0. \end{aligned} \quad \text{証毕}$$

(2.17) 表明任意的估計量  $b_i$  与任意的殘差  $e_\alpha$  互不相关。利用这个事实, 从 (1.4) 便得

$$V(y_\alpha) = V \left( \sum_i x_{\alpha i} b_i \right) + V(e_\alpha), \quad (2.18)$$

但因左边等于  $\sigma^2$ , 而右边第一项可以由 (2.7) 計算为

$$\begin{aligned} V\left(\sum_i x_{\alpha i} b_i\right) &= \sum_i \sum_j x_{\alpha i} x_{\alpha j} V(b_i, b_j) \\ &= \sum_i \sum_j x_{\alpha i} x_{\alpha j} c_{ij} \sigma^2, \end{aligned} \quad (2.19)$$

于是得到

$$V(e_\alpha) = \sigma^2 - \sum_i \sum_j x_{\alpha i} x_{\alpha j} c_{ij} \sigma^2. \quad (2.20)$$

因为  $e_\alpha$  的数学期望是 0 (見 (2.16)), 所以 (2.20) 可以說是  $e_\alpha^2$  的数学期望。因此, 殘差平方和  $S_E$  的数学期望是

$$\begin{aligned} E(S_E) &= E\left(\sum_\alpha e_\alpha^2\right) \\ &= \sum_\alpha \left(\sigma^2 - \sum_i \sum_j x_{\alpha i} x_{\alpha j} c_{ij} \sigma^2\right) \\ &= N\sigma^2 - \sum_i \sum_j a_{ij} c_{ij} \sigma^2 \\ &= N\sigma^2 - \sum_i \delta_{ii} \sigma^2 \\ &= (N-p)\sigma^2. \end{aligned} \quad (2.21)$$

由此可知

$$V_E = S_E / (N-p) \quad (2.22)$$

是  $\sigma^2$  的无偏估計。

### §3 例 題

在处理实际問題的时候, 把数据的构造 (1.1) 列成表 3.1, 把正規方程 (1.8) 列成表 3.2, 并把由正規方程右边所表达的解式 (1.11) 列成表 3.3, 这样, 处理起来就比较方便。这些表分别叫做  $X$  表,  $A$  表和  $O$  表。

这些表的主要部分已經分別写进了矩陣  $X = [x_{\alpha i}]$ ,  $A = [a_{ij}]$  和  $O = [c_{ij}]$ 。于是由 (1.9) 可知, 矩陣  $A = [a_{ij}]$  可以由矩陣  $X = [x_{\alpha i}]$  的列与列的乘积

$$A = X'X \quad (3.1)$$

表 3.1  $X$  表

$\beta_1$	$\beta_2$	$\cdots$	$\beta_p$	数据
$x_{11}$	$x_{12}$	$\cdots$	$x_{1p}$	$y_1$
$x_{21}$	$x_{22}$	$\cdots$	$x_{2p}$	$y_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$	$\vdots$
$x_{N1}$	$x_{N2}$	$\cdots$	$x_{Np}$	$y_N$

表 3.2  $A$  表

$b_1$	$b_2$	$\cdots$	$b_p = 1$
$a_{11}$	$a_{12}$	$\cdots$	$a_{1p}$
$a_{21}$	$a_{22}$	$\cdots$	$a_{2p}$
$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$	$\vdots$
$a_{p1}$	$a_{p2}$	$\cdots$	$a_{pp}$

表 3.3  $C$  表

$1=B_1$	$B_2$	$\cdots$	$B_p$
$b_1$	$c_{11}$	$c_{12}$	$\cdots$
$b_2$	$c_{21}$	$c_{22}$	$\cdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$
$b_p$	$c_{p1}$	$c_{p2}$	$\cdots$

导出。也就是說，矩陣  $A$  的第  $i$  行和第  $j$  列的元素  $a_{ij}$  等于矩陣  $X$  的第  $i$  列与第  $j$  列的内积。又由 (1.10) 可知，正规方程的第  $i$  式右边由矩陣  $X$  的第  $i$  列与数据的列的内积给出。(1.12) 显然意味着

$$C = A^{-1}. \quad (3.2)$$

現在將 § 1 和 § 2 中得到的結論应用于一些具体問題。

**例 1 單純的反复观测** 設对真值为  $\mu$  的某个量进行  $N$  次观测，得到数据  $y_1, y_2, \cdots, y_N$ 。数据的构造可以写成

$$y_\alpha = \mu + \varepsilon_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, \cdots, N). \quad (3.3)$$

設上式的誤差滿足假定 (1) ~ (4)。这时参数只有一个  $\mu$ ，所以  $p=1$ ，并得  $X$  表如表 3.4。解正规方程便可求得  $\mu$  的最小二乘估計  $m$ 。正规方程只有一个方程，它左边的系数是

$$a_{11} = 1^2 + 1^2 + \cdots + 1^2 = N,$$

右边是

$$B_1 = 1 \cdot y_1 + 1 \cdot y_2 + \cdots + 1 \cdot y_N = \sum_{\alpha} y_{\alpha}.$$

也就是說，正规方程是

$$Nm = \sum_{\alpha} y_{\alpha}, \quad (3.4)$$

解这个方程，使得

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} y_{\alpha}. \quad (3.5)$$

表 3.4

$\mu$	数据
1	$y_1$
1	$y_2$
$\vdots$	$\vdots$
1	$y_N$



这就是說，最小二乘估計  $m$  就是数据的算术平均值  $\bar{y}$ 。由于逆矩陣元素只有一个，即  $c_{11}=1/N$ 。因而，从(2.6)和(2.7)可以推出

$$E(m) = \mu, \quad V(m) = \sigma^2/N. \quad (3.6)$$

又殘差平方和的計算公式(1.13)是

$$S_E = \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - m \cdot B_1 = \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \left( \sum_{\alpha} y_{\alpha} \right)^2 / N. \quad (3.7)$$

故由(2.22)可知，这时  $V_E = S_E / (N-1)$  是誤差方差  $\sigma^2$  的无偏估計。此外， $m = \bar{y}$  与  $e_{\alpha} = y_{\alpha} - \bar{y}$  是互不相关的 ( $V(m, e_{\alpha}) = 0$ )。

**例2 配通过原点的直綫** (图3.1) 对于  $x$  的值  $x_i$  ( $i=1, 2, \dots, N$ )，設  $y$  的“眞值”由  $\beta x_i$  給定。若再給它加上誤差  $e_i$ ，便得到观测值  $y_i$ 。也就是

$$y_i = \beta x_i + e_i \quad (i=1, 2, \dots, N). \quad (3.8)$$

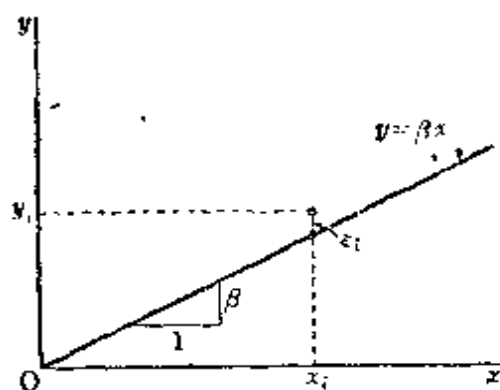


图 3.1 通过原点的直綫

表 3.5

$\beta$	数据
$x_1$	$y_1$
$x_2$	$y_2$
$\vdots$	$\vdots$
$x_N$	$y_N$

这时，参数的个数  $p=1$ ，且得  $X$  表如表3.5。因此，求  $\beta$  的估計值  $b$  的正规方程是

$$\left( \sum_i x_i^2 \right) b = \sum_i x_i y_i. \quad (3.9)$$

其解是

$$b = \sum_i x_i y_i / \sum_i x_i^2. \quad (3.10)$$

因为逆矩陣的元素是

$$c_{11} = 1 / \sum_i x_i^2, \quad (3.11)$$

所以由(2.6)和(2.7)推出

$$E(b) = \beta, \quad V(b) = \sigma^2 / \sum_i x_i^2. \quad (3.12)$$

殘差平方和的定义式是

$$S_E = \sum_i (y_i - bx_i)^2, \quad (3.13)$$

而其計算公式(1.13)这时变为

$$S_E = \sum_i y_i^2 - \left( \sum_i x_i y_i \right)^2 / \sum_i x_i^2. \quad (3.14)$$

并且  $V_E = S_E / (N-1)$  是  $\sigma^2$  的无偏估計。

[注] 在例2中, 令所有的  $x_i$  都等于1, 就成为例1的情形。

**例3 配一般的直綫**(图3.2) 設数据的构造为

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i \quad (i=1, 2, \dots, N), \quad (3.15)$$

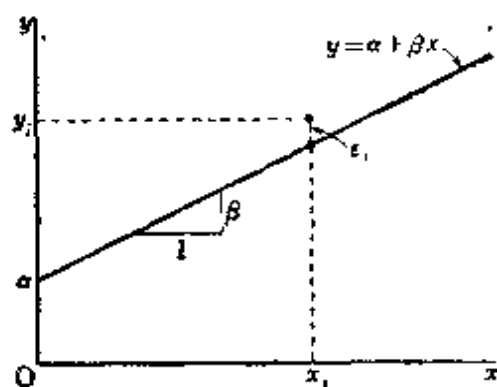


表 3.6 X 表

$\alpha$	$\beta$	数据
1	$x_1$	$y_1$
1	$x_2$	$y_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1	$x_N$	$y_N$

图 3.2 一般直綫

于是得 X 表如表 3.6。这时, 求  $\alpha, \beta$  的估計值  $a, b$  的正规方程的系数是

$$\begin{aligned} a_{11} &= 1^2 + 1^2 + \dots + 1^2 = N, \\ a_{22} &= x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_N^2 = \sum x^2, \\ a_{12} &= 1 \cdot x_1 + 1 \cdot x_2 + \dots + 1 \cdot x_N = \sum x, \end{aligned}$$

而其右边是

$$B_1 = 1 \cdot y_1 + 1 \cdot y_2 + \cdots + 1 \cdot y_N = \sum y,$$

$$B_2 = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \cdots + x_N y_N = \sum xy.$$

表 3.7 A 表

$a$	$b$	$1$
$N$	$\sum x$	$\sum y$
$\sum x$	$\sum x^2$	$\sum xy$

表 3.8 C 表

$j =$	$\sum y$	$\sum xy$
$a$	$\frac{\sum x^2}{N \sum x^2 - (\sum x)^2}$	$\frac{-\sum x}{N \sum x^2 - (\sum x)^2}$
$b$	$\frac{-\sum x}{N \sum x^2 - (\sum x)^2}$	$\frac{N}{N \sum x^2 - (\sum x)^2}$

因此,得 A 表如表 3.7, 得 C 表(逆矩陣)如表 3.8。这就是說, 估計值的解是

$$\left. \begin{aligned} a &= \frac{\sum x^2 \sum y - \sum x \sum xy}{N \sum x^2 - (\sum x)^2}, \\ b &= \frac{-\sum x \sum y + N \sum xy}{N \sum x^2 - (\sum x)^2}. \end{aligned} \right\} \quad (3.16)$$

由(2.6)和(2.7), 又得到它們的下列性质:

$$E(a) = \alpha, \quad E(b) = \beta, \quad (3.17)$$

$$\left. \begin{aligned} V(a) &= \frac{\sum x^2}{N \sum x^2 - (\sum x)^2} \sigma^2, \\ V(b) &= \frac{N}{N \sum x^2 - (\sum x)^2} \sigma^2, \\ V(a, b) &= \frac{-\sum x}{N \sum x^2 - (\sum x)^2} \sigma^2. \end{aligned} \right\} \quad (3.18)$$

殘差平方和的定义式是

$$S_E = \sum_i (y_i - a - bx_i)^2, \quad (3.19)$$

而計算公式(1.13)变为

$$S_E = \sum_i y_i^2 - (a \sum y + b \sum xy). \quad (3.20)$$

并且  $V_E = S_E / (N - 2)$  是  $\sigma^2$  的无偏估計(在这种情形下, 参数是  $\alpha$  和  $\beta$ , 所以  $p=2$ )。

[注] 若数据的构造为  $y_i = \beta_0 + \beta_1(x_i - \bar{x}) + \varepsilon_i$ , 此处  $\bar{x} = \sum_1^N x_i / N$ , 则计算颇为简单(希读者自己去做——可参看 §10)。

例4 組合測定 設有两个物品, 它們的重量是  $\beta_1$  和  $\beta_2$ . 首先称  $\beta_1$  两次得数据  $y_1, y_2$ , 其次把两个物品放在一起你得数据  $y_3$ , 最后称  $\beta_2$  得数据  $y_4$ . 这时, 数据的构造是

$$\left. \begin{aligned} y_1 &= \beta_1 + \varepsilon_1, \\ y_2 &= \beta_1 + \varepsilon_2, \\ y_3 &= \beta_1 + \beta_2 + \varepsilon_3, \\ y_4 &= \beta_2 + \varepsilon_4. \end{aligned} \right\} \quad (3.21)$$

表 3.9 X 表			表 3.10 A 表			表 3.11 C 表		
$\beta_1$	$\beta_2$	数据	$b_1$	$b_2$	1	1 =	$B_1$	$B_2$
1	0	$y_1$	3	1	$B_1 = y_1 + y_2 + y_3$	$b_1$	$\frac{2}{5}$	$-\frac{1}{5}$
1	0	$y_2$						
1	1	$y_3$	1	2	$B_2 = y_3 + y_4$	$b_2$	$-\frac{1}{5}$	$\frac{3}{5}$
0	1	$y_4$						

所以得 X 表如表 3.9。由此求 A 表, 便得表 3.10。这就是說

$$\left. \begin{aligned} 3b_1 - b_2 &= B_1, \\ b_1 + 2b_2 &= B_2. \end{aligned} \right\} \quad (3.22)$$

解上列方程, 便得

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= \frac{2}{5} B_1 + \frac{-1}{5} B_2, \\ b_2 &= \frac{-1}{5} B_1 + \frac{3}{5} B_2 \end{aligned} \right\} \quad (3.23)$$

(表 3.11)。这样一来, 最小二乘估計是

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= \frac{1}{5} (2y_1 + 2y_2 + y_3 - y_4), \\ b_2 &= \frac{1}{5} (-y_1 - y_2 + 2y_3 + 3y_4). \end{aligned} \right\} \quad (3.24)$$

而且它們具有下列性質：

$$E(b_1) = \beta_1, E(b_2) = \beta_2, \quad (3.25)$$

$$V(b_1) = \frac{2}{5} \sigma^2, V(b_2) = \frac{3}{5} \sigma^2, V(b_1, b_2) = -\frac{1}{5} \sigma^2. \quad (3.26)$$

殘差平方和的計算公式(1.13)變成

$$S_E = (y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 + y_4^2) - (b_1 B_1 + b_2 B_2). \quad (3.27)$$

以  $N-p=4-2=2$  去除上式，便得到  $\sigma^2$  的無偏估計。

[注] (3.26) 可以从 (3.24) 得到，如

$$V(b_1) = \left\{ \left( \frac{2}{5} \right)^2 + \left( \frac{2}{5} \right)^2 + \left( \frac{1}{5} \right)^2 + \left( -\frac{1}{5} \right)^2 \right\} \sigma^2 = \frac{10}{25} \sigma^2 = \frac{2}{5} \sigma^2.$$

但一般从  $C$  表來求比較簡單。

**例 5 合成設計 (composite design) ①, ②** 設數據的構造為

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 + \beta_{33} x_3^2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \varepsilon, \quad (3.28)$$

并取  $x_1, x_2, x_3$  如表 3.12 (图 3.3)。于是得  $X$  表如表 3.13。

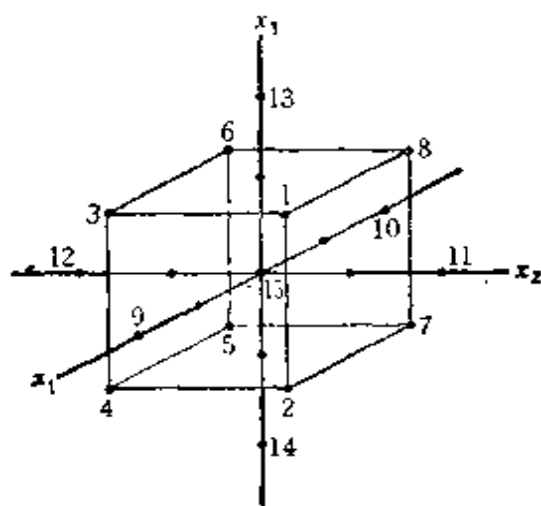


图 3.3 合成設計

① Box-Wilson: J. Roy. Stat. Soc., Ser. B, 13 (1951), 1~45; Box: Biometrics, 10 (1954), 16~60; 島田: 品質管理, 7 (1956), 295; 森口: 品質管理, 7 (1956), 433~434.

② 这就是所謂“求最优条件的試驗設計”的一个步驟。除上列文献以外, Cochran-Cox [4] 和 Davies [29] 都有詳細的討論。——譯者注

\* 表 3.12 試驗方案

No.	$x_1$	$x_2$	$x_3$
1	1	1	1
2	1	1	-1
3	1	-1	1
4	1	-1	-1
5	-1	1	1
6	-1	1	-1
7	-1	-1	1
8	-1	-1	-1
9	2	0	0
10	-2	0	0
11	0	2	0
12	0	-2	0
13	0	0	2
14	0	0	-2
15	0	0	0

表 3.13  $X$  表

$\beta_0$	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_3$	$\beta_{11}$	$\beta_{22}$	$\beta_{33}$	$\beta_{12}$	$\beta_{13}$	$\beta_{23}$	数据
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$y_1$
1	1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	$y_2$
1	1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1	$y_3$
1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	$y_4$
1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	$y_5$
1	-1	1	-1	1	1	1	1	-1	-1	$y_6$
1	-1	-1	1	1	1	1	-1	1	-1	$y_7$
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1	$y_8$
1	2	0	0	4	0	0	0	0	0	$y_9$
1	-2	0	0	4	0	0	0	0	0	$y_{10}$
1	0	2	0	0	4	0	0	0	0	$y_{11}$
1	0	-2	0	0	4	0	0	0	0	$y_{12}$
1	0	0	2	0	0	4	0	0	0	$y_{13}$
1	0	0	-2	0	0	4	0	0	0	$y_{14}$
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$y_{15}$

由此造出正規方程( $A$ 表), 便得表 3.14。例如

$$B_1 = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 - y_5 - y_6 - y_7 - y_8 + 2y_9 - 2y_{10},$$

$$B_{22} = y_1 + \cdots + y_8 + 4y_{11} + 4y_{12}.$$

表 3.14  $A$  表

$b_0$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_{11}$	$b_{22}$	$b_{33}$	$b_{12}$	$b_{13}$	$b_{23}$	$=1$
15				16	16	16				$B_0$
	16									$B_1$
		16								$B_2$
			16							$B_3$
16				40	8	8				$B_{11}$
16				8	40	8				$B_{22}$
16				8	8	40				$B_{33}$
							8			$B_{12}$
								8		$B_{13}$
									8	$B_{23}$

其解如下:

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{B_1}{16}, b_2 = \frac{B_2}{16}, b_3 = \frac{B_3}{16}, \\ b_{12} &= \frac{B_{12}}{8}, b_{13} = \frac{B_{13}}{8}, b_{23} = \frac{B_{23}}{8}, \\ b_0 &= (224B_0 - 64B_{11} - 64B_{22} - 64B_{33})/288; \\ b_{11} &= (-64B_0 + 26B_{11} + 17B_{22} + 17B_{33})/288, \\ b_{22} &= (-64B_0 + 17B_{11} + 26B_{22} + 17B_{33})/288, \\ b_{33} &= (-64B_0 + 17B_{11} + 17B_{22} + 26B_{33})/288. \end{aligned}$$

#### § 4 綫性估計理論

关于最小二乘法的理論基础, 我們可以举出本节将要叙述的綫性估計理論作为范例。

和 § 1 一样, 設数据的构造含有  $p$  个参数  $\beta_i (i=1, 2, \dots, p)$ , 即

$$y_\alpha = \sum_i x_{\alpha i} \beta_i + \varepsilon_\alpha \quad (\alpha=1, 2, \dots, N), \quad (4.1)$$

并設誤差  $\varepsilon_\alpha$  滿足假定 (1) ~ (3) (这里不需要正态性的假設 (4)), 以及正規方程的系数矩陣  $[a_{ij}]$  是滿秩的 (否則, 可以按照 § 7 的方法作变换, 除掉无用参数, 然后再利用本节的理論)。

这时, 我們可以利用数据的一次式

$$\hat{\theta} = \sum_\alpha c_\alpha y_\alpha \quad (4.2)$$

来估計参数的一次式

$$\theta = \sum_i l_i \beta_i. \quad (4.3)$$

适当地定出 (4.2) 的系数  $c_\alpha$ , 使得 (4.2) 是 (4.3) 的无偏估計。其条件是

$$E\left(\sum_\alpha c_\alpha y_\alpha\right) = \sum_i l_i \beta_i, \quad (4.4)$$

也就是

$$\sum_\alpha c_\alpha \sum_i x_{\alpha i} \beta_i = \sum_i l_i \beta_i. \quad (4.5)$$

所以, 不管  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$  为何值, 上式都必须成立。因此, 必须有

$$\sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha i} = l_i \quad (i=1, 2, \dots, p), \quad (4.6)$$

当  $N$  个系数  $c_1, c_2, \dots, c_N$  满足这  $p$  个关系式时, (4.2) 才是 (4.3) 的无偏估计。

但是, 当  $N > p$  时, 这种系数的取法很多, 因此, 形如 (4.2) 的无偏估计 (线性无偏估计) 也有很多。其中方差为最小的叫做“最优线性无偏估计”, 一般, 在假定 (1) ~ (3) 之下, 形如 (4.2) 的一次式的方差是

$$V\left(\sum_{\alpha} c_{\alpha} y_{\alpha}\right) = \sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 \sigma^2, \quad (4.7)$$

所以, 在满足 (4.6) 的  $c_1, c_2, \dots, c_N$  中, 使  $\sum_{\alpha} c_{\alpha}^2$  为最小的那些给出了最优线性无偏估计。

我们有下列的

**定理** 参数一次式的最优线性无偏估计, 由以参数的最小二乘估计代替参数而得的式子给出。

**证明** 把最小二乘估计  $b_i$  代入 (4.3) 的  $\beta_i$ , 然后利用 (1.11) 和 (1.10), 使得

$$\begin{aligned} \sum_i l_i b_i &= \sum_i l_i \sum_j c_{ij} B_j = \sum_i l_i \sum_j c_{ij} \sum_{\alpha} x_{\alpha j} y_{\alpha} \\ &= \sum_{\alpha} \left( \sum_i \sum_j l_i c_{ij} x_{\alpha j} \right) y_{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.8)$$

上式具有 (4.2) 的形状, 特别是它的系数为

$$c_{\alpha}^* = \sum_i \sum_j l_i c_{ij} x_{\alpha j}. \quad (4.9)$$

这满足无偏性的条件 (4.6), 可以验证如下。

$$\sum_{\alpha} c_{\alpha}^* x_{\alpha k} = \sum_{\alpha} \sum_i \sum_j l_i c_{ij} x_{\alpha j} x_{\alpha k} = \sum_i \sum_j l_i c_{ij} a_{jk} = \sum_i l_i \delta_{ik} = l_k. \quad (4.10)$$

因此, 对于满足 (4.6) 的任意  $c_{\alpha}$ , 有

$$\sum_{\alpha} (c_{\alpha} - c_{\alpha}^*) x_{\alpha i} = l_i - l_i = 0, \quad (4.11)$$

再乘上  $\sum_j c_{ij} l_j$  并对  $i$  求和, 使得



$$\sum_{\alpha} (c_{\alpha} - c_{\alpha}^*) c_{\alpha}^* = 0. \quad (4.12)$$

于是

$$\sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 = \sum_{\alpha} \{(c_{\alpha} - c_{\alpha}^*) + c_{\alpha}^*\}^2 = \sum_{\alpha} (c_{\alpha} - c_{\alpha}^*)^2 + \sum_{\alpha} c_{\alpha}^{*2} \geq \sum_{\alpha} c_{\alpha}^{*2}. \quad (4.13)$$

这就是說, 对于满足 (4.6) 的任意  $c_{\alpha}$ , 有  $\sum_{\alpha} c_{\alpha}^2 \geq \sum_{\alpha} c_{\alpha}^{*2}$ . 所以, 以  $c_{\alpha}^*$  为系数的一次式 (4.8) 就是最优綫性无偏估計. 此外, 为使 (4.13) 的等号成立, 对所有的  $\alpha$  必須有  $c_{\alpha} = c_{\alpha}^*$ , 因此, 最优綫性无偏估計是唯一的. 証毕

[注] 有人把上述定理叫做 Марков 定理, 我們可以把它叫做綫性估計理論中的主要定理。

## § 5 正态估計理論

在上节中已經看到, 最小二乘估計給出了最优綫性无偏估計. 不过, 那时对于誤差只假設滿足假定 (1) ~ (3), 而不要求正态性的假定 (4). 因为, 在那里我們只把形如 (4.2) 的“綫性”估計量当作估計量. 如果再加上正态性的假定, 那末可以証明, 即使更一般地取估計量来比較, 最小二乘估計仍然給出最优的无偏估計量. 我們将在本节討論这一点 (仍然假設矩陣  $[a_{ij}]$  是滿秩的)。

設数据的构造为

$$y_{\alpha} = \sum_i x_{\alpha i} \beta_i + \varepsilon_{\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N), \quad (5.1)$$

而誤差  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_N$  独立地遵循正态分布  $N(0, \sigma^2)$ . 这时数据  $y_1, y_2, \dots, y_N$  的联合分布的概率密度是

$$\begin{aligned} f(y_1, y_2, \dots, y_N) &= \prod_{\alpha=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \left(y_{\alpha} - \sum_i x_{\alpha i} \beta_i\right)^2\right\} \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{N}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{\alpha} \left(y_{\alpha} - \sum_i x_{\alpha i} \beta_i\right)^2\right\}. \end{aligned} \quad (5.2)$$

一般, 我們有下列的

**定理** 当数据  $y_1, y_2, \dots, y_N$  的联合分布的概率密度函数  $f(y_1, y_2, \dots, y_N)$  恰好依赖于  $P$  个参数  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_P$  时, 如果算子

$$L = \sum_i a_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} + \sum_{ij} b_{ij} \frac{\partial^2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \quad (5.3)$$

(此处  $a_i, b_{ij}$  是只依赖于  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_P$  的函数) 只依赖于数据的函数  $\psi(y_1, y_2, \dots, y_N)$  和只依赖于参数的函数  $\Theta(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_P)$ , 使得

$$L[f] = (\psi - \Theta)f, \quad (5.4)$$

那末  $\psi$  就是  $\Theta$  的无偏估计, 并且是  $\Theta$  的无偏估计量中方差最小的一个。这种估计量实际上是唯一的。

**证明** 首先, 因为  $f$  是  $N$  维空间的概率密度, 所以对于任意的  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_P$  有

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} f(y_1, y_2, \dots, y_N) dy_1 dy_2 \cdots dy_N = 1. \quad (5.5)$$

把算子  $L$  作用于上式, 再利用 (5.4) 便得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (\psi - \Theta) f dy_1 dy_2 \cdots dy_N = 0, \quad (5.6)$$

亦即

$$E\psi = \Theta. \quad (5.7)$$

于是  $\psi$  是  $\Theta$  的无偏估计。

其次, 令  $\varphi(y_1, y_2, \dots, y_N)$  为  $\Theta$  的任意无偏估计量, 则必须有

$$E\varphi = \Theta. \quad (5.8)$$

从 (5.7) 和 (5.8) 推知, 对于任意的  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_P$ , 有

$$E(\varphi - \psi) = 0, \quad (5.9)$$

亦即

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi - \psi) f dy_1 dy_2 \cdots dy_N = 0. \quad (5.10)$$

把算子  $L$  作用于上式, 再利用 (5.4) 便得

$$\int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi - \psi) (\psi - \Theta) f dy_1 dy_2 \cdots dy_N = 0, \quad (5.11)$$

这意味着

$$V(\varphi - \psi, \psi) = 0. \quad (5.12)$$

这样,我们可以导出

$$\begin{aligned} V(\varphi) &= V((\varphi - \psi) + \psi) = V(\varphi - \psi) + 2V(\varphi - \psi, \psi) + V(\psi) \\ &= V(\varphi - \psi) + V(\psi) \geq V(\psi). \end{aligned} \quad (5.13)$$

由此可知,  $\Theta$  的任意无偏估计量  $\varphi$  的方差不小于  $\psi$  的方差。为使 (5.13) 的等号成立, 必须有  $V(\varphi - \psi) = 0$ 。由此以及 (5.9) 推知,  $\varphi$  与  $\psi$  必须具有概率为 1 地相等。 証毕

系 在上述情形中,  $\Theta$  的最优无偏估计量  $\psi$  的方差可以由

$$V(\psi) = L[\Theta] \quad (5.14)$$

求出。

証明 把  $L$  作用于 (5.7), 使得  $E\psi(\psi - \Theta) = L[\Theta]$ 。但因

$$E\psi(\psi - \Theta) = E\psi^2 - \Theta^2 = V(\psi),$$

于是 (5.14) 成立。 証毕

在上述的概率密度 (5.2) 中, 相当于  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_p$  的是  $\beta_i (i=1, 2, \dots, p)$  和  $\sigma^2$  这  $p+1$  个参数。关于  $\beta_i$  微分  $\ln f$ , 使得

$$\frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \beta_i} = -\frac{1}{\sigma^2} \sum_{\alpha} \left( y_{\alpha} - \sum_k x_{\alpha k} \beta_k \right) x_{\alpha i} = -\frac{1}{\sigma^2} \left( B_i - \sum_k a_{ik} \beta_k \right). \quad (5.15)$$

所以, 乘上  $\sigma^2 \sum_j c_{ij} l_j$  并对  $i$  求和, 使得

$$\begin{aligned} \frac{1}{f} \sigma^2 \sum_i \sum_j c_{ij} l_j \frac{\partial f}{\partial \beta_i} &= \sum_i \sum_j c_{ij} l_j B_i - \sum_i \sum_j \sum_k c_{ij} a_{ik} l_j \beta_k \\ &= \sum_j l_j b_j - \sum_j l_j \beta_j. \end{aligned} \quad (5.16)$$

这意味着, 对

$$L = \sigma^2 \sum_i \sum_j c_{ij} l_j \frac{\partial}{\partial \beta_i} \quad (5.17)$$

来说,

$$\psi = \sum_j l_j b_j, \quad (5.18)$$

$$\Theta = \sum_j l_j \beta_j \quad (5.19)$$

满足条件(5.4)。由此可知,  $\sum_j l_j \beta_j$  的最优无偏估计就是最小二乘估计  $\sum_j l_j b_j$ 。并由(5.14)推知, 它的方差是

$$V\left(\sum_j l_j b_j\right) = \sigma^2 \sum_i \sum_j c_{ij} l_i \frac{\partial}{\partial \beta_i} \left(\sum_k l_k \beta_k\right) = \sum_i \sum_j c_{ij} l_i l_j \sigma^2. \quad (5.20)$$

其次, 我们将在误差方差  $\sigma^2$  的估计问题上应用上述定理。为了简单起见, 记  $\theta = \sigma^2$ , 然后关于  $\theta$  微分(5.2)的  $\ln$ , 使得

$$\frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \theta} = -\frac{N}{2\theta} + \frac{1}{2\theta^2} \sum_{\alpha} \left(y_{\alpha} - \sum_i x_{\alpha i} \beta_i\right)^2. \quad (5.21)$$

另一方面, 关于  $\beta_j$  微分(5.15), 使得

$$\begin{aligned} \frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial \beta_i \partial \beta_j} &= -\frac{1}{f^2} \left(\frac{\partial f}{\partial \beta_i}\right) \left(\frac{\partial f}{\partial \beta_j}\right) \\ &= -\frac{1}{\theta} \sum_{\alpha} x_{\alpha i} x_{\alpha j} = -\frac{1}{\theta} a_{ij}. \end{aligned} \quad (5.22)$$

因此, 再次利用(5.15)便可导出

$$\frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial \beta_i \partial \beta_j} = -\frac{1}{\theta} a_{ij} + \frac{1}{\theta^2} \left(B_i - \sum_k a_{ik} \beta_k\right) \left(B_j - \sum_k a_{jk} \beta_k\right). \quad (5.23)$$

这样, 若令

$$I_i = 2\theta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} - \theta^2 \sum_i \sum_j c_{ij} \frac{\partial^2}{\partial \beta_i \partial \beta_j}, \quad (5.24)$$

则对于

$$\psi = \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \sum_i \sum_j c_{ij} \sum_{\alpha} x_{\alpha i} y_{\alpha} \sum_{\beta} x_{\alpha j} y_{\beta} = S_E, \quad (5.25)$$

$$\Theta = (N-p)\theta, \quad (5.26)$$

(5.4)成立。所以, 在  $(N-p)\theta$  的无偏估计量中,  $S_E$  的方差最小。因此,  $V_E = S_E / (N-p)$  是  $\theta = \sigma^2$  的最优无偏估计。

由(5.14)算得  $S_E$  的方差是

$$V(\psi) = \left(2\theta^2 \frac{\partial}{\partial \theta} - \theta^2 \sum_i \sum_j c_{ij} \frac{\partial^2}{\partial \beta_i \partial \beta_j}\right) (N-p)\theta = 2(N-p)\theta^2. \quad (5.27)$$

[注1] 上述定理是从 Bhattacharyya<sup>①</sup> 的讨论中摘出来的，它是这里所需要的理论。

[注2] 即使不假设正态性，但是，如果假设四阶矩存在，并且限制估计量的形式为数据的二次型，那末也可以得到相同的结论（参看 §21 末尾的注）。

---

① A. Bhattacharyya: Sankhya, 8 (1946), 1~14; 还可参看 G. V. Sethe: Annals of Math. Stat., 29 (1949), 1~27, 特别是 p. 9.

## 第2章 参数組的变换

### §6 变换的一般公式

到此为止,为了简单起见,我們只討論了正規方程的系数矩陣  $[a_{ij}]$  是滿秩(行列式  $|a_{ij}| \neq 0$ ) 的情形. 但如果遇到的不是这种情形,就不能使用逆矩陣  $[c_{ij}]$ , 因此有必要对以前的討論作一些修改. 为此,我們先在本节討論参数的綫性变换,作为准备工作. 而这个題目本身也是有用的.

設数据的构造由  $p$  个参数  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$  表达为

$$y_{\alpha} = \sum_i x_{\alpha i} \beta_i + \varepsilon_{\alpha} \quad (\alpha=1, 2, \dots, N). \quad (6.1)$$

这时我們考虑下列以  $p$  阶滿秩矩陣  $[p_{ik}]$  为系数的变换

$$\beta_i = \sum_k p_{ik} \beta'_k \quad (i=1, 2, \dots, p), \quad (6.2)$$

将原参数組变换为新的参数組  $\beta'_1, \beta'_2, \dots, \beta'_p$ . 这样一来,数据的构造就由新的参数表达为

$$y_{\alpha} = \sum_k x'_{\alpha k} \beta'_k + \varepsilon_{\alpha} \quad (\alpha=1, 2, \dots, N). \quad (6.3)$$

此处,把(6.2)代入(6.1),便知新的系数  $x'_{\alpha k}$  是

$$x'_{\alpha k} = \sum_i x_{\alpha i} p_{ik} \quad (\alpha=1, 2, \dots, N; k=1, 2, \dots, p). \quad (6.4)$$

因此,新的参数估計值  $b'_1, b'_2, \dots, b'_p$  的正規方程是

$$\sum_k a'_{kh} b'_k = B'_h \quad (h=1, 2, \dots, p), \quad (6.5)$$

其左边的系数是

$$\begin{aligned} a'_{kh} &= \sum_{\alpha} x'_{\alpha k} x'_{\alpha h} = \sum_{\alpha} \left( \sum_i x_{\alpha i} p_{ik} \right) \left( \sum_j x_{\alpha j} p_{jh} \right) = \sum_i \sum_j \left( \sum_{\alpha} x_{\alpha i} x_{\alpha j} \right) p_{ik} p_{jh} \\ &= \sum_i \sum_j a_{ij} p_{ik} p_{jh} \quad (k, h=1, 2, \dots, p), \end{aligned} \quad (6.6)$$

而其右边則是

$$\begin{aligned} B'_k &= \sum_{\alpha} x'_{\alpha k} y_{\alpha} = \sum_{\alpha} \left( \sum_i x_{\alpha i} p_{ik} \right) y_{\alpha} = \sum_i \left( \sum_{\alpha} x_{\alpha i} y_{\alpha} \right) p_{ik} \\ &= \sum_i B_i p_{ik} \quad (k=1, 2, \dots, p). \end{aligned} \quad (6.7)$$

如果新的正规方程(6.5)的解可以表达为右边的一次式

$$b'_h = \sum_k c'_{hk} B'_k \quad (h=1, 2, \dots, p), \quad (6.8)$$

那末利用与(6.2)相同的式子便可求得原参数  $\beta_i$  的估计值  $b_i$  为

$$b_i = \sum_h p_{ih} b'_h \quad (i=1, 2, \dots, p). \quad (6.9)$$

把(6.8)代入上式,再把(6.7)代入  $B'_k$ , 便得到

$$b_i = \sum_h \sum_k \sum_j p_{ih} c'_{hk} p_{jk} B_j \quad (i=1, 2, \dots, p). \quad (6.10)$$

上式的形状是

$$b_i = \sum_j c_{ij} B_j \quad (i=1, 2, \dots, p), \quad (6.11)$$

此处

$$c_{ij} = \sum_h \sum_k p_{ih} p_{jk} c'_{hk} \quad (i, j=1, 2, \dots, p). \quad (6.12)$$

此外,利用(6.9)和(6.7)便可求得解与右边的内积为

$$\sum_i b_i B_i = \sum_i \left( \sum_h p_{ih} b'_h \right) B_i = \sum_h \left( \sum_i B_i p_{ih} \right) b'_h = \sum_h b'_h B'_h. \quad (6.13)$$

由此可知,它对于现在所考虑的变换是不变的。

**例 1** 作为极其简单的特殊情形,设(6.2)具有下列形状(尺度变化):

$$\beta_i = p_i \beta'_i \quad (i=1, 2, \dots, p). \quad (6.14)$$

这时(6.4), (6.6), (6.7), (6.9)和(6.12)分别是

$$x'_{\alpha i} = x_{\alpha i} p_i \quad (\alpha=1, 2, \dots, N; i=1, 2, \dots, p), \quad (6.15)$$

$$a'_{ij} = a_{ij} p_i p_j \quad (i, j=1, 2, \dots, p), \quad (6.16)$$

$$B'_i = B_i p_i \quad (i=1, 2, \dots, p), \quad (6.17)$$

$$b_i = p_i b'_i \quad (i=1, 2, \dots, p), \quad (6.18)$$

和

$$c_{ij} = p_i p_j c'_{ij} \quad (i, j=1, 2, \dots, p). \quad (6.19)$$

〔注〕 这个变换在实际的数值计算中常常用到。其要点是,适当地取  $p_i$

为 10 的乘幂,使得变换后的正规方程的系数不至于太大。

**例 2** 一般假设矩阵  $[p_{ik}]$  是满秩的,所以它的逆矩阵  $[q_{ki}]$  存在。若利用这个逆矩阵来写变换公式,则对应于 (6.2), (6.4), (6.6), (6.7), (6.9) 和 (6.12), 分别有

$$\beta'_k = \sum_i q_{ki} \beta_i \quad (k=1, 2, \dots, p), \quad (6.20)$$

$$a_{ai} = \sum_k x'_{ak} q_{ki} \quad (i=1, 2, \dots, p), \quad (6.21)$$

$$x_{ij} = \sum_h \sum_k a'_{hk} q_{hi} q_{kj} \quad (i, j=1, 2, \dots, p), \quad (6.22)$$

$$B_i = \sum_k B'_k q_{ki} \quad (i=1, 2, \dots, p), \quad (6.23)$$

$$b'_k = \sum_i q_{ki} b_i \quad (k=1, 2, \dots, p), \quad (6.24)$$

和

$$c'_{hk} = \sum_i \sum_j q_{hi} q_{kj} c_{ij} \quad (h, k=1, 2, \dots, p). \quad (6.25)$$

## §7 无用参数存在的情形

本节讨论正规方程的系数矩阵  $[a_{ij}]$  是非满秩 (行列式  $|a_{ij}|=0$ ) 的情形。

一般, 矩阵  $[a_{ij}]$  是对称而且半正定的 (注 1)。因此, 它的特征值是正的或等于 0。设其中正的有  $r$  个 ( $r \leq p$ )。  $r$  与  $[a_{ij}]$  的秩相等。若  $r=p$ , 则  $[a_{ij}]$  是满秩的。本节以下讨论  $r < p$  的情形。

在上节所讨论的变换中, 若特别地选择适当的矩阵  $[p_{ik}]$ , 则可以使得新的矩阵  $[a'_{hk}]$  具有下列形状:

$$[a'_{hk}] = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & \lambda_r & & 0 \\ & & & 0 & \\ 0 & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 \end{bmatrix}, \quad (7.1)$$

此处  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r$  都是正的数 (可以把这些数看做特征值, 但不这样做也可以)。于是  $a'_{hk}=0$  ( $h \neq k$ ), 而且

$$\left. \begin{aligned} a'_{kk} &= \lambda_k \quad (k=1, \dots, r), \\ &= 0 \quad (k=r+1, \dots, p). \end{aligned} \right\} \quad (7.2)$$



但是,一般有  $a'_{kk} = \sum_{\alpha} (x'_{\alpha k})^2$ , 所以从 (7.2) 的后面  $p-r$  个式子便可得出

$$x'_{\alpha k} = 0 \quad (\alpha = 1, \dots, N; k = r+1, \dots, p), \quad (7.3)$$

因此

$$B'_k = \sum_{\alpha} x'_{\alpha k} y_{\alpha} = 0 \quad (k = r+1, \dots, p). \quad (7.4)$$

这样,新的正规方程具有下列形状:

$$\left. \begin{aligned} \lambda_1 b'_1 &= B'_1, \dots, \lambda_r b'_r = B'_r, \\ 0 \cdot b'_{r+1} &= 0, \dots, 0 \cdot b'_p = 0. \end{aligned} \right\} \quad (7.5)$$

其中,前面的  $r$  个方程可以立刻解出,即

$$b'_k = B'_k / \lambda_k \quad (k = 1, \dots, r). \quad (7.6)$$

但是,  $b'_{r+1}, \dots, b'_p$  是不定的。这意味着,无论  $b'_{r+1}, \dots, b'_p$  取什么样的值, (7.5) 都得到满足 (注 2)。

[注 1] 令  $\xi_1, \dots, \xi_p$  为实变数,并考虑二次型

$$\begin{aligned} \sum_i \sum_j a_{ij} \xi_i \xi_j &= \sum_i \sum_j \left( \sum_{\alpha} x_{\alpha i} x_{\alpha j} \right) \xi_i \xi_j = \sum_{\alpha} \left( \sum_i x_{\alpha i} \xi_i \right) \left( \sum_j x_{\alpha j} \xi_j \right) \\ &= \sum_{\alpha} \left( \sum_i x_{\alpha i} \xi_i \right)^2. \end{aligned} \quad (7.7)$$

由于这个式子决不为负,所以矩阵  $[a_{ij}]$  是半正定的。

[注 2] (7.3) 意味着新参数的

$X$  表具有表 7.1 的形状。这就是说,  $\beta'_{r+1}, \dots, \beta'_p$  实际上对于数据毫无影响 (即为无用参数)。因此,不能从这里的数据得到有关  $\beta'_{r+1}, \dots, \beta'_p$  的任何情报,这是当然的。实际上,  $b'_{r+1}, \dots, b'_p$  为不定值,就是这种事实的反映。

表 7.1 新的  $X$  表

$\beta'_1$	$\dots$	$\beta'_r$	$\beta'_{r+1}$	$\dots$	$\beta'_p$	数据
$x'_{11}$	$\dots$	$x'_{1r}$	0	$\dots$	0	$y_1$
$x'_{21}$	$\dots$	$x'_{2r}$	0	$\dots$	0	$y_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$x'_{N1}$	$\dots$	$x'_{Nr}$	0	$\dots$	0	$y_N$

现在,我们来考虑把解表达为正规方程右边的一次式

$$b'_h = \sum_k c_{hk} B'_k \quad (h = 1, \dots, p). \quad (7.8)$$

于是,由 (7.6) 推知必须有

$$c'_{hk} = \delta'_{hk} \lambda_k \quad (h, k = 1, \dots, r). \quad (7.9)$$

表 7.2  $C$  表

$1 = L'_1 \quad \cdots \quad L'_r$	$B'_{r+1} \quad \cdots \quad B'_p$	
$b'_1$	$\frac{1}{\lambda_1} \quad 0$	$c_{1,r+1} \quad \cdots \quad c_{1p}$
$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$b'_r$	$0 \quad \frac{1}{\lambda_r}$	$c_{r,r+1} \quad \cdots \quad c_{rp}$
$b'_{r+1}$	$c_{r+1,1} \quad \cdots \quad c_{r+1,r}$	$c_{r+1,r+1} \quad \cdots \quad c_{r+1,p}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$b'_p$	$c_{p1} \quad \cdots \quad c_{pr}$	$c_{p,r+1} \quad \cdots \quad c_{pp}$

但是,正如(7.4)所示,所有的  $B'_{r+1}, \dots, B'_p$  都等于 0, 并且  $b'_{r+1}, \dots, b'_p$  为不定值, 所以其他系数都可以是任意的。这就是说,  $C$  表具有表 7.2 的形状。在表中, 除了明确写进数值的地方以外, 其余都是不定的。因此, 当由 (6.12) 回复到原参数组的  $C$  表的

元素时, 就会包含由表 7.2 中的不定元素所引起的不定性。

[注 3] 当  $r < p$  时, 矩阵  $[c'_{ij}]$  不是  $[a'_{ij}]$  的逆矩阵 (逆矩阵不存在)。事实上, 作乘积便得

$$[a'_{hk}][c'_{kj}] = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \dots 0 \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & \lambda_r & 0 \dots 0 \\ \hline 0 \dots 0 & 0 \dots 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 \dots 0 & 0 \dots 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & \times \dots \times \\ \lambda_1 & & \vdots \\ 0 & 1 & \times \dots \times \\ \hline \times \dots \times & \times \dots \times \\ \vdots & \vdots \\ \times \dots \times & \times \dots \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \times \dots \times \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & \times \dots \times \\ \hline 0 \dots 0 & 0 \dots 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 \dots 0 & 0 \dots 0 \end{bmatrix}, \quad (7.10)$$

这不是完整的单位矩阵。

其次, 讨论估计问题。对于估计参数的一次式

$$\theta = l_1 \beta_1 + l_2 \beta_2 + \dots + l_p \beta_p, \quad (7.11)$$

利用 (6.2) 便可以把上式改写成

$$\theta = \sum_i l_i \left( \sum_k p_{ik} \beta'_k \right) = \sum_k \left( \sum_i l_i p_{ik} \right) \beta'_k = \sum_k l'_k \beta'_k, \quad (7.12)$$

就是说, 它的系数变成

$$l'_k = \sum_i l_i p_{ik} \quad (k = 1, 2, \dots, p). \quad (7.13)$$

其中,若  $l'_{r+1}, \dots, l'_p$  都等于 0, 則

$$\theta = l'_1 \beta'_1 + \dots + l'_r \beta'_r, \quad (7.14)$$

所以利用 (7.6) 便可求得其最小二乘估计为

$$\hat{\theta} = l'_1 b'_1 + \dots + l'_r b'_r. \quad (7.15)$$

但是,如果  $l'_{r+1}, \dots, l'_p$  中有些不等于 0, 那末  $\theta$  就不可能用这里的数据来估计。这样,当  $r < p$  时,在参数的一次式 (7.11) 中,有的是可估计的,而有的却不能估计。可估计的条件是,当由上述变换而转变为新的参数时,

$$l'_k = \sum_i l_i p_{ik} = 0 \quad (k = r+1, \dots, p). \quad (7.16)$$

这就是说,把  $[l_i]$  放在矩阵  $[x_{\alpha i}]$  上面而得到的增广矩阵

$$\begin{bmatrix} l_1 & \dots & l_p \\ \dots & \dots & \dots \\ x_{11} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{N1} & \dots & x_{Np} \end{bmatrix} \quad (7.17)$$

的秩等于  $[x_{\alpha i}]$  的秩  $r$  (证明从略)。因为满足这种条件的一次式可以变换为 (7.14) 的形状,所以它可以由 (7.15) 来估计。而且它的方差是 (注 4)

$$V(\hat{\theta}) = \left( \frac{l'^2_1}{\lambda_1} + \dots + \frac{l'^2_r}{\lambda_r} \right) \sigma^2. \quad (7.18)$$

[注 4] (7.15) 可以理解为 §2 的理论之应用,但是也不难直接证明。例如,从 (7.6) 推出

$$b'_k = \sum_{\alpha} x'_{\alpha k} y_{\alpha} / \lambda_k \quad (k=1, \dots, r), \quad (7.19)$$

考虑到 (7.1), 使得

$$V(b'_k) = \sum_{\alpha} x'^2_{\alpha k} \sigma^2 / \lambda_k^2 = \sigma^2 / \lambda_k \quad (k=1, \dots, r) \quad (7.20)$$

和

$$V(b'_k, b'_h) = \sum_{\alpha} x'_{\alpha k} x'_{\alpha h} \sigma^2 / \lambda_h \lambda_k = 0 \quad (k \neq h). \quad (7.21)$$

由此立即推出(7.18)。

最后,残差平方和的定义式可以变换为

$$\begin{aligned} S_E &= \sum_{\alpha} (y_{\alpha} - \sum_i x_{\alpha i} b_i)^2 = \sum_{\alpha} \{y_{\alpha} - \sum_i x_{\alpha i} (\sum_k p_{ik} b'_k)\}^2 \\ &= \sum_{\alpha} \{y_{\alpha} - \sum_k (\sum_i x_{\alpha i} p_{ik}) b'_k\}^2 = \sum_{\alpha} (y_{\alpha} - \sum_k x'_{\alpha k} b'_k)^2, \quad (7.22) \end{aligned}$$

利用(1.13)还可以改写成

$$S_E = \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \sum_k b'_k B'_k. \quad (7.23)$$

此外,把(7.6)和(7.4)代入上式,使得

$$S_E = \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \left( \frac{B_1'^2}{\lambda_1} + \cdots + \frac{B_r'^2}{\lambda_r} \right). \quad (7.24)$$

并且它的数学期望是

$$E(S_E) = (N - r) \sigma^2. \quad (7.25)$$

**直接的证明**

$$\begin{aligned} E(y_{\alpha}^2) &= V(y_{\alpha}) + \{E(y_{\alpha})\}^2 = \sigma^2 + (\sum_k x'_{\alpha k} \beta'_k)^2, \\ E(B_k'^2) &= V(B'_k) + \{E(B'_k)\}^2 \\ &= \sum_{\alpha} x_{\alpha k}^2 \sigma^2 + (\sum_{\alpha} x'_{\alpha k} \sum_h x'_{\alpha h} \beta'_h)^2 \\ &= \lambda_k \sigma^2 + (\sum_h x'_{kh} \beta'_h)^2 \\ &= \lambda_k \sigma^2 + (\lambda_k \beta'_k)^2 \quad (k=1, \dots, r). \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} E(S_E) &= \sum_{\alpha} \{ \sigma^2 + (\sum_k x'_{\alpha k} \beta'_k)^2 \} = \sum_{k=1}^r (\sigma^2 + \lambda_k \beta_k'^2) \\ &= (N - r) \sigma^2. \end{aligned}$$

于是

$$V_E = S_{E'} / (N - r) \quad (7.26)$$

是  $\sigma^2$  的无偏估计。必须注意,上式的分母(自由度)不是  $N - p$  而是  $N - r$ 。因为参数的个数“实际上”只有  $r$  个。

上面对正规方程的系数矩阵是非满秩的情形,讨论了使之变

成形如(7.1)的变换,但在作实际计算的时候,可以不作这种变换,而按照原参数进行计算。这时,与满秩情形的区别有下列几点:

(1) 正规方程的解是不定的。这是由于上述变换中  $b'_{r+1}, \dots, b'_p$  的不定性而引起的。因为这种不定性对“有用的”结果没有任何影响(注5),所以只要从正规方程的许多解中取其任意的一组解即可(注6)。

(2) 由正规方程右边所表达的解的式子,其系数  $c_{ij}$  ( $C$  表的元素)不是唯一确定的,这是由于表 7.2 的不定性而引起的。因为这种不定性对“有用的”结果没有任何影响(注5),所以只要得到一组由右边所表达的解的式子即可(注6)。

(3) 在参数的一次式  $\theta = \sum_i l_i B_i$  中,有的可以用这里的数据来估计,而有的却不能估计。可估计的条件是:(7.17)的秩等于  $[x_{\alpha}]$  的秩,即存在  $c_1, \dots, c_N$  满足

$$l_i = \sum_{\alpha} c_{\alpha} x_{\alpha i} \quad (i=1, 2, \dots, p). \quad (7.27)$$

也就是说,存在着  $\theta$  的一个无偏估计(不一定是最优的)  $\sum_{\alpha} c_{\alpha} y_{\alpha}$ 。

(4) 残差平方和  $S_E$  的数学期望是(7.25)。

除上列几点以外,§1和§2的公式仍然可以适用于一般情形。

[注5] 如果对原参数组,得到了正规方程的一组解  $b_1, \dots, b_p$ , 那末由(6.24)作变换,便得到新参数组的正规方程的解  $b'_1, \dots, b'_p$ , 其中  $b'_1, \dots, b'_r$  部分必须与(7.6)一致(不管  $b'_{r+1}, \dots, b'_p$  是什么), 这时,  $\hat{\theta} = \sum_i l_i b_i$  可以变换为

$$\hat{\theta} = \sum_i l_i b_i = \sum_i l_i \left( \sum_k p_{ik} b'_k \right) = \sum_k l'_k b'_k, \quad (7.28)$$

但若  $\theta$  是可估计的,则必须有  $l'_{r+1} = \dots = l'_p = 0$ , 因此,上式与(7.15)一致。即使利用另外的解来代替  $b_1, \dots, b_p$ , 但因只有  $b'_{r+1}, \dots, b'_p$  发生变化,而  $b'_1, \dots, b'_r$  不变,所以对可估计的  $\theta$  来说,(7.28)的值仍然是相同的。

如果对原参数组,得到了一组由正规方程右边所表达的解式

$$b_i = \sum_j c_{ij} B_j \quad (i=1, \dots, p), \quad (7.29)$$

那末由(6.24)和(6.25)作变换,并利用(6.23)便有

$$b'_k = \sum_h c'_{kh} B'_h \quad (k=1, \dots, p), \quad (7.30)$$

于是对变换后的参数组,得到一组由正规方程右边所表达的解式。其系数的表应该具有表7.2的形状。这样,  $\sum_i \sum_j c_{ij} l_i l_j$  就可变换为

$$\sum_i \sum_j c_{ij} l_i l_j = \sum_i \sum_j \left( \sum_h \sum_k p_{ih} p_{jk} c'_{hk} \right) l_i l_j = \sum_h \sum_k c'_{hk} l'_h l'_k. \quad (7.31)$$

但若有可估计的条件  $l'_{r+1} = \dots = l'_p = 0$ , 则表7.2中的不定部分消掉, 而(7.31)则变成  $l_1^2/\lambda_1 + \dots + l_r^2/\lambda_r$ . 因此, 由(7.18)推出

$$V(\theta) = \sum_i \sum_j c_{ij} l_i l_j \sigma^2. \quad (7.32)$$

即使利用了另一个  $C$  表, 但因变换后的  $c'_{hk}$  对  $h, k=1, \dots, r$  这一部分不会有任何变化, 所以(7.31)的值仍然相同(对可估计的  $\sum_i l_i \beta_i$  来说)。

当用任意一组解  $b_1, \dots, b_p$  来计算  $\sum_i b_i B_i$  时, 可以把它变换为

$$\sum_i b_i B_i = \sum_i \left( \sum_k p_{ik} b'_k \right) B_i = \sum_k b'_k \left( \sum_i B_i p_{ik} \right) = \sum_k b'_k B'_k. \quad (7.33)$$

但若利用(7.6)和(7.4), 则(7.33)变成  $B_1'^2/\lambda_1 + \dots + B_r'^2/\lambda_r$ . 即使利用了另外的解, 但因只有  $b'_{r+1}, \dots, b'_p$  发生变化, 而且相应的  $B'_{r+1}, \dots, B'_p$  都为0, 所以(7.33)的值仍然相同。这样, 对残差平方和的计算公式

$$S_E = \sum_i y_i^2 - \sum_i b_i B_i, \quad (7.34)$$

无论用什么样的解  $b_1, \dots, b_p$ , 其结果都是相同的。

[注6] 在上面已经看到, 即使正规方程的解很多, 但我们只要求出其中一组就够了。因此, 对正规方程的求解可以加上  $(p-r)$  个互不矛盾的条件来求。若能巧妙地选择这些附加条件, 则解往往具有简单的形状。但是附加条件对“有用的”结果没有任何影响, 而且对其在物理上是否有意义也可以不加考虑。Bose [6] 主要就是用这种观点来处理统计分析的。

## §8 例 题

我们将在本节讨论二因子设计和不完全区组设计的分析, 作为上节所述理论的例子。

**例1** 二因子设计 设数据有  $N=12$  个, 其构造是

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \varepsilon_{ij} \quad (i=1, 2, 3; j=1, 2, 3, 4). \quad (8.1)$$

也就是說,  $X$  表如表 8.1 所示(表中的空欄是 0)。

表 8.1  $X$  表

$\mu$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$	$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_3$	$\beta_4$	数据
1	1			1				$y_{11}$
1	1				1			$y_{12}$
1	1					1		$y_{13}$
1	1						1	$y_{14}$
1		1		1				$y_{21}$
1		1			1			$y_{22}$
1		1				1		$y_{23}$
1		1					1	$y_{24}$
1			1	1				$y_{31}$
1			1		1			$y_{32}$
1			1			1		$y_{33}$
1			1				1	$y_{34}$

表 8.2  $A$  表

$m$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$b_1$	$b_2$	$b_3$	$b_4 = 1$	
								$G$
12	4	4	4	3	3	3	3	$G$
4	4			1	1	1	1	$A_1$
4		4		1	1	1	1	$A_2$
4			4	1	1	1	1	$A_3$
3	1	1	1	3				$B_1$
3	1	1	1		3			$B_2$
3	1	1	1			3		$B_3$
3	1	1	1				3	$B_4$

参数是  $\mu, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$  这 8 个 ( $p=8$ )。决定参数估计量  $m, a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3, b_4$  的正规方程如表 8.2 所示。表中的空欄是 0, 其右边为

$$\left. \begin{aligned} G &= \sum_i \sum_j y_{ij}, \\ A_i &= \sum_j y_{ij} \quad (i=1, 2, 3), \\ B_j &= \sum_i y_{ij} \quad (j=1, 2, 3, 4). \end{aligned} \right\} \quad (8.2)$$

但是, 表 8.2 的主要部分的矩陣不是滿秩的, 这可由第二、第三、第四这三行的和等于第一行立刻看出。另外, 由于下面四行的和也等于第一行, 因此可以想象, 秩  $r$  至少比  $p$  低 2。

在正规方程的系数矩陣是非滿秩的情形, 如上节所述, 有两种处理方法。一种是变换参数組, 使无用参数分离出去; 另一种是任意添加条件来求解。

首先, 按照第一种方法来討論。为此, 要依下式把  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  变换为  $\dot{\alpha}_0, \dot{\alpha}_1, \dot{\alpha}_2$ :

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{\alpha}_0 + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\alpha}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2, \\ \alpha_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{\alpha}_0 - \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\alpha}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2, \\ \alpha_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{\alpha}_0 \quad \quad \quad - \frac{2}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2. \end{aligned} \right\} \quad (8.3)$$

又依下式把  $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$  变换为  $\dot{\beta}_0, \dot{\beta}_1, \dot{\beta}_2, \dot{\beta}_3$ :

$$\left. \begin{aligned} \beta_1 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{\beta}_0 + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\beta}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\beta}_2 + \frac{1}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3, \\ \beta_2 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{\beta}_0 - \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\beta}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\beta}_2 + \frac{1}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3, \\ \beta_3 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{\beta}_0 \quad \quad \quad - \frac{2}{\sqrt{6}} \dot{\beta}_2 + \frac{1}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3, \\ \beta_4 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{\beta}_0 \quad \quad \quad - \frac{3}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3. \end{aligned} \right\} \quad (8.4)$$

[注] (8.3) 和 (8.4) 的变换矩阵是正交矩阵。我们可以作出任何阶的这种形状的正交矩阵。令阶数为  $n$ , 于是第一列排成  $1/\sqrt{n}$  的纵列。一般第  $k$  列 ( $k \geq 2$ ) 的排法是: 先排  $(k-1)$  个  $1/\sqrt{k(k-1)}$ , 接着排  $-(k-1)/\sqrt{k(k-1)}$ , 其余全排 0。

令

$$\mu = \dot{\mu} - \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{\alpha}_0 - \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{\beta}_0. \quad (8.5)$$

于是我们就可以取表 8.3 作为 § 6 和 § 7 所述的一般理论中的矩阵  $[p_{ik}]$ 。

这样, 变换后的  $X$  表就变为表 8.4。

由此看出, 在新的参数组中  $\dot{\alpha}_0$  和  $\dot{\beta}_0$  (起码就这里的 12 个数据而言) 是无用的, 而有效的恰好是  $\dot{\mu}, \dot{\alpha}_1, \dot{\alpha}_2, \dot{\beta}_1, \dot{\beta}_2$  和  $\dot{\beta}_3$  这 6 个。

现在, 由  $X$  表的正交性可知, 作为决定这些参数估计量  $\hat{m}_i$ ,



表 8.3 变换的矩阵

1	$\hat{a}_0$	$\hat{a}_1$	$\hat{a}_2$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$
$\mu$	1	$-\frac{1}{\sqrt{3}}$		$\frac{-1}{\sqrt{4}}$			
$\alpha_1$		$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$			
$\alpha_2$		$\frac{1}{\sqrt{3}}$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$			
$\alpha_3$		$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	$\frac{-2}{\sqrt{6}}$			
$\beta_1$				$\frac{1}{\sqrt{4}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{12}}$
$\beta_2$				$\frac{1}{\sqrt{4}}$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{12}}$
$\beta_3$				$\frac{1}{\sqrt{4}}$	0	$\frac{-2}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{12}}$
$\beta_4$				$\frac{1}{\sqrt{4}}$	0	0	$\frac{-3}{\sqrt{12}}$

表 8.4 新的  $X$  表

$i$	$\hat{\alpha}_0$	$\hat{\alpha}_1$	$\hat{\alpha}_2$	$\hat{\beta}_0$	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	数据
1	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{12}$	$y_{11}$
1	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{12}$	$y_{12}$
1	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-2/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{12}$	$y_{13}$
1	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	$-3/\sqrt{12}$	$y_{14}$
1	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{12}$	$y_{21}$
1	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{12}$	$y_{22}$
1	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	0	0	$-2/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{12}$	$y_{23}$
1	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	0	0	0	$-3/\sqrt{12}$	$y_{24}$
1	0	0	$-2/\sqrt{6}$	0	$1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{12}$	$y_{31}$
1	0	0	$-2/\sqrt{6}$	0	$-1/\sqrt{2}$	$1/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{12}$	$y_{32}$
1	0	0	$-2/\sqrt{6}$	0	0	$-2/\sqrt{6}$	$1/\sqrt{12}$	$y_{33}$
1	0	0	$-2/\sqrt{6}$	0	0	0	$-3/\sqrt{12}$	$y_{34}$

$\dot{a}_1, \dot{a}_2, \dot{b}_1, \dot{b}_2, \dot{b}_3$  的正規方程, 可以取下列的簡單形状:

$$\left. \begin{aligned}
 12\dot{m} &= y_{11} + y_{12} + y_{13} + y_{14} + y_{21} + y_{22} + y_{23} + y_{24} \\
 &\quad + y_{31} + y_{32} + y_{33} + y_{34}, \\
 4\dot{a}_1 &= \frac{y_{11} + y_{12} + y_{13} + y_{14}}{\sqrt{2}} - \frac{y_{21} + y_{22} + y_{23} + y_{24}}{\sqrt{2}}, \\
 4\dot{a}_2 &= \frac{y_{11} + y_{12} + y_{13} + y_{14}}{\sqrt{6}} + \frac{y_{21} + y_{22} + y_{23} + y_{24}}{\sqrt{6}} \\
 &\quad - 2 \frac{y_{31} + y_{32} + y_{33} + y_{34}}{\sqrt{6}}, \\
 3\dot{b}_1 &= \frac{y_{11} - y_{12}}{\sqrt{2}} + \frac{y_{21} - y_{22}}{\sqrt{2}} + \frac{y_{31} - y_{32}}{\sqrt{2}}, \\
 3\dot{b}_2 &= \frac{y_{11} + y_{12} - 2y_{13}}{\sqrt{6}} + \frac{y_{21} + y_{22} - 2y_{23}}{\sqrt{6}} \\
 &\quad + \frac{y_{31} + y_{32} - 2y_{33}}{\sqrt{6}}, \\
 3\dot{b}_3 &= \frac{y_{11} + y_{12} + y_{13} - 3y_{14}}{\sqrt{12}} + \frac{y_{21} + y_{22} + y_{23} - 3y_{24}}{\sqrt{12}} \\
 &\quad + \frac{y_{31} + y_{32} + y_{33} - 3y_{34}}{\sqrt{12}}.
 \end{aligned} \right\} \quad (8.6)$$

这相当于一般理論中的(7.5)。再用(8.2)来表达, 使得

$$\left. \begin{aligned}
 12\dot{m} &= G, \\
 4\dot{a}_1 &= (A_1 - A_2) / \sqrt{2}, \\
 4\dot{a}_2 &= (A_1 + A_2 - 2A_3) / \sqrt{6}, \\
 3\dot{b}_1 &= (B_1 - B_2) / \sqrt{2}, \\
 3\dot{b}_2 &= (B_1 + B_2 - 2B_3) / \sqrt{6}, \\
 3\dot{b}_3 &= (B_1 + B_2 + B_3 - 3B_4) / \sqrt{12}.
 \end{aligned} \right\} \quad (8.7)$$

由此可以确定  $\dot{m}, \dot{a}_1, \dot{a}_2, \dot{b}_1, \dot{b}_2, \dot{b}_3$ . 而且它們的方差是:

$$V(\dot{m}) = \sigma^2/12, \quad V(\dot{a}_i) = \sigma^2/4, \quad V(\dot{b}_i) = \sigma^2/3.$$

$\dot{\alpha}_0, \dot{\beta}_0$  的估計量  $\dot{\alpha}_0, \dot{\beta}_0$  当然是不定的。

欲利用上述的結果來求原參數組的估計量，只需把它們代入與(8.3)，(8.4)，(8.5)相類似的式子即可。也就是

$$\begin{aligned}
 m &= \bar{m} - \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{a}_0 - \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{b}_0 = \frac{G}{12} - \frac{\dot{a}_0}{\sqrt{3}} - \frac{\dot{b}_0}{\sqrt{4}}, \\
 a_1 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{a}_0 + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{a}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{a}_2 = \frac{A_1}{4} - \frac{G}{12} + \frac{\dot{a}_0}{\sqrt{3}}, \\
 a_2 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{a}_0 - \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{a}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{a}_2 = \frac{A_2}{4} - \frac{G}{12} + \frac{\dot{a}_0}{\sqrt{3}}, \\
 a_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{a}_0 - \frac{2}{\sqrt{6}} \dot{a}_2 = \frac{A_3}{4} - \frac{G}{12} + \frac{\dot{a}_0}{\sqrt{3}}, \\
 b_1 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{b}_0 + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{b}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{b}_2 + \frac{1}{\sqrt{12}} \dot{b}_3 \\
 &= \frac{B_1}{3} - \frac{G}{12} + \frac{\dot{b}_0}{\sqrt{4}}, \\
 b_2 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{b}_0 - \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{b}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{b}_2 + \frac{1}{\sqrt{12}} \dot{b}_3 \\
 &= \frac{B_2}{3} - \frac{G}{12} + \frac{\dot{b}_0}{\sqrt{4}}, \\
 b_3 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{b}_0 - \frac{2}{\sqrt{6}} \dot{b}_2 + \frac{1}{\sqrt{12}} \dot{b}_3 \\
 &= \frac{B_3}{3} - \frac{G}{12} + \frac{\dot{b}_0}{\sqrt{4}}, \\
 b_4 &= \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{b}_0 - \frac{3}{\sqrt{12}} \dot{b}_3 \\
 &= \frac{B_4}{3} - \frac{G}{12} + \frac{\dot{b}_0}{\sqrt{4}}.
 \end{aligned} \tag{8.8}$$

其中，由於  $\dot{a}_0, \dot{b}_0$  是不定的，因而帶來了不定性。

欲使參數的一次式

$$\begin{aligned}
 \theta &= l_0 \mu + l_{11} \alpha_1 + l_{12} \alpha_2 + l_{13} \alpha_3 \\
 &\quad + l_{21} \beta_1 + l_{22} \beta_2 + l_{23} \beta_3 + l_{24} \beta_4
 \end{aligned} \tag{8.9}$$

是可估計的，在變換後的式子

$$\begin{aligned}
\theta &= l_0 \left( \dot{\mu} - \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{\alpha}_0 - \frac{1}{\sqrt{4}} \dot{\beta}_0 \right) + l_{11} \left( \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{\alpha}_0 + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\alpha}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2 \right) \\
&\quad + l_{12} \left( \frac{1}{\sqrt{3}} \dot{\alpha}_0 - \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\alpha}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2 \right) + l_{13} \left( -\frac{1}{\sqrt{3}} \dot{\alpha}_0 - \frac{2}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2 \right) \\
&\quad + l_{21} \left( -\frac{1}{\sqrt{4}} \dot{\beta}_0 + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\beta}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\beta}_2 + \frac{1}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3 \right) + \dots \\
&= l_0 \dot{\mu} + \frac{l_{11} - l_{12}}{\sqrt{2}} \dot{\alpha}_1 + \frac{l_{11} + l_{12} - 2l_{13}}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2 + \frac{l_{21} - l_{22}}{\sqrt{2}} \dot{\beta}_1 \\
&\quad + \frac{l_{21} + l_{22} - 2l_{23}}{\sqrt{6}} \dot{\beta}_2 + \frac{l_{21} + l_{22} + l_{23} - 3l_{24}}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3 \\
&\quad + \left( -\frac{l_0}{\sqrt{3}} + \frac{l_{11} + l_{12} + l_{13}}{\sqrt{3}} \right) \dot{\alpha}_0 \\
&\quad + \left( -\frac{l_0}{\sqrt{4}} + \frac{l_{21} + l_{22} + l_{23} + l_{24}}{\sqrt{4}} \right) \dot{\beta}_0
\end{aligned} \tag{8.10}$$

中, 必須令  $\dot{\alpha}_0$  和  $\dot{\beta}_0$  的系数等于 0. 也就是說, 必須有

$$l_0 = l_{11} + l_{12} + l_{13} = l_{21} + l_{22} + l_{23} + l_{24}. \tag{8.11}$$

例如, 参数的一次式

$$\theta_1 = \mu + \alpha_1 + \beta_1, \quad \theta_2 = \alpha_2 - \alpha_3, \quad \theta_3 = \beta_2 + \beta_3 - 2\beta_4 \tag{8.12}$$

都滿足条件(8.11), 所以它們是可估計的. 事实上, 它們可以分別变换为

$$\theta_1 = \dot{\mu} + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\alpha}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\beta}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\beta}_2 + \frac{1}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3, \tag{8.13}$$

$$\theta_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\alpha}_1 + \frac{3}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2, \tag{8.14}$$

$$\theta_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\beta}_1 - \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\beta}_2 + \frac{8}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3. \tag{8.15}$$

所以估計量分別是

$$\hat{\theta}_1 = \dot{\mu} + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\alpha}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2 + \frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\beta}_1 + \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\beta}_2 + \frac{1}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3, \tag{8.16}$$

$$\hat{\theta}_2 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\alpha}_1 + \frac{3}{\sqrt{6}} \dot{\alpha}_2, \tag{8.17}$$

$$\hat{\theta}_3 = -\frac{1}{\sqrt{2}} \dot{\beta}_1 - \frac{1}{\sqrt{6}} \dot{\beta}_2 + \frac{8}{\sqrt{12}} \dot{\beta}_3. \tag{8.18}$$

它們的方差分別是①

$$V(\hat{\theta}_1) = \left\{ \frac{1}{12} + \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{6} \right) \frac{1}{4} + \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + \frac{1}{12} \right) \frac{1}{3} \right\} \sigma^2 = \frac{6}{12} \sigma^2 = \frac{1}{2} \sigma^2, \quad (8.19)$$

$$V(\hat{\theta}_2) = \left( \frac{1}{2} + \frac{9}{6} \right) \frac{\sigma^2}{4} = \frac{2}{4} \sigma^2 = \frac{1}{2} \sigma^2, \quad (8.20)$$

$$V(\hat{\theta}_3) = \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + \frac{64}{12} \right) \frac{\sigma^2}{3} = \frac{6}{3} \sigma^2 = 2\sigma^2. \quad (8.21)$$

利用一般式(7.24), 再从(8.7)便可求得殘差平方和的計算公式

$$\begin{aligned} S_E = \sum_i \sum_j y_{ij}^2 - & \left\{ \frac{G^2}{12} + \frac{(A_1 - A_2)^2}{8} \right. \\ & + \frac{(A_1 + A_2 - 2A_3)^2}{24} + \frac{(B_1 - B_2)^2}{6} \\ & \left. + \frac{(B_1 + B_2 - 2B_3)^2}{18} + \frac{(B_1 - B_2 + B_3 - 3B_4)^2}{36} \right\}. \quad (8.22) \end{aligned}$$

以自由度  $N - r = 12 - 6 = 6$  來除上式, 便得到  $\sigma^2$  的無偏估計。

現在, 如果按照第二種方法, 也就是利用原參數組來討論, 那末將得出什麼樣的結果呢? 這時, 我們可以給正規方程(表 8.2)加上二個任意的條件, 然後求解。設這些附加條件為

$$\left. \begin{aligned} a_1 + a_2 + a_3 &= 0, \\ b_1 + b_2 + b_3 + b_4 &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (8.23)$$

求解就很方便。這樣一來, 表 8.2 的主要部分就差不多與對角矩陣相同, 其解可確定為

$$\begin{aligned} m &= \frac{G}{12}, \quad a_i = \frac{A_i}{4} - \frac{G}{12} \quad (i=1, 2, 3), \\ b_j &= \frac{B_j}{3} - \frac{G}{12} \quad (j=1, 2, 3, 4). \end{aligned} \quad (8.24)$$

上式相當於在(8.8)中令  $\dot{a}_0 = \dot{b}_0 = 0$  的式子。若把它們列成  $O$  表的形狀, 則得表 8.5。

因為上列(8.12)的  $\theta_1, \theta_2$  和  $\theta_3$  分別具有  $y_{11}, y_{21} - y_{31}$  和

① (8.16)~(8.21)的一般公式可參看 §13 的(13.18)和(13.19)。

表 8.5  $G$  表

	1	$G$	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$B_1$	$B_2$	$B_3$	$B_4$
$m$		$\frac{1}{12}$							
$a_1$		$\frac{-1}{12}$	$\frac{1}{4}$						
$a_2$		$\frac{-1}{12}$		$\frac{1}{4}$					
$a_3$		$\frac{-1}{12}$			$\frac{1}{4}$				
$b_1$		$\frac{-1}{12}$				$\frac{1}{3}$			
$b_2$		$\frac{-1}{12}$					$\frac{1}{3}$		
$b_3$		$\frac{-1}{12}$						$\frac{1}{3}$	
$b_4$		$\frac{-1}{12}$							$\frac{1}{3}$

$y_{12} + y_{13} - 2y_{14}$  这样的无偏估计, 所以它们是可估计的。但是, 它们不是最优的无偏估计。最优的无偏估计分别由

$$\hat{\theta}_1 = m + a_1 + b_1 = \frac{A_1}{4} + \frac{B_1}{3} - \frac{G}{12}, \quad (8.25)$$

$$\hat{\theta}_2 = a_2 - a_3 = \frac{A_2 - A_3}{4}, \quad (8.26)$$

$$\hat{\theta}_3 = b_2 + b_3 - 2b_4 = \frac{B_2 + B_3 - 2B_4}{3} \quad (8.27)$$

给出。应用表 8.5 于 (7.32), 便可算出它们的方差为

$$\begin{aligned} V(\hat{\theta}_1) &= \left( \frac{1}{12} + \frac{1}{4} + \frac{1}{3} + \frac{-1}{12} + \frac{-1}{12} \right) \sigma^2 \\ &= \left( \frac{1}{4} + \frac{1}{3} - \frac{1}{12} \right) \sigma^2 = \frac{6}{12} \sigma^2 = \frac{1}{2} \sigma^2, \end{aligned} \quad (8.28)$$

$$V(\hat{\theta}_2) = \left\{ \frac{1^2}{4} + \frac{(-1)^2}{4} \right\} \sigma^2 = \frac{2}{4} \sigma^2 = \frac{1}{2} \sigma^2, \quad (8.29)$$

$$V(\hat{\theta}_3) = \left\{ \frac{1^2}{3} + \frac{1^2}{3} + \frac{(-2)^2}{3} \right\} \sigma^2 = \frac{6}{3} \sigma^2 = 2\sigma^2. \quad (8.30)$$

容易看出, 这些结果与上列的 (8.16) ~ (8.21) 一致。

由 (7.34) 可以求得殘差平方和的計算公式为

$$\begin{aligned}
 S_E &= \sum_i \sum_j y_{ij}^2 - (mG + \sum_i a_i A_i + \sum_j b_j B_j) \\
 &= \sum_i \sum_j y_{ij}^2 - \left\{ \frac{G^2}{12} + \sum_i A_i \left( \frac{A_i}{4} - \frac{G}{12} \right) + \sum_j B_j \left( \frac{B_j}{3} - \frac{G}{12} \right) \right\} \\
 &= \sum_i \sum_j y_{ij}^2 - \left( \sum_i \frac{A_i^2}{4} + \sum_j \frac{B_j^2}{3} - \frac{G^2}{12} \right). \quad (8.31)
 \end{aligned}$$

以  $N-r=12-6=6$  来除上式, 便得  $\sigma^2$  的无偏估計 (因为給正規方程加上了两个条件才确定了解, 所以  $r=p-2=8-2=6$ )。容易檢証, (8.31) 与 (8.22) 一致。

[注] 这里, 我們用例子說明了无用参数存在时的两种处理方法。一般可以这样說: 第一种方法适合于理論上的考察, 而第二种方法則适合于实际的計算。但是, 例如用穿孔卡片机作計算时, 第一种方法有时反而显得方便, 所以不能一概地作出上面的結論 (但这时最好还是取 (8.3) 和 (8.4) 的一切系数的分母为 1 比較好)。

**例 2 不完全区組設計**<sup>①</sup> 設数据的构造与 (8.1) 相同, 但不对所有  $(i, j)$  的組合都作試驗, 例如只对表 8.6 中記有“1”的那些  $(i, j)$  的組合作試驗。一般, 可以定义

$$n_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{当 } (i, j) \text{ 的組合被試驗时,} \\ 0, & \text{当 } (i, j) \text{ 的組合不被試驗时.} \end{cases} \quad (8.32)$$

令  $\beta_i (i=1, \dots, b)$  表示区組效应,  $\tau_j (j=1, \dots, p)$  表示处理效应, 并記数据的构造为

$$y_{ij} = \mu + \beta_i + \tau_j + e_{ij}. \quad (8.33)$$

这时令  $\mu, \beta_i$  和  $\tau_j$  的估計值分别为  $m, b_i$  和  $t_j$ , 于是可以形式地把殘差平方和写成下列形状:

表 8.6  $n_{ij}$  表

$i \backslash j$	1	2	3	4	5
1	1	1	1	0	0
2	0	1	1	1	0
3	0	0	1	1	1
4	1	0	0	1	1
5	1	1	0	0	1
6	1	1	0	1	0
7	0	1	1	0	1
8	1	0	1	1	0
9	0	1	0	1	1
10	0	0	1	0	1

① 由于每一区組不包含所有的处理, 所以叫做不完全 (incomplete)。如这个例子那样, 重复数  $r$ , 区組的大小  $k$  和每两个处理同时出現的次数  $\lambda$  都不依赖于足碼, 而为一定的, 叫做平衡 (balanced)。也就是, 这是一个平衡不完全区組設計 (balanced incomplete block design)。关于这种設計, 可參看 Bose [6], Mann [8], Kempthorne [9] 和增田 [22], [31]。——譯者注

$$S_E = \sum_i \sum_j n_{ij} (y_{ij} - m - b_i - t_j)^2. \quad (8.34)$$

由此推导正规方程, 使得

$$\left. \begin{aligned} Nm + \sum_i k_i b_i + \sum_j r_j t_j &= G, \\ k_i m + k_i b_i + \sum_j n_{ij} t_j &= B_i, \\ r_j m + \sum_i n_{ij} b_i + r_j t_j &= T_j, \end{aligned} \right\} \quad (8.35)$$

此处  $N = \sum_i \sum_j n_{ij}$  是数据的总数,  $k_i = \sum_j n_{ij}$  是区组  $i$  的大小,  $r_j = \sum_i n_{ij}$  是处理  $j$  的重复数,  $G = \sum_i \sum_j n_{ij} y_{ij}$  是数据的总和,  $B_i = \sum_j n_{ij} y_{ij}$  是区组  $i$  的总和,  $T_j = \sum_i n_{ij} y_{ij}$  是处理  $j$  的总和。

为了从 (8.35) 的第三式消去  $b_i (i=1, \dots, b)$ , 我们从它减掉第二式的  $n_{ij}/k_i$  倍, 便得到

$$\sum_j (\delta_{jj'} r_j - \sum_i n_{ij} n_{ij'} / k_i) t_{j'} = T_j - \sum_i B_i n_{ij} / k_i. \quad (8.36)$$

如表 8.6 那样, 若那是平衡的设计, 则有  $k_i = k$  (一定),  $r_j = r$  (一定), 以及两个不同的处理  $j$  和  $j'$  在同一个区组内直接比较的次数  $\lambda_{jj'} = \sum_i n_{ij} n_{ij'} = \lambda$  (一定)。并且  $\sum_i (n_{ij})^2 = \sum_i n_{ij} = r_j = r$ . 这样, 若把 (8.36) 的右边 (调整后的处理总和) 记为  $Q_j$ , 则 (8.36) 变成

$$\left(r - \frac{r}{k}\right) t_j - \frac{\lambda}{k} \sum_{j' \neq j} t_{j'} = Q_j \quad (\equiv T_j - \sum_i B_i n_{ij} / k). \quad (8.37)$$

若取  $\sum_j t_j = 0$  为“任意的附加条件”, 则上式变成

$$\left(r - \frac{r}{k} + \frac{\lambda}{k}\right) t_j = Q_j. \quad (8.38)$$

但是, 一般有关系式  $r(k-1) = \lambda(v-1)$  (某个处理  $j$  出现  $r$  次, 每次与它直接比较的其他处理有  $(k-1)$  个, 所以总共比较  $r(k-1)$  次, 另一方面, 除  $j$  以外的  $(v-1)$  个处理分别与  $j$  直接比较  $\lambda$  次, 所以总共应等于  $\lambda(v-1)$  次)。于是 (8.38) 又变成  $(\lambda v/k) t_j = Q_j$ . 因此, 解是



$$t_j = \frac{k}{\lambda v} Q_j. \quad (8.39)$$

若再加上附加条件  $\sum_i b_i = 0$ , 则从 (8.35) 的第一式得出  $m = G/N$ ,

因此由 (8.35) 的第二式可以求得

$$b_i = \frac{1}{k} \left( B_i - \frac{k}{\lambda v} \sum_j n_{ij} Q_j \right) - \frac{G}{N}. \quad (8.40)$$

处理  $j$  和  $j'$  的效应差  $\tau_j - \tau_{j'}$  的估计值由

$$t_j - t_{j'} = (Q_j - Q_{j'}) k / \lambda v$$

给出, 它的方差是  $2\sigma^2 k / \lambda v$ .

残差平方和由

$$\begin{aligned} S_E &= \sum_{i,j} n_{ij} y_{ij}^2 - (mG + \sum_i b_i B_i + \sum_j t_j T_j) \\ &= \sum_{i,j} n_{ij} y_{ij}^2 - \left\{ \frac{G^2}{N} + \left( \frac{\sum_i B_i^2}{k} - \frac{G^2}{N} \right) + \frac{k}{\lambda v} \sum_j Q_j^2 \right\}. \end{aligned} \quad (8.41)$$

给出, 它的自由度是

$$\phi_E = N - b - v + 1.$$

[注 1] 若在完全区组中重复  $r$  次, 则  $\tau_j - \tau_{j'}$  的估计量的方差应为  $2\sigma^2/r$ . 上面以  $2\sigma^2 k / \lambda v$  代替了它。这意味着“有效的重复数”减少为  $\lambda v/k$ . 例如在表 8.6 中,  $r=6$ , 而  $\lambda v/k = 3 \times 5/3 = 5$ . 一般  $E = \lambda v/k r$  叫做效率因子。

[注 2] 这里引进的分析方法, 只是利用所谓“区组内变化”的方法。若  $b > v$ , 则从“区组间变化”也可以得到有关  $\tau_j - \tau_{j'}$  的情报。区组间情报的利用方法可以从类似 §20 的观点导出, 但是这样作更加麻烦①。

## §9 几何解释②

为了用几何观点来解释最小二乘法的计算, 我们考虑  $N$  维矢量空间, 并把  $X$  表中的各列分别表示为一个矢量。也就是说, 在

① 关于区组间情报的利用, 可参看 Cochran-Cox [4] 和 Scheffé [28]。——译者注

② Scheffé [28] 有更详细的讨论。——译者注

数据的构造式

$$y_{\alpha} = \sum_i x_{\alpha i} \beta_i + e_{\alpha} \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N) \quad (9.1)$$

中, 分別把

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{21} \\ \vdots \\ x_{N1} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} x_{12} \\ x_{22} \\ \vdots \\ x_{N2} \end{bmatrix}, \dots, \begin{bmatrix} x_{1p} \\ x_{2p} \\ \vdots \\ x_{Np} \end{bmatrix} \quad (9.2)$$

表示为一个矢量 (图 9.1)。下面为了簡便起見, 我們把它們記作  $[y_{\alpha}]$ ,  $[x_{\alpha 1}]$ ,  $[x_{\alpha 2}]$ ,  $\dots$ ,  $[x_{\alpha p}]$ 。

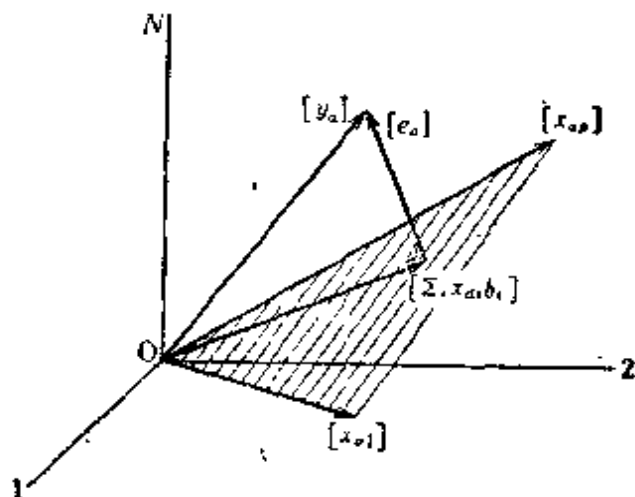


图 9.1 最小二乘估計

这时, 对于参数  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$  的任意估計值  $b_1, b_2, \dots, b_p$ , “估計矢量”  $[\sum_i x_{\alpha i} b_i] = \sum_i b_i [x_{\alpha i}]$  属于  $p$  个矢量  $[x_{\alpha 1}]$ ,  $[x_{\alpha 2}]$ ,  $\dots$ ,  $[x_{\alpha p}]$  所張成的空間 (“估計空間”)。“数据矢量”  $[y_{\alpha}]$  可以分解为估計矢量  $[\sum_i x_{\alpha i} b_i]$  和“殘差矢量”  $[e_{\alpha}]$  (參看 (1.4)), 而对最小二乘估計, 特別有下列关系 (參看 (1.7)):

$$\sum_{\alpha} x_{\alpha i} e_{\alpha} = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, p). \quad (9.3)$$

这就是說, 殘差矢量  $[e_{\alpha}]$  与  $p$  个矢量  $[x_{\alpha i}]$  ( $i = 1, \dots, p$ ) 的每一个都垂直, 从而也与估計空間垂直。因此, 我們可以这样說, “在最小

二乘法中,数据矢量可以分解为属于估计空间的矢量(估计矢量)以及与后者垂直的矢量(残差矢量)。换句话说,“估计矢量是数据矢量在估计空间的正射影”。

[注] 数据矢量  $[y_\alpha]$  的长度是  $(\sum_\alpha y_\alpha^2)^{\frac{1}{2}}$ , 估计矢量  $[\sum_\alpha x_{\alpha i} b_i]$  的长度是  $(\sum_\alpha \sum_i \sum_j x_{\alpha i} x_{\alpha j} b_i b_j)^{\frac{1}{2}} = (\sum_i \sum_j a_{ij} b_i b_j)^{\frac{1}{2}}$ , 残差矢量  $[e_\alpha]$  的长度是  $(\sum_\alpha e_\alpha^2)^{\frac{1}{2}}$ , 并在三者之间成立着 Pythagoras 定理,即

$$\sum_\alpha y_\alpha^2 = \sum_i \sum_j a_{ij} b_i b_j + \sum_\alpha e_\alpha^2. \quad (9.4)$$

这就是(1.13)的几何意义。

§6 所讨论的变换,若按照本节的解释,那就是“估计空间”的基的变换。也就是说,那里讨论了以满秩矩阵  $[p_{ik}]$  为系数的变换

$$\left. \begin{aligned} [x'_{\alpha 1}] &= [x_{\alpha 1}]p_{11} + [x_{\alpha 2}]p_{21} + \cdots + [x_{\alpha p}]p_{p1}, \\ &\vdots \\ [x'_{\alpha p}] &= [x_{\alpha 1}]p_{1p} + [x_{\alpha 2}]p_{2p} + \cdots + [x_{\alpha p}]p_{pp}, \end{aligned} \right\} \quad (9.5)$$

从而得到了变换后的新基  $[x'_{\alpha 1}], \dots, [x'_{\alpha p}]$ 。这时,同一“估计矢量”,对原基可用系数  $b_1, \dots, b_p$  来表达,而对新基则用系数  $b'_1, \dots, b'_p$  来表达。正规方程的系数矩阵  $[a_{ij}]$  是关于“斜交轴”  $[x_{\alpha 1}], \dots, [x_{\alpha p}]$  的变元张量(上列的(9.4)也显出这一点),所以它遵循张量的变换法则(6.6)。

在存在着无用参数的情形 (§7), 估计空间的维数  $r$  低于  $p$ 。因此,利用适当的变换,实际上可以用  $r$  个矢量  $[x'_{\alpha 1}], \dots, [x'_{\alpha r}]$  作为基来表示。这样,虽然名义上加入了  $(p-r)$  个零矢量  $[x'_{\alpha, r+1}], \dots, [x'_{\alpha p}]$ , 以使矢量的个数与  $p$  一致,但由于这些零矢量的系数  $b'_{r+1}, \dots, b'_p$  实际上不起任何作用,所以在估计矢量的表现中也仅有相应的不定性。

用线性变换把正规方程的系数矩阵变换为对角型(参看(7.1))的作法,相当于在估计空间中引进直角坐标系。这样的“正交化”

不但有效地应用于存在无用参数情形的理论,而且对其他的许多情形也是有用的。

例(标准正交化) 要使根据变换

$$\left. \begin{aligned} [x_{a1}] &= [u_{a1}]s_1, \\ [x_{a2}] &= [u_{a1}]g_{12} + [u_{a2}]s_2, \\ &\dots\dots\dots \\ [x_{ap}] &= [u_{a1}]g_{1p} + [u_{a2}]g_{2p} + \dots + [u_{ap}]s_p \end{aligned} \right\} \quad (9.6)$$

所引进的新基满足标准化正交性

$$\sum_a u_{ai}u_{aj} = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i=j), \\ 0 & (i \neq j), \end{cases} \quad (9.7)$$

那么应如何决定系数才好呢?

若通过(9.6)和(9.7),用变换的系数来表达原正规方程的系数  $a_{ij}$ , 则得

$$\left. \begin{aligned} a_{11} &= s_1^2, \\ a_{1j} &= s_1 g_{1j} \quad (j=2, \dots, p); \\ a_{22} &= g_{12}^2 + s_2^2, \\ a_{2j} &= g_{12}g_{1j} + s_2 g_{2j} \quad (j=3, \dots, p); \\ a_{33} &= g_{13}^2 + g_{23}^2 + s_3^2, \\ a_{3j} &= g_{13}g_{1j} + g_{23}g_{2j} + s_3 g_{3j} \quad (j=4, \dots, p); \\ &\dots\dots\dots \\ a_{pp} &= g_{1p}^2 + g_{2p}^2 + \dots + g_{p-1,p}^2 + s_p^2. \end{aligned} \right\} \quad (9.8)$$

依次解上式便得

$$\left. \begin{aligned} s_1 &= \sqrt{a_{11}}, \\ g_{1j} &= a_{1j}/s_1 \quad (j=2, \dots, p); \\ s_2 &= \sqrt{a_{22} - g_{12}^2}, \\ g_{2j} &= (a_{2j} - g_{12}g_{1j})/s_2 \quad (j=3, \dots, p); \\ s_3 &= \sqrt{a_{33} - g_{13}^2 - g_{23}^2}, \\ g_{3j} &= (a_{3j} - g_{13}g_{1j} - g_{23}g_{2j})/s_3 \quad (j=4, \dots, p); \\ &\dots\dots\dots \\ s_p &= \sqrt{a_{pp} - g_{1p}^2 - g_{2p}^2 - \dots - g_{p-1,p}^2}. \end{aligned} \right\} \quad (9.9)$$

于是可以依次定出变换的系数。

[注] 这个变换是正规方程的一个解法——“平方根法”——的基础。若不要求“标准化”,则可以全部取1(或者其他适当的数)当作(9.6)中的  $s_1, s_2, \dots, s_p$  (例如下节)。

## § 10 正交多項式

我們將把上节末尾提到的“正交化”的概念应用于配多項式的問題。

設数据  $y$  的“真值”由已知值的变数  $x$  的二次式給出, 而对真值加上誤差項的值, 就是觀測值。如果对等間隔的  $x$  的值  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , 分別得到  $y$  的觀測值  $y_1, y_2, \dots, y_n$ , 那末它的构造可以写成

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \gamma x_i^2 + \varepsilon_i \quad (i=1, 2, \dots, n), \quad (10.1)$$

因此得  $X$  表如表 10.1。对应的正規方程的系数矩陣是

$$[a_{ij}] = \begin{bmatrix} n & \sum x_i & \sum x_i^2 \\ \sum x_i & \sum x_i^2 & \sum x_i^3 \\ \sum x_i^2 & \sum x_i^3 & \sum x_i^4 \end{bmatrix}, \quad (10.2)$$

它不是对角型。

因此, 我們想取适当的一次式和二次式

$$X_1(x) = x + k_{10}, \quad (10.3)$$

$$X_2(x) = x^2 + k_{21}x + k_{20}, \quad (10.4)$$

并把(10.1)改写为

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 X_1(x_i) + \beta_2 X_2(x_i) + \varepsilon_i \quad (i=1, 2, \dots, n) \quad (10.5)$$

的形状, 以便使新的  $A$  表变成对角型。結合 § 6 的一般理論來說, 这种作法相当于把变换的矩陣  $[p_{ik}]$  取为表 10.2 的形状。

得新的  $X$  表如表 10.3。与此对应的  $A$  表, 其为对角型的必

表 10.1  $X$  表

$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	数据
1	$x_1$	$x_1^2$	$y_1$
1	$x_2$	$x_2^2$	$y_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1	$x_n$	$x_n^2$	$y_n$

表 10.2 变换的矩陣

	$1 = \beta_0$	$\varepsilon_1$	$\beta_2$
$\alpha$	1	$k_{10}$	$k_{20}$
$\beta$	0	1	$k_{21}$
$\gamma$	0	0	1

表 10.3 新的  $X$  表

$\beta_0$	$\beta_1$	$\beta_2$	数据
1	$X_1(x_1)$	$X_2(x_1)$	$y_1$
1	$X_1(x_2)$	$X_2(x_2)$	$y_2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
1	$X_1(x_n)$	$X_2(x_n)$	$y_n$

要与充分的条件是:

$$\sum_i X_1(x_i) = 0, \quad \text{亦即} \sum_i (x_i + k_{10}) = 0, \quad (10.6)$$

$$\sum_i X_2(x_i) = 0, \quad \text{亦即} \sum_i (x_i^2 + k_{21}x_i + k_{20}) = 0, \quad (10.7)$$

$$\sum_i X_1(x_i) X_2(x_i) = 0, \quad \text{亦即} \sum_i (x_i + k_{10})(x_i^2 + k_{21}x_i + k_{20}) = 0. \quad (10.8)$$

从(10.6)得

$$k_{10} = -\sum_i x_i / n = -\bar{x}, \quad (10.9)$$

于是确定了  $X_1(x)$  的常数项。这样,也就知道了一次式  $X_1(x)$  的形状必须是

$$X_1(x) = x - \bar{x}. \quad (10.10)$$

把(10.9)代入(10.8),并改写其中的二次式,使得

$$\begin{aligned} \sum_i (x_i - \bar{x}) \{ (x_i - \bar{x})^2 + (k_{21} + 2\bar{x})(x_i - \bar{x}) \\ + (k_{20} + k_{21}\bar{x} + \bar{x}^2) \} = 0, \end{aligned} \quad (10.11)$$

但因  $x_i$  是以  $\bar{x}$  为中心而对称地散布着的,所以  $\sum_i (x_i - \bar{x})^2$  和  $\sum_i (x_i - \bar{x})$  都等于0,于是  $\sum_i (x_i - \bar{x})^2$  的系数必须是0。由此可知

$$k_{21} = -2\bar{x}. \quad (10.12)$$

同样,改写(10.7),并利用(10.12)便得到

$$\sum_i (x_i - \bar{x})^2 + n(k_{20} - \bar{x}^2) = 0. \quad (10.13)$$

因此确定了

$$k_{20} = \bar{x}^2 - \sum_i (x_i - \bar{x})^2 / n. \quad (10.14)$$

由此可知,二次式  $X_2(x)$  的形状必须是

$$\begin{aligned} X_2(x) &= x^2 - 2\bar{x}x + \bar{x}^2 - \sum_i (x_i - \bar{x})^2 / n \\ &= (x - \bar{x})^2 - \sum_i (x_i - \bar{x})^2 / n. \end{aligned} \quad (10.15)$$

**例1** 当  $x_i = i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ )时,有

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n i = \frac{1}{n} \cdot \frac{n(n+1)}{2} = \frac{n+1}{2}, \quad (10.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 &= \frac{1}{n} \left( \sum_{i=1}^n x_i^2 - n\bar{x}^2 \right) \\ &= \frac{1}{n} \cdot \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} - \left( \frac{n+1}{2} \right)^2 = \frac{n^2-1}{12}, \end{aligned} \quad (10.17)$$

所以(10.10)和(10.15)具有下列形状:

$$X_1(x) = x - \frac{n+1}{2}, \quad X_2(x) = \left( x - \frac{n+1}{2} \right)^2 - \frac{n^2-1}{12}. \quad (10.18)$$

**例 2** 对一般情形,令  $h$  为间隔,并记

$$x_i = a - ih \quad (i=1, 2, \dots, n), \quad (10.19)$$

于是可以利用(10.17),使得

$$X_1(x) = x - \bar{x}, \quad X_2(x) = (x - \bar{x})^2 - \frac{n^2-1}{12} h^2. \quad (10.20)$$

如果对  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , 有上面定义的  $X_1(x)$  和  $X_2(x)$  的表, 那末便可立刻造出表 10.3。而且正规方程是

$$\left. \begin{aligned} nb_0 &= \sum_i y_i, \\ \sum_i X_1(x_i)^2 b_1 &= \sum_i y_i X_1(x_i), \\ \sum_i X_2(x_i)^2 b_2 &= \sum_i y_i X_2(x_i). \end{aligned} \right\} \quad (10.21)$$

于是得到解为

$$b_0 = \frac{\sum_i y_i}{n}, \quad b_1 = \frac{\sum_i y_i X_1(x_i)}{\sum_i X_1(x_i)^2}, \quad b_2 = \frac{\sum_i y_i X_2(x_i)}{\sum_i X_2(x_i)^2}. \quad (10.22)$$

把分母  $S_1 = \sum_i X_1(x_i)^2$  和  $S_2 = \sum_i X_2(x_i)^2$  附在表的下面, 往往要方便些。估计量  $b_0, b_1, b_2$  的方差是

$$V(b_0) = \sigma^2/n, \quad V(b_1) = \sigma^2/S_1, \quad V(b_2) = \sigma^2/S_2. \quad (10.23)$$

残差平方和的计算公式是

$$S_E = \sum_i y_i^2 - \left\{ \frac{(\sum_i y_i)^2}{n} + \frac{(\sum_i y_i X_1)^2}{S_1} + \frac{(\sum_i y_i X_2)^2}{S_2} \right\}, \quad (10.24)$$

以自由度  $(n-3)$  来除上式, 便得到  $\sigma^2$  的无偏估计。

**例 3** 当  $n=5, x_i=i$  ( $i=1, 2, \dots, 5$ ) 时, (10.18) 变成

$$X_1(x) = x - 3, \quad X_2(x) = (x-3)^2 - 2, \quad (10.25)$$

所以  $X_1(x_i), X_2(x_i)$  的值如表 10.4 所示。这样, 我们的分析就是计算

表 10.4  $n=5$  的情形

$x_i$	$X_1(x_i)$	$X_2(x_i)$
1	-2	2
2	-1	-1
3	0	-2
4	1	-1
5	2	2

$$S_1=10, S_2=14$$

$$\left. \begin{aligned} \sum y &= y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5, \\ \sum yX_1 &= -2y_1 - y_2 + y_4 + 2y_5, \\ \sum yX_2 &= 2y_1 - y_2 - 2y_3 - y_4 + 2y_5, \end{aligned} \right\} \quad (10.26)$$

并以

$$\begin{aligned} b_0 &= \sum y/5, & b_1 &= \sum yX_1/10, \\ b_2 &= \sum yX_2/14 \end{aligned} \quad (10.27)$$

来估计系数。

一般, 对间隔  $h$  和平均值  $\bar{x}$  的  $n$  个点  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , 为了便于数值计算, 利用适当的系数  $\lambda_1, \lambda_2$  来定义

$$X_1(x) = \lambda_1 \left( \frac{x - \bar{x}}{h} \right), \quad X_2(x) = \lambda_2 \left\{ \left( \frac{x - \bar{x}}{h} \right)^2 - \frac{n^2 - 1}{12} \right\}, \quad (10.28)$$

然后对  $x = x_1, x_2, \dots, x_n$ , 造出  $X_1(x_i)$  和  $X_2(x_i)$  的表。这与  $h$  和  $x$  无关, 而仅仅由  $n$  确定。

同样, 还可以定义

$$\left. \begin{aligned} X_3(x) &= \lambda_3 \left\{ \left( \frac{x - \bar{x}}{h} \right)^3 - \frac{3n^2 - 7}{20} \left( \frac{x - \bar{x}}{h} \right) \right\}, \\ X_4(x) &= \lambda_4 \left\{ \left( \frac{x - \bar{x}}{h} \right)^4 - \frac{3n^2 - 13}{14} \left( \frac{x - \bar{x}}{h} \right)^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{3(n^2 - 1)(n^2 - 9)}{560} \right\}, \\ X_5(x) &= \lambda_5 \left\{ \left( \frac{x - \bar{x}}{h} \right)^5 - \frac{5(n^2 - 7)}{18} \left( \frac{x - \bar{x}}{h} \right)^3 \right. \\ &\quad \left. + \frac{15n^4 - 230n^2 + 407}{1008} \left( \frac{x - \bar{x}}{h} \right) \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (10.29)$$

考虑到  $X_0(x) = 1$ , 于是上式满足如下正交性的条件:

$$\sum_i X_h(x_i) X_k(x_i) = 0 \quad (h \neq k). \quad (10.30)$$

表的下面分别附有

$$S_h = \sum_i X_h(x_i)^2 \quad (h=1, 2, \dots) \quad (10.31)$$





于是,得  $X$  表如表 10.6, 得  $A$  表如表 10.7。

表 10.6  $X$  表

$\beta_{00}$	$\beta_{10}$	$\beta_{01}$	$\beta_{20}$	$\beta_{02}$	$\beta_{11}$	数据
1	-1	-2	1	2	2	$z_{11}$
1	-1	-1	1	-1	1	$z_{12}$
1	-1	0	1	-2	0	$z_{13}$
1	-1	1	1	-1	-1	$z_{14}$
1	-1	2	1	2	-2	$z_{15}$
1	0	-2	-2	2	0	$z_{21}$
1	0	-1	-2	-1	0	$z_{22}$
1	0	0	-2	-2	0	$z_{23}$
1	0	1	-2	-1	0	$z_{24}$
1	0	2	-2	2	0	$z_{25}$
1	1	-2	1	2	-2	$z_{31}$
1	1	-1	1	-1	-1	$z_{32}$
1	1	0	1	-2	0	$z_{33}$
1	1	1	1	-1	1	$z_{34}$
1	1	2	1	2	2	$z_{35}$

表 10.7  $A$  表

$b_{00}$	$b_{10}$	$b_{01}$	$b_{20}$	$b_{02}$	$b_{11} = 1$
15					$B_{00}$
	10				$B_{10}$
		30			$B_{01}$
			30		$B_{20}$
				42	$B_{02}$
					20 $B_{11}$

注 表中

$$B_{00} = Z_{..} = \sum_i \sum_j z_{ij},$$

$$B_{10} = -Z_{.1} + Z_{.3},$$

$$B_{01} = -2Z_{.1} - Z_{.2} + Z_{.4} + 2Z_{.5},$$

$$B_{20} = Z_{.1} - 2Z_{.2} + Z_{.3},$$

$$B_{02} = 2Z_{.1} - Z_{.2} - 2Z_{.3} - Z_{.4} + 2Z_{.5},$$

$$B_{11} = 2z_{11} + z_{12} - z_{14} - 2z_{15} - 2z_{31} - z_{32} + z_{34} + 2z_{35}.$$

此处  $Z_{.i} = \sum_j z_{ij}$ ,  $Z_{.j} = \sum_i z_{ij}$ .

系数的估计值是:

$b_{00} = B_{00}/15$ ,  $b_{10} = B_{10}/10$ ,  $b_{01} = B_{01}/30$ ,  $b_{20} = B_{20}/30$ ,  $b_{02} = B_{02}/42$  和  $b_{11} = B_{11}/20$ , 它们的方差分别是:

$$\sigma^2/15, \sigma^2/10, \sigma^2/30, \sigma^2/30, \sigma^2/42 \text{ 和 } \sigma^2/20.$$

残差平方和由

$$S_E = \sum_{ij} z_{ij}^2 - (B_{00}^2/15 + B_{10}^2/10 + \cdots + B_{11}^2/20)$$

来计算,除以

$$N - p = 15 - 6 = 9,$$

便得到  $\sigma^2$  的无偏估计。

### 第3章 正交設計

#### § 11 秤量設計<sup>①</sup>

設有  $p$  件物品, 它們的重量分別是  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$ . 把这些物品組合起來放在化學天平上進行秤量。設數據  $y_\alpha$  ( $\alpha=1, 2, \dots, N$ ) 的構造可以寫成

$$y_\alpha = x_{\alpha 1}\beta_1 + \dots + x_{\alpha p}\beta_p + \varepsilon_\alpha \quad (\alpha=1, 2, \dots, N), \quad (11.1)$$

這裡, 係數  $x_{\alpha i}$  的定義是

$$x_{\alpha i} = \begin{cases} 1, & \text{當第 } \alpha \text{ 次測定中第 } i \text{ 個物品被放在左盤時,} \\ -1, & \text{當第 } \alpha \text{ 次測定中第 } i \text{ 個物品被放在右盤時,} \\ 0, & \text{當第 } \alpha \text{ 次測定中第 } i \text{ 個物品不被秤量時,} \end{cases} \quad (11.2)$$

並設測定誤差  $\varepsilon_\alpha$  ( $\alpha=1, \dots, N$ ) 相互獨立地遵循正態分布  $N(0, \sigma^2)$ 。

一個秤量設計完全可以由一個矩陣  $[x_{\alpha i}]$  來表達。如果這個矩陣的任何二列都相互正交, 即對任意不同的  $i, j$ , 有

$$\sum_{\alpha} x_{\alpha i} x_{\alpha j} = 0 \quad (i \neq j), \quad (11.3)$$

那末這個秤量設計叫做正交設計。在正交秤量設計中, 如果所有的  $x_{\alpha i}$  都取 1 或 -1, 那末, (11.3) 和

$$\sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2 = N \quad (i=1, \dots, p) \quad (11.4)$$

同時成立。於是正規方程簡單地成為

$$Nb_i = \sum_{\alpha} x_{\alpha i} y_{\alpha} \quad (i=1, \dots, p), \quad (11.5)$$

從而可以確定  $\beta_i$  的估計值為

$$b_i = \sum_{\alpha} x_{\alpha i} y_{\alpha} / N \quad (i=1, \dots, p). \quad (11.6)$$

<sup>①</sup> H. Hotelling: Annals of Math. Stat., 15(1944), 297~306; 森口: 品質管理, 4(1953), 24~28, 64~69, 114~119 (119 頁有文獻表)。

这时,  $b_1, \dots, b_p$  相互独立, 它們的数学期望分别是  $\beta_1, \dots, \beta_p$ , 而且它們的方差都等于  $\sigma^2/N$ .

[注] 所有元素都是 1 或 -1, 而且任何二列都相互正交的  $N$  阶矩陣, 叫做 Hadamard 矩陣, 記作  $H_N$ . 从 Hadamard 矩陣任意抽出  $p$  列来构造称量設計, 便得到具有上述性质的称量設計. 下面列出  $N=2, 4, 8, 12, 16, 20$  的 Hadamard 矩陣的例子(+ 表示 +1, - 表示 -1).

欲使 Hadamard 矩陣  $H_N$  存在,  $N$  必須是 2, 或者是 4 的倍数. 但是目前仍未知道这是不是充分条件. 到現在为止, 在  $N \leq 100$  的範圍內, 除了  $H_{92}$  之外, 对所有 4 的倍数都已实际造出了  $H_N$ .  $H_{92}$  至今尚未造出, 但人們也未証明它不存在.

$$H_2 = \begin{bmatrix} + & - \\ + & + \end{bmatrix}, \quad H_4 = \begin{bmatrix} + & + & + & + \\ + & - & + & - \\ + & + & - & - \\ + & - & - & + \end{bmatrix}, \quad H_8 = \begin{bmatrix} + & + & + & + & + & + & + & + \\ + & - & + & - & + & - & + & - \\ + & + & - & - & + & + & - & - \\ + & - & - & + & + & - & - & + \\ + & + & + & + & - & - & - & - \\ + & - & + & - & - & - & - & + \\ + & + & - & - & - & - & + & + \\ + & - & - & + & - & + & + & - \end{bmatrix},$$

$$H_{12} = \begin{bmatrix} + & + & + & + & + & + & + & + & + & + & + & + \\ + & - & - & + & - & - & - & + & + & + & - & - \\ + & - & + & - & - & - & - & + & + & + & - & - \\ + & + & - & - & - & + & + & + & - & - & - & - \\ + & - & - & - & + & + & + & - & + & - & - & + \\ + & - & - & - & + & + & + & - & + & - & - & + \\ + & - & + & + & + & - & + & - & - & - & + & - \\ + & + & + & + & - & + & - & - & - & - & - & - \\ + & + & + & - & + & - & - & + & - & - & - & + \\ + & + & - & + & - & - & + & - & - & - & + & + \\ + & - & + & - & - & + & - & - & - & + & + & + \\ + & - & - & - & - & - & - & - & + & + & + & - \end{bmatrix},$$

① Plackett-Burman: *Biometrika*, **33** (1946), 305~325.

② 在 Plackett-Burman 之前, R. E. A. C. Paley 已就  $N \leq 200$  的範圍, 除  $N=92, 116, 172, 184, 188$  以外, 証明了对所有 4 的倍数都可构造  $H_N$ . 見 Paley: *J. Math. Physics*, **12** (1933), 311~320. ——譯者注



例 按照表 11.1 的設計称 4 个物品的重量(这个表使用了  $H_8$  的第 2 列, 第 3 列, 第 6 列和第 7 列)。由于这个設計具有正交性, 所以結果的分析是简单的。各个物品的重量的估計值由

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= B_1/8, \quad B_1 = y_1 - y_2 + y_3 - y_4 + y_5 - y_6 + y_7 - y_8, \\ b_2 &= B_2/8, \quad B_2 = y_1 + y_2 - y_3 - y_4 + y_5 + y_6 - y_7 - y_8, \\ b_3 &= B_3/8, \quad B_3 = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 - y_5 - y_6 - y_7 - y_8, \\ b_4 &= B_4/8, \quad B_4 = y_1 - y_2 + y_3 - y_4 - y_5 + y_6 - y_7 + y_8 \end{aligned} \right\}$$

給出, 而殘差平方和則由

$$S_E = \sum y^2 - (B_1^2 + B_2^2 + B_3^2 + B_4^2)/8$$

來計算。以  $N-p=8-4=4$  除上式, 便得到  $\sigma^2$  的无偏估計。

表 11.1 組合測定

$\beta_1$	$\beta_2$	$\beta_3$	$\beta_4$	数据
1	1	1	1	$y_1$
-1	1	1	-1	$y_2$
1	-1	1	1	$y_3$
-1	-1	1	-1	$y_4$
1	1	-1	-1	$y_5$
-1	1	-1	1	$y_6$
1	-1	-1	-1	$y_7$
-1	-1	-1	1	$y_8$

[注 1] 如果天平有偏差, 設这个偏差为  $\beta_0$ , 并把它当作一个参数, 那末由于它的系数都是 1, 所以加上这一列后并不丧失正交性。这样,  $\beta_0$  的估計值由

$$b_0 = G/8, \quad G = y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8$$

給出, 而殘差平方和是从上述的  $S_E$  减去  $G^2/8$  而得到的, 因而自由度又减少一个, 也就是 3。

[注 2] 欲从个别測定中求得正交秤量設計所得到的精度(方差为  $\sigma^2/N$ ), 就必须分別对每一物品进行  $N$  次測定。因为正交秤量設計总共只需要  $N$  次測定, 所以当时常需要进行反复測定时, 利用正交秤量設計是比較方便的①。

## § 12 $2^n$ 型正交陣列

实验室里的实验也罢, 生产現場进行的工場实验也罢, 影响測定值的原因是很多的, 如果夸张一点, 甚至可以說是无穷的。不过, 我們可以从其中提出一些比較重要的原因加以控制(使它固定于我們所希望的值), 而对于其他次要的原因, 就任凭它們随机变化, 至于它們的影响, 可以概括为“誤差項”。这时, 提出來加以控

① 实用例: 中村・柴山: 品质管理, 6(1955), 467~469; 葛野: 同上杂志, 6, 617~619; 葛野・刑部: 品质管理シンポジウム报文集(1956), 93~96; 秋山: 品质管理, 8(1957), 25~27。

制的原因就叫做因子。考虑  $m$  个因子，并設每一因子分別有二种变化(二水平)的試驗，这种試驗叫做  $2^m$  型試驗設計。

在  $2^m$  型試驗中，因子的組合共有  $2^m$  个，因此，若对所有的組合全部进行試驗，則必須取  $N=2^m$  个数据。对于  $2^1=16$  和  $2^5=32$ ，虽然数字不大，但对于  $2^6=64$  和  $2^7=128$ ，就需要作大量的試驗了。至于  $2^{10}=1024$ ，若沒有相当的决心，还可能中途产生气馁。而在实际上，重要的因子大于 10 的情况又是很多的。不过，如果各个因子的效应是可加的，即数据的构造可以写成

$$y = \mu \pm \alpha \pm \beta \pm \gamma \pm \cdots \pm \lambda + \varepsilon; \quad (12.1)$$

此处  $\pm \alpha, \pm \beta, \dots, \pm \lambda$  分別表示各个因子的效应，那末从  $2^m$  个組合中适当地抽出一部分来实施，就可以达到預期的目的。(12.1) 的  $\mu$  是“一般平均”， $\varepsilon$  是“誤差項”。正确地写(12.1)就是

$$y_\alpha = \mu + \sum_{i=1}^m x_{\alpha i} \beta_i + \varepsilon_\alpha \quad (\alpha=1, 2, \dots, N), \quad (12.2)$$

此处設系数  $x_{\alpha i}$  ( $\alpha=1, \dots, N; i=1, \dots, m$ ) 取  $+1$  或者  $-1$ ，即在第  $\alpha$  个測定中，若对第  $i$  个因子的二水平中的一水平規定  $x_{\alpha i}$  取  $+1$ ，則对该因子的另一水平規定  $x_{\alpha i}$  取  $-1$ ①。 $\mu$  是常数， $\varepsilon_\alpha$  ( $\alpha=1, \dots, N$ ) 是独立地遵循正态分布  $N(0, \sigma^2)$  的随机变数。

**例** 考虑設備，原料，温度和 pH 为 4 个因子。設設備有 I 和 II，原料有 A 和 B，温度取  $100^\circ\text{C}$  和  $120^\circ\text{C}$ ，pH 取 3.0 和 3.5。这时，我們作設計如表 12.1。这是  $N=8$  个組合的試驗，相当于实施整个  $2^4$  型設計的所有可能組合的一半。这时，数据的构造与上节例子(表 11.1) 的情形相同。設系数  $x_{\alpha i}$  当設備是 I，原料是 A，温度是  $120^\circ\text{C}$ ，pH 是

表 12.1  $2^4$  ( $N=8$ )

No.	設備	原料	温度	pH
1	I	A	$120^\circ\text{C}$	3.5
2	II	A	$120^\circ\text{C}$	3.0
3	I	B	$120^\circ\text{C}$	3.5
4	II	B	$120^\circ\text{C}$	3.0
5	I	A	$100^\circ\text{C}$	3.0
6	II	A	$100^\circ\text{C}$	3.5
7	I	B	$100^\circ\text{C}$	3.0
8	II	B	$100^\circ\text{C}$	3.5

① 一般对連續变量的因子，如温度等，規定高水平取  $+1$ ，低水平取  $-1$ ，——譯者注

3.5 时取 +1 (这种对应对于  $\beta_4$  的解釋是重要的, 但无论如何規定, 分析的原理总是一样的)。此外, 在这种情形中有一項“一般平均”  $\mu$ , 它相当于上节例子中的天平的偏差。因为分析的方法与上节的例子相同, 所以从略。至于結果的解釋, 若其他条件相同, 则可以估計: 使用設備 I 比使用設備 II,  $y$  平均高出  $2b_1$ ; 同样可以估計: 利用原料 A 比利用原料 B,  $y$  平均高出  $2b_2$ ; 使溫度从  $100^\circ\text{C}$  变为  $120^\circ\text{C}$  时,  $y$  平均高出  $2b_3$ ; 使 pH 从 3.0 变为 3.5 时,  $y$  平均高出  $2b_4$ 。而且, 当固定这些因子于一定的水平时, 由于其他原因而引起的  $y$  的随机变化的方差  $\sigma^2$ , 可以用殘差的无偏方差  $\hat{\sigma}^2 = \{\sum y^2 - (G^2 + \sum B_i^2)/8\}/3$  来估計 (参看上节末尾的注)。

若因子的影响不是可加的, 則称这种因子間存在着“交互作用”。例如在上例中, 若設備和原料的影响不是可加的, 則說在設備和原料之間存在着交互作用。这时, 我們可以多引进一个表示交互作用的参数, 并且考虑如表 12.2 的构造。設表示設備  $\times$  原料的交互作用的参数  $\beta_3$  的系数恒等于設備效应  $\beta_1$  的系数与原料效应  $\beta_2$  的系数的乘积。这时  $X$  表也具有正交性 ( $\beta_3$  的列相当于上节  $H_8$  的第 4 列), 所以按照上节所述的方法, 便可进行这种試驗的分析。

表 12.2 存在交互作用时的  $X$  表的例子  
(+ 表示 +1, - 表示 -1)

No.	設 备 $\beta_1$	原 料 $\beta_2$	設備 $\times$ 原料 $\beta_3$	溫 度 $\beta_4$	pH $\beta_5$	数 据
1	+	+	+	+	+	$y_1$
2	-	+	-	+	-	$y_2$
3	+	-	-	+	+	$y_3$
4	-	-	+	+	-	$y_4$
5	+	+	+	-	-	$y_5$
6	-	+	-	-	+	$y_6$
7	+	-	-	-	-	$y_7$
8	-	-	+	-	+	$y_8$

一般, 如上节的  $H_4$ ,  $H_8$ ,  $H_{16}$  那样, 可以造出  $N$  等于 2 的乘



幂的 Hadamard 矩陣, 使得其中必有一列等于其他任何二列对应元素的乘积。因此当交互作用存在时, 就可以象表 12.2 的情形那样来处理(但必须注意, 不应把其他因子排在交互作用这一列上)。与此相反, 当交互作用存在时, 利用  $H_{12}$  和  $H_{20}$ ,  $X$  表的正交性就不完整<sup>①</sup>, 因而分析会碰到一些困难。

高阶交互作用, 即三个因子以上的交互作用存在的情形, 和上面一样, 只须造出包含交互作用的参数在内的构造表即可。若那是具有正交性的设计, 则可按照上节的方法进行分析。当考虑所有  $m$  个因子的交互作用时, 欲作具有正交性的设计, 就必须实施所有  $2^m$  个因子组合(甚至重复几次)。这就是  $2^m$  型的“完全因子试验设计”。

### § 13 $s^m$ 型正交陣列

考虑  $m$  个因子的试验, 设每个因子都具有  $s$  水平。例如, 把  $s$  部设备,  $s$  种原料,  $s$  种温度和  $s$  种 pH 组合起来作试验。

当第 1 个因子取水平  $\lambda$  时, 记其效应为  $\beta_{1\lambda} (\lambda=0, 1, \dots, s-1)$ 。同样, 记第 2 个因子以及其余因子的效应为  $\beta_{2\lambda}, \dots, \beta_{m\lambda}$ 。若交互作用不存在, 则数据的构造是

$$y_\alpha = \mu + \sum_{i=1}^m \beta_{i\lambda_i} + \varepsilon_\alpha \quad (\alpha=1, 2, \dots, N). \quad (13.1)$$

此处  $\mu$  是“一般平均”,  $\varepsilon_\alpha$  是独立地遵循  $N(0, \sigma^2)$  的“误差”。因为各因子的水平组合  $(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$  每次测定都有所不同, 所以把它记如表 13.1。表中的每一个 \* 应记入从 0 到  $s-1$  的任何一个数字。用这个表完全可以表达一种设计。

表 13.1 因子组合表

$\alpha$	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\dots$	$\lambda_m$
1	*	*	$\dots$	*
2	*	*	$\dots$	*
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$
$N$	*	*	$\dots$	*

① 因为在  $H_{12}$  或者  $H_{20}$  中, 任意一列不等于其余任意二列的乘积。这个性质, 由于 12 和 20 不是 2 的乘幂这一性质所决定。——译者注

表 13.2  $3^5 (N=27)$ 

測定次數 $\alpha$	因子A的水平 $\lambda_1$	因子B的水平 $\lambda_2$	因子P的水平 $\lambda_3$	因子Q的水平 $\lambda_4$	因子R的水平 $\lambda_5$
1	0	0	0	0	0
2	1	0	0	1	1
3	2	0	0	2	2
4	0	1	0	0	0
5	1	1	0	1	1
6	2	1	0	2	2
7	0	2	0	0	0
8	1	2	0	1	1
9	2	2	0	2	2
10	0	0	1	1	2
11	1	0	1	2	0
12	2	0	1	0	1
13	0	1	1	1	2
14	1	1	1	2	0
15	2	1	1	0	1
16	0	2	1	1	2
17	1	2	1	2	0
18	2	2	1	0	1
19	0	0	2	2	1
20	1	0	2	0	2
21	2	0	2	1	0
22	0	1	2	2	1
23	1	1	2	0	2
24	2	1	2	1	0
25	0	2	2	2	1
26	1	2	2	0	2
27	2	2	2	1	0

例1 在  $m=5$  个因子分別有  $s=3$  水平的实验的情形, 若按照表 13.2 的因子組合进行  $N=27$  个測定, 則实际上是从  $3^5=243$  个可能組合中选择  $1/9$  即选 27 个来实施。

因为在构造式 (13.1) 中存在着无用参数, 所以要象 § 8 那样作变换。也就是說, 令

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{s}} & u_{01} & u_{02} & \cdots & u_{0,s-1} \\ \frac{1}{\sqrt{s}} & u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1,s-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{s}} & u_{s-1,1} & u_{s-1,2} & \cdots & u_{s-1,s-1} \end{bmatrix} \quad (13.2)$$

为一个正交矩阵, 然后由

$$\beta_{i\lambda} = \frac{1}{\sqrt{s}} \beta_{i0} + \sum_{k=1}^{s-1} u_{\lambda k} \beta_{ik} \quad (\lambda = 0, \dots, s-1) \quad (13.3)$$

把  $\beta_{i0}, \dots, \beta_{i,s-1}$  变换为  $\beta_{i0}, \dots, \beta_{i,s-1}$  (矩阵(13.2)的具体例子, 可以参看 § 8)。对各个因子  $i$  ( $i = 1, \dots, m$ ) 都作这种变换, 然后令

$$\mu = \dot{\mu} - \frac{1}{\sqrt{s}} \sum_{i=1}^m \beta_{i0}, \quad (13.4)$$

便可以把(13.1)改写为

$$y_\alpha = \dot{\mu} + \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^{s-1} u_{\lambda k} \beta_{ik} + \varepsilon_\alpha \quad (\alpha = 1, 2, \dots, N), \quad (13.5)$$

例 2 关于表 13.2 的设计, 若列出(13.5)的构造表(X表), 则得表 13.3。但因

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & u_{01} & u_{02} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & u_{11} & u_{12} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & u_{21} & u_{22} \end{bmatrix}$$

是正交矩阵, 所以有

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\lambda=0}^2 u_{\lambda 1} &= \sum_{\lambda=0}^2 u_{\lambda 2} = 0, \\ \sum_{\lambda=0}^2 u_{\lambda 1} u_{\lambda 2} &= 0, \end{aligned} \right\}$$

表 13.3  $X$  表

$\hat{\mu}$	$\hat{\beta}_{11}$	$\hat{\beta}_{12}$	$\hat{\beta}_{21}$	$\hat{\beta}_{22}$	$\hat{\beta}_{31}$	$\hat{\beta}_{32}$	$\hat{\beta}_{41}$	$\hat{\beta}_{42}$	$\hat{\beta}_{51}$	$\hat{\beta}_{52}$	数 据
1	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$y_1$
1	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$y_2$
1	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$y_3$
1	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$y_4$
1	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$y_5$
1	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$y_6$
1	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$y_7$
1	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$y_8$
1	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$y_9$
1	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$y_{10}$
1	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$y_{11}$
1	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$y_{12}$
1	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$y_{13}$
1	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$y_{14}$
1	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$y_{15}$
1	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$y_{16}$
1	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$y_{17}$
1	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$y_{18}$
1	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$y_{19}$
1	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$y_{20}$
1	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$y_{21}$
1	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$y_{22}$
1	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$y_{23}$
1	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$y_{24}$
1	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$y_{25}$
1	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$y_{26}$
1	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{21}$	$u_{22}$	$u_{11}$	$u_{12}$	$u_{01}$	$u_{02}$	$y_{27}$

由此可知,表 13.3 具有正交性。这就是說,对任意的  $i$  和  $k$ ,  $\hat{\beta}_{ik}$  的列与  $\hat{\mu}$  的列的内积是  $9(u_{0k} + u_{1k} + u_{2k}) = 0$  (因为每一  $\lambda_i$  取 0, 1, 2 各 9 次)。同理,对同一的  $i$ ,  $\hat{\beta}_{i1}$  的列与  $\hat{\beta}_{i2}$  的列的内积是  $9(u_{01}u_{02} + u_{11}u_{12} + u_{21}u_{22}) = 0$ 。但对不同的  $i, i'$  ( $k = k'$  或者  $k \neq k'$ ),  $\hat{\beta}_{ik}$  的列与  $\hat{\beta}_{i'k'}$  的列的内积是

$$3(u_{0k} + u_{1k} + u_{2k})(u_{0k'} + u_{1k'} + u_{2k'}) = 0$$

(因为  $\lambda_i$  和  $\lambda_{i'}$  的 9 个組合 00, 01, 02, 10, 11, 12, 20, 21, 22 各出現三次)。

一般地說,若在表 13.1 中,下列两个条件得到滿足,則(13.5)的构造表具有正交性:

(1) 对任意的  $i$ ,  $\lambda_i$  取每一个  $0, 1, \dots, s-1$  的次数相同。

(2) 对任意不同的  $i$  和  $i'$ ,  $(\lambda_i, \lambda_{i'})$  取  $s^2$  个組合  $(0, 0), (0, 1), \dots, (0, s-1); (1, 0), (1, 1), \dots, (1, s-1); \dots; (s-1, 0), (s-1, 1), \dots, (s-1, s-1)$  的次数相同。

因为,由(1)推知,对任意的  $i$  和  $k$ ,  $\mu$  的系数与  $\beta_{ik}$  的系数的乘积之和是

$$\frac{N}{s} \sum_{\lambda=0}^{s-1} u_{\lambda k} = 0;$$

其次,同样由(1)推知,对同一的  $i$  以及不同的  $k$  和  $k'$ ,  $\beta_{ik}$  的系数与  $\beta_{ik'}$  的系数的乘积之和是

$$\frac{N}{s} \sum_{\lambda=0}^{s-1} u_{\lambda k} u_{\lambda k'} = 0;$$

最后,由(2)推知,对不同的  $i, i'$  以及任意的  $k$  和  $k'$ ,  $\beta_{ik}$  的系数与  $\beta_{i'k'}$  的系数的乘积之和是

$$\frac{N}{s^2} \sum_{\lambda=0}^{s-1} \sum_{\lambda'=0}^{s-1} u_{\lambda k} u_{\lambda' k'} = \frac{N}{s^2} \sum_{\lambda=0}^{s-1} u_{\lambda k} \sum_{\lambda'=0}^{s-1} u_{\lambda' k'} = 0.$$

下面討論上列两个条件被滿足的情形。

$\mu$  的系数的平方和等于  $N$ 。而且由(1)推知,对于任意的  $i, k$ ,  $\beta_{ik}$  的系数的平方和等于

$$\frac{N}{s} \sum_{\lambda=0}^{s-1} u_{\lambda k}^2 = \frac{N}{s}.$$

正規方程的右边,对  $\mu$  是  $\sum_{\alpha} y_{\alpha}$ , 而对  $\beta_{ik}$  是  $\sum_{\alpha} u_{\lambda_i k} y_{\alpha}$  (注意  $\lambda_i$  是  $\alpha$  的函数), 或者可以写成  $\sum_{\lambda} B_{i\lambda} u_{\lambda k}$ , 此处  $B_{i\lambda}$  是  $\lambda_i$  等于  $\lambda$  的那些数据的总和。因此,估計量是

$$\hat{m} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} y_{\alpha}, \quad (13.6)$$

$$\hat{b}_{ik} = \frac{s}{N} \sum_{\alpha} u_{\lambda k} y_{\alpha} = \frac{s}{N} \sum_{\lambda} B_{ik} u_{\lambda k} \\ (i=1, \dots, m; k=1, \dots, s-1). \quad (13.7)$$

这些估計量是相互独立的, 它們的方差是

$$V(\hat{b}_{ik}) = \frac{\sigma^2}{N}; \quad V(\hat{b}_{ik}) = \frac{s}{N} \sigma^2 \\ (i=1, \dots, m; k=1, \dots, s-1). \quad (13.8)$$

为了使参数的一次式

$$\theta = l_0 \mu + \sum_{i=1}^m \sum_{\lambda=0}^{s-1} l_{i\lambda} \beta_{i\lambda} \quad (13.9)$$

是可估計的, 在改写后的式子

$$\theta = l_0 \mu + \sum_{i=1}^m \sum_{\lambda=0}^{s-1} \sum_{k=1}^{s-1} l_{i\lambda} u_{\lambda k} \hat{\beta}_{ik} + \sum_{i=1}^m \left( \sum_{\lambda=0}^{s-1} l_{i\lambda} - l_0 \right) \frac{1}{s} \hat{\beta}_{i0} \quad (13.10)$$

中, 应使  $\hat{\beta}_{i0}$  ( $i=1, \dots, m$ ) 的系数都等于0. 即必須有

$$\sum_{\lambda=0}^{s-1} l_{i\lambda} = l_0 \quad (i=1, \dots, m). \quad (13.11)$$

满足(13.11)的  $\theta$  就是可估計的。

例如, 由满足

$$\sum_{\lambda=0}^{s-1} c_{\lambda} = 0 \quad (13.12)$$

的任意系数  $c_0, \dots, c_{s-1}$  所构成的

$$\theta_c = \sum_{\lambda=0}^{s-1} c_{\lambda} \beta_{i\lambda} \quad (13.13)$$

是可估計的. 这叫做第  $i$  个因子效应的“对比”.  $\beta_{i0} - \beta_{i1}$  和  $\beta_{i0} + \beta_{i1} - 2\beta_{i2}$  就是对比的例子. 改写  $\theta_c$  便得

$$\theta_c = \sum_{\lambda=0}^{s-1} c_{\lambda} \left( \frac{1}{s} \hat{\beta}_{i0} + \sum_{k=1}^{s-1} u_{\lambda k} \hat{\beta}_{ik} \right) = \sum_{\lambda=0}^{s-1} \sum_{k=1}^{s-1} c_{\lambda} u_{\lambda k} \hat{\beta}_{ik}, \quad (13.14)$$

所以它的估計量由

$$\hat{\theta}_c = \sum_{\lambda=0}^{s-1} \sum_{k=1}^{s-1} c_{\lambda} u_{\lambda k} \hat{b}_{ik} \quad (13.15)$$

給出. 以(13.7)代入上式, 便得

$$\begin{aligned}\hat{\theta}_G &= \sum_{\lambda=0}^{s-1} \sum_{k=1}^{s-1} c_{\lambda} u_{\lambda k} \frac{s}{N} \sum_{\alpha=1}^N u_{\lambda k} y_{\alpha} \\ &= \sum_{\lambda=0}^{s-1} c_{\lambda} \frac{s}{N} \sum_{\alpha=1}^N \left( \sum_{k=1}^{s-1} u_{\lambda k} u_{\lambda k} \right) y_{\alpha}.\end{aligned}\quad (13.16)$$

但是, 由于 (13.2) 是正交矩陣, 我們有关系

$$\frac{1}{s} + \sum_{k=1}^{s-1} u_{\lambda k} u_{\lambda' k} = \begin{cases} 1, & \lambda = \lambda', \\ 0, & \lambda \neq \lambda', \end{cases} \quad (13.17)$$

所以  $\sum_k u_{\lambda k} u_{\lambda' k}$  仅当  $\lambda_i$  等于  $\lambda$  时才为  $1 - 1/s$ , 而在其他情形时皆为  $-1/s$ . 从而 (13.16) 变成

$$\hat{\theta}_G = \sum_{\lambda=0}^{s-1} c_{\lambda} \frac{s}{N} \left( B_{i\lambda} - \frac{1}{s} G \right) = \sum_{\lambda=0}^{s-1} c_{\lambda} \frac{s}{N} B_{i\lambda}, \quad (13.18)$$

此处, 如上面所述,  $B_{i\lambda}$  是  $\lambda_i$  等于  $\lambda$  的那些  $y_{\alpha}$  的和, 也就是第  $i$  个因子以水平  $\lambda$  出现时的数据 (有  $N/s$  个) 的和;  $G$  是数据的总和, 但在上式右边中, 由于 (13.12) 而导致包含它的项消失了。

利用 (13.15) 和 (13.8) 便可算得  $\hat{\theta}_G$  的方差为

$$\begin{aligned}V(\hat{\theta}_G) &= \sum_{k=1}^{s-1} \left( \sum_{\lambda=0}^{s-1} c_{\lambda} u_{\lambda k} \right)^2 \frac{s}{N} \sigma^2 \\ &= \sum_{\lambda=0}^{s-1} \sum_{\lambda'=0}^{s-1} c_{\lambda} c_{\lambda'} \sum_{k=1}^{s-1} u_{\lambda k} u_{\lambda' k} \frac{s}{N} \sigma^2 = \sum_{\lambda=0}^{s-1} c_{\lambda}^2 \frac{s}{N} \sigma^2.\end{aligned}\quad (13.19)$$

再举一个可估計的一次式的例子。当各因子的水平分别指定为  $\lambda_1, \dots, \lambda_m$  时,  $y$  的数学期望是

$$\theta_M = \mu + \sum_{i=1}^m \beta_{i\lambda_i}, \quad (13.20)$$

改写上式便得

$$\hat{\theta}_M = \hat{\mu} + \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^{s-1} u_{\lambda_i k} \hat{\beta}_{ik}, \quad (13.21)$$

所以这是可估計的。它的估計量由

$$\hat{\theta}_M = \bar{y} + \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^{s-1} u_{\lambda_i k} \hat{b}_{ik} \quad (13.22)$$

給出。以 (13.7) 代入上式, 經過和上面一样的整理, 使得

$$\hat{\theta}_M = \frac{G}{N} + \sum_{i=1}^m \frac{s}{N} \left( B_{i\lambda_i} - \frac{1}{s} G \right) = \frac{s}{N} \sum_{i=1}^m B_{i\lambda_i} - \frac{m-1}{N} G. \quad (13.23)$$

而且从(13.22)和(13.8)推知, 它的方差是

$$\begin{aligned} V(\hat{\theta}_M) &= \frac{\sigma^2}{N} + \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^{s-1} u_{\lambda_i k}^2 \frac{s}{N} \sigma^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{N} + \sum_{i=1}^m \left( 1 - \frac{1}{s} \right) \frac{s}{N} \sigma^2 = \frac{1+m(s-1)}{N} \sigma^2. \end{aligned} \quad (13.24)$$

**例3** 对例1的情形, 从表13.2求各因子的各水平的部分和, 使得

$$\left. \begin{aligned} B_{10} &= y_1 + y_4 + y_7 + y_{10} + y_{13} + y_{16} + y_{19} + y_{22} + y_{25}, \\ B_{11} &= y_2 + y_5 + y_8 + y_{11} + y_{14} + y_{17} + y_{20} + y_{23} + y_{26}, \\ B_{12} &= y_3 + y_6 + y_9 + y_{12} + y_{15} + y_{18} + y_{21} + y_{24} + y_{27}, \\ &\dots\dots\dots \\ B_{52} &= y_3 + y_6 + y_9 + y_{10} + y_{13} + y_{16} + y_{20} + y_{23} + y_{26}. \end{aligned} \right\}$$

在进行实际计算的时候, 把这些部分和列成表13.4的形状较为方便。

$$\theta_C = c_0 \beta_{10} + c_1 \beta_{11} + c_2 \beta_{12} \quad (c_0 - c_1 + c_2 = 0)$$

的估计量是

$$\hat{\theta}_C = \frac{c_0 B_{10} + c_1 B_{11} + c_2 B_{12}}{9},$$

它的方差是

$$V(\hat{\theta}_C) = (c_0^2 + c_1^2 + c_2^2) \frac{\sigma^2}{9}.$$

又

$$\theta_M = \mu + \beta_{1\lambda_1} + \beta_{2\lambda_2} + \beta_{3\lambda_3} + \beta_{4\lambda_4} + \beta_{5\lambda_5}$$

的估计量是

$$\hat{\theta}_M = \frac{G}{27} + \sum_{i=1}^5 \left( \frac{B_{i\lambda_i}}{9} - \frac{G}{27} \right) = \frac{1}{9} \sum_{i=1}^5 B_{i\lambda_i} - \frac{4}{27} G,$$

它的方差是

$$V(\hat{\theta}_M) = \frac{1+5 \times 2}{27} \sigma^2 = \frac{11}{27} \sigma^2.$$

残差平方和的计算公式是

$$S_E = \sum_{\alpha=1}^N y_{\alpha}^2 - \left\{ \frac{1}{N} \left( \sum_{\alpha} y_{\alpha} \right)^2 + \frac{s}{N} \sum_i \sum_k \left( \sum_{\lambda} B_{i\lambda} u_{\lambda k} \right)^2 \right\}. \quad (13.25)$$

由于

表13.4 各水平的部分和

因子 \ 水平	0	1	2	和
A	$B_{10}$	$B_{11}$	$B_{12}$	$G$
B	$B_{20}$	$B_{21}$	$B_{22}$	$G$
P	$B_{30}$	$B_{31}$	$B_{32}$	$G$
Q	$B_{40}$	$B_{41}$	$B_{42}$	$G$
R	$B_{50}$	$B_{51}$	$B_{52}$	$G$



$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^{s-1} \left( \sum_{\lambda=0}^{s-1} B_{\lambda k} u_{\lambda k} \right)^2 &= \sum_{k=1}^{s-1} \sum_{\lambda=0}^{s-1} \sum_{\lambda'=0}^{s-1} B_{\lambda k} B_{\lambda' k} u_{\lambda k} u_{\lambda' k} \\
&= \sum_{\lambda=0}^{s-1} B_{\lambda \lambda}^2 - \frac{1}{s} \sum_{\lambda=0}^{s-1} \sum_{\lambda'=0}^{s-1} B_{\lambda \lambda} B_{\lambda' \lambda'} = \sum_{\lambda=0}^{s-1} B_{\lambda \lambda}^2 \\
&\quad - \frac{1}{s} \left( \sum_{\lambda=0}^{s-1} B_{\lambda \lambda} \right)^2 = \sum_{\lambda=0}^{s-1} B_{\lambda \lambda}^2 - \frac{1}{s} G^2, \quad (13.26)
\end{aligned}$$

因此可以把 (13.25) 改写为

$$\begin{aligned}
S_E &= \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \left\{ \frac{G^2}{N} + \sum_{i=1}^m \left( \frac{s}{N} \sum_{\lambda=0}^{s-1} B_{\lambda \lambda}^2 - \frac{G^2}{N} \right) \right\} \\
&= \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \sum_{i=1}^m \frac{s}{N} \sum_{\lambda=0}^{s-1} B_{\lambda \lambda}^2 + \frac{m-1}{N} G^2. \quad (13.27)
\end{aligned}$$

以自由度  $N - \{1 + m(s-1)\}$  除上式, 使得  $\sigma^2$  的无偏估计。

**例 4** 在例 3 的情形中, 残差平方和可以由

$$\begin{aligned}
S_E &= \sum_{\alpha=1}^{27} y_{\alpha}^2 - \left\{ \frac{G^2}{27} + \sum_{i=1}^5 \left( \frac{B_{i0}^2 + B_{i1}^2 + B_{i2}^2}{9} - \frac{G^2}{27} \right) \right\} \\
&= \sum_{\alpha=1}^{27} y_{\alpha}^2 - \sum_{i=1}^5 \sum_{\lambda=0}^2 \frac{B_{i\lambda}^2}{9} + \frac{4G^2}{27}
\end{aligned}$$

来计算。以  $27 - (1 + 5 \times 2) = 16$  除上式, 使得  $\sigma^2$  的无偏估计。

[注] 在本节中, “拉丁方”相当于  $m=3, N=s^2$  的情形; “希腊·拉丁方”相当于  $m=4, N=s^3$  的情形。  $m>4, N=s^3$  的情形叫做“超希腊·拉丁方”,  $m=3, N=s^3$  的情形叫做“拉丁立方”。因为这些设计都可以理解为  $s^m$  型因子试验的“部分实施法”<sup>①</sup>, 所以本节就作了这样的处理。

## § 14 交互作用 ( $s^m$ 型的情形)

上一节假设交互作用不存在, 并且利用了只包含主要效应的构造式 (13.1)。但是, 即使交互作用存在, 如上一节那样, 如果各因

① fractional replication 的译语。也有人译作“部分重复”(见 [30] 的中译本), 但“重复”的语义与实际有出入。

一般地说, 在因子试验中, 当因子个数  $m$  大时, 试验组合  $s^m$  也大, 这样, 在同一区组 (环境条件) 下做试验是不可能的。因此需要考虑: 1) 牺牲某些效应, 以便减少试验组合 (个数); 2) 不减少试验组合, 而缩小在同一区组 (环境条件) 内的试验组合。1) 的思想产生了部分实施法; 2) 的思想产生了混杂法 (见 § 20 的 [注])。由于二因子以上的交互作用可以忽略不计, 因此通常牺牲或混杂这些效应。详见 D. J. Finney: Ann. Eugen., 12 (1945), 191~301; Cochran-Cox<sup>[3]</sup>, Kempthorne<sup>[9]</sup>, 北川<sup>[12], [11]</sup> 和增山<sup>[13]</sup>。——译者注

子的水平数  $s$  为一定的, 并且这个  $s$  是素数, 如 2, 3, 5, 7, 或者是“素数的乘幂”, 如  $4(=2^2)$ ,  $8(=2^3)$ ,  $9(=3^2)$ , 那末为了表示二因子交互作用(自由度是  $(s-1)^2$ ), 可以考虑为在因子中多加上  $(s-1)$  个  $s$  水平的因子似的(实际上相当于  $(s-1)$  个参数)<sup>①</sup>。詳細情形可以参看本丛书增山元三郎: “实验計画法”一书<sup>②</sup>。这里只举出几个例子。

$s=2$  的情形, 处理方法已在 §12 中作了叙述。

$s=3$  的情形, 为了表示二因子交互作用, 可以考虑为在因子中多加上 2 个三水平的因子似的。为了表示因子 A 和因子 B 的交互作用而引进的 2 个新的“拟似因子”, 按照系統的記法記作  $(AB)$  和  $(AB^2)$ 。若因子 A 的水平是  $\lambda_1$ , 因子 B 的水平是  $\lambda_2$ , 則一般的原則是, 令  $(AB)$  的水平等于  $\lambda_1 + \lambda_2 \pmod{3}$ ,  $(AB^2)$  的水平等于  $\lambda_1 + 2\lambda_2 \pmod{3}$ 。

**例 1** 在上节的例 1 中, 当因子 A 和因子 B 的交互作用不能忽略时, 应该引进  $(AB)$  和  $(AB^2)$  为交互作用的分量, 并以  $\lambda_3, \lambda_4$  表示它们的水平, 以  $\lambda_5, \lambda_6$  和  $\lambda_7$  分別表示因子 P, Q 和 R 的水平(依次降低标号), 这样可以得到与 (13.1) 相同的模型, 其中  $m=7$ 。这时表 13.2 变为表 14.1。

表 14.1 也具有上节所述意义的正交性, 所以完全可以象上节那样地进行分析。各水平部分和的表由表 13.4 变为表 14.2。殘差平方和的計算公式是

$$\begin{aligned} S_E &= \sum_{\alpha=1}^{27} y_{\alpha}^2 - \left\{ \frac{G^2}{27} + \sum_{i=1}^7 \left( \frac{B_{i0}^2 + B_{i1}^2 + B_{i2}^2}{9} - \frac{G^2}{27} \right) \right\} \\ &= \sum_{\alpha=1}^{27} y_{\alpha}^2 - \sum_{i=1}^7 \sum_{\lambda=0}^2 \frac{B_{i\lambda}^2}{9} + \frac{6G^2}{27}, \end{aligned}$$

它的自由度是  $27 - (1 + 7 \times 2) = 12$ ,  $V_E = S_E/12$  是  $\sigma^2$  的无偏估計。

[注] 通常把主要效应和交互作用統称为因子效应。

$s=4$  的情形, 一般不把因子的水平  $\lambda=0, 1, 2, 3$  看做普通的

① 即把二因子交互作用看做  $s$  水平的因子。由于二因子交互作用的自由度是  $(s-1)^2$ , 而且在  $s^m$  型正交陣列中每列(因子)只有  $(s-1)$  个自由度, 所以必須多加  $(s-1)$  列, 才能得到  $(s-1)(s-1) = (s-1)^2$  个自由度。——譯者注

② 即增山[31]。——譯者注

表 14.1  $3^7$  ( $\lambda = 27$ ) 水平組合表

測定次數 $\alpha$	A 的水平 $\lambda_1$	B 的水平 $\lambda_2$	(AB) 的水 平 $\lambda_3$	(AB <sup>2</sup> ) 的水 平 $\lambda_4$	P 的水平 $\lambda_5$	Q 的水平 $\lambda_6$	R 的水平 $\lambda_7$
1	0	0	0	0	0	0	0
2	1	0	1	1	0	1	1
3	2	0	2	2	0	2	2
4	0	1	1	2	0	0	0
5	1	1	2	0	0	1	1
6	2	1	0	1	0	2	2
7	0	2	2	1	0	0	0
8	1	2	0	2	0	1	1
9	2	2	1	0	0	2	2
10	0	0	0	0	1	1	2
11	1	0	1	1	1	2	0
12	2	0	2	2	1	0	1
13	0	1	1	2	1	1	2
14	1	1	2	0	1	2	0
15	2	1	0	1	1	0	1
16	0	2	2	1	1	1	2
17	1	2	0	2	1	2	0
18	2	2	1	0	1	0	1
19	0	0	0	0	2	2	1
20	1	0	1	1	2	0	2
21	2	0	2	2	2	1	0
22	0	1	1	2	2	2	1
23	1	1	2	0	2	0	2
24	2	1	0	1	2	1	0
25	0	2	2	1	2	2	1
26	1	2	0	2	2	0	2
27	2	2	1	0	2	1	0

表 14.2 各水平部分和

因子效应 \ 水 平	0	1	2	總 計
$\Delta$	$B_{10}$	$B_{11}$	$B_{12}$	G
B	$B_{20}$	$B_{21}$	$B_{22}$	G
(AB)	$B_{30}$	$B_{31}$	$B_{32}$	G
(AB <sup>2</sup> )	$B_{40}$	$B_{41}$	$B_{42}$	G
P	$B_{50}$	$B_{51}$	$B_{52}$	G
Q	$B_{60}$	$B_{61}$	$B_{62}$	G
R	$B_{70}$	$B_{71}$	$B_{72}$	G

表 14.3 加法

+	$\alpha_0$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$
$\alpha_0$	$\alpha_0$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$
$\alpha_1$	$\alpha_1$	$\alpha_0$	$\alpha_3$	$\alpha_2$
$\alpha_2$	$\alpha_2$	$\alpha_3$	$\alpha_0$	$\alpha_1$
$\alpha_3$	$\alpha_3$	$\alpha_2$	$\alpha_1$	$\alpha_0$

表 14.4 乘法

$\times$	$\alpha_0$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$
$\alpha_0$	$\alpha_0$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\alpha_3$
$\alpha_1$	$\alpha_1$	$\alpha_0$	$\alpha_3$	$\alpha_2$
$\alpha_2$	$\alpha_2$	$\alpha_3$	$\alpha_0$	$\alpha_1$
$\alpha_3$	$\alpha_3$	$\alpha_2$	$\alpha_1$	$\alpha_0$

数, 而考虑把它对应于 Galois 域  $GF(2^2)$  的元素  $\alpha_0 = 0$ ,  $\alpha_1 = 1$ ,  $\alpha_2 = t$ ,  $\alpha_3 = t^2$ . 这里  $t$  是一个原根, 它满足关系  $t^2 = t + 1$ . 若以 mod 2 来解释系数, 便得加法表如表 14.3, 乘法表如表 14.4. 利用这种算术的规则, 可以把交互作用的分量  $(AB)$ ,  $(AB^2)$  和  $(AB^3)$  的水平定义为:

因子 A 的水平  $\lambda_1$ ,

因子 B 的水平  $\lambda_2$ ,

表 14.5  $s=4$  的情形

A 的水平 $\lambda_1$	B 的水平 $\lambda_2$	$(AB)$ 的水平 $\lambda_3$	$(AB^2)$ 的水平 $\lambda_4$	$(AB^3)$ 的水平 $\lambda_5$
0	0	0	0	0
1	0	1	1	1
2	0	2	2	2
3	0	3	3	3
0	1	1	2	3
1	1	0	3	2
2	1	3	0	1
3	1	2	1	0
0	2	2	3	1
1	2	3	2	0
2	2	0	1	3
3	2	1	0	2
0	3	3	1	2
1	3	2	0	3
2	3	1	3	0
3	3	0	2	1

$$\left. \begin{array}{ll} \text{分量}(AB) \text{的水平 } \lambda_3, & \alpha_{\lambda_3} = \alpha_{\lambda_1} + \alpha_1 \alpha_{\lambda_2}, \\ \text{分量}(AB^2) \text{的水平 } \lambda_4, & \alpha_{\lambda_4} = \alpha_{\lambda_1} + \alpha_2 \alpha_{\lambda_2}, \\ \text{分量}(AB^3) \text{的水平 } \lambda_5, & \alpha_{\lambda_5} = \alpha_{\lambda_1} + \alpha_3 \alpha_{\lambda_2}. \end{array} \right\} \quad (14.1)$$

具体地说,就是表 14.5 的关系。

[注] 在交互作用可以被忽略的情形下,把表 14.5 的  $\lambda_3$  或  $\lambda_4$  当作别的因子的水平,便可进行部分实施法。这就是所谓  $4 \times 4$  的拉丁方或者希腊-拉丁方(参看上节末尾的注)。

## § 15 多因子試驗模型

本节将讨论一般的构造模型。它包含着前面讲过的各种模型,作为特殊情形。

设有  $m$  个因子  $F_j (j=1, \dots, m)$ , 并设各个因子分别具有  $s_j$  个水平

$$\lambda_j = 0, 1, \dots, s_j - 1 \quad (15.1)$$

(这叫做  $s_1 \times s_2 \times \dots \times s_m$  型)。

这时,可以考虑的因子效应有下列  $2^m - 1$  个:

$$\begin{array}{lll} \text{主要效应:} & F_j \text{ 的主要效应} & m \text{ 个,} \\ \text{二因子交互作用:} & F_{j_1} \times F_{j_2} & \binom{m}{2} \uparrow, \\ \text{三因子交互作用:} & F_{j_1} \times F_{j_2} \times F_{j_3} & \binom{m}{3} \uparrow, \\ \dots\dots\dots & \dots\dots\dots & \dots\dots\dots, \\ \text{\textit{m} 因子交互作用:} & F_1 \times F_2 \times \dots \times F_m & 1 \text{ 个.} \end{array}$$

一般,设  $t$  因子交互作用(若  $t=1$ , 则是主要效应)

$$F_{j_1} \times F_{j_2} \times \dots \times F_{j_t} \quad (15.2)$$

由与此有关的因子的标号集合

$$J = \{j_1, j_2, \dots, j_t\} \quad (15.3)$$

来标志。 $\mathcal{J}$  是  $\{1, 2, \dots, m\}$  的子集。设空集合  $()$  对应于一般平均。除空集合以外,子集总共有  $2^m - 1$  个,它们分别对应于上列

各个因子效应。

当我们进行分析时, 往往只考虑  $2^n - 1$  个因子效应中的一部分, 而忽略其余的部分 (一般地说, 高阶交互作用往往是可以忽略的)。不能忽略的因子效应的标志  $J$  的集合记为  $\mathfrak{S}$ , 但规定主要效应  $\{1\}, \{2\}, \dots, \{m\}$  恒包含于  $\mathfrak{S}$ , 并且, 若某个  $J$  包含于  $\mathfrak{S}$ , 则  $J$  的子集也全都包含于  $\mathfrak{S}$ 。今后恒假设  $\sum_J$  的  $J$  都属于  $\mathfrak{S}$ 。

因子效应  $J = \{j_1, \dots, j_t\}$  的效应, 可以由与此有关的因子的水平  $\lambda_{j_1}, \dots, \lambda_{j_t}$  来确定。这样, 我们可以利用矢量记号

$$A_J = (\lambda_{j_1}, \dots, \lambda_{j_t}), \quad (15.4)$$

把这个效应记作  $\beta_J(A_J)$ 。因为一般平均不依赖于因子的水平而恒为一定, 所以记作  $\beta_0$ 。这样一来, 数据的构造模型就是

$$y_\alpha = \beta_0 + \sum_J B_J(A_J(\alpha)) + \varepsilon_\alpha \quad (\alpha = 1, \dots, N), \quad (15.5)$$

此处,  $\varepsilon_\alpha$  是独立地遵循  $N(0, \sigma^2)$  的误差, 而

$$A_J(\alpha) = (\lambda_{j_1}(\alpha), \dots, \lambda_{j_t}(\alpha)) \quad (15.6)$$

是从第  $\alpha$  个测定时出现的各因子水平  $\lambda_1(\alpha), \dots, \lambda_m(\alpha)$  中抽出所有属于  $J$  的因子标号  $j_1, \dots, j_t$  而排成的矢量。对  $\alpha = 1, \dots, N$  列出  $\lambda_1(\alpha), \dots, \lambda_m(\alpha)$  的表, 就是试验设计表。

因为在 (15.5) 中一般存在着无用参数, 所以要象 §13 那样作变换, 使无用参数消掉。为此, 先对各因子标号  $j$  分别定义  $s_j$  阶正交矩阵

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{s_j}} & u_j(0, 1) & \cdots & u_j(0, s_j - 1) \\ \frac{1}{\sqrt{s_j}} & u_j(1, 1) & \cdots & u_j(1, s_j - 1) \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \frac{1}{\sqrt{s_j}} & u_j(s_j - 1, 1) & \cdots & u_j(s_j - 1, s_j - 1) \end{bmatrix} \quad (j = 1, \dots, m), \quad (15.7)$$

然后利用这个矩阵,对任意的  $J = \{j_1, \dots, j_t\}$ , 任意的  $A_J = (\lambda_{j_1}, \dots, \lambda_{j_t})$  和任意的

$$K_J = (k_{j_1}, \dots, k_{j_t}) \quad (k_j = 1, \dots, s_j - 1) \quad (j \in J), \quad (15.8)$$

定义

$$U_J(A_J, K_J) = \prod_{j \in J} u_j(\lambda_j, k_j) = u_{j_1}(\lambda_{j_1}, k_{j_1}) \cdots u_{j_t}(\lambda_{j_t}, k_{j_t}). \quad (15.9)$$

下面推导有关上式的基本关系。上式的依据是矩阵(15.7)的正交性,即列与列的乘积之和可以記为

$$\sum_{\lambda_j} u_j(\lambda_j, k_j) = 0, \quad (15.10)$$

$$\sum_{\lambda_j} u_j(\lambda_j, k_j) u_j(\lambda_j, k_j^*) = \delta_{k_j k_j^*}, \quad (15.11)$$

行与行的乘积之和可以記为

$$\frac{1}{s_j} + \sum_{k_j} u_j(\lambda_j, k_j) u_j(\lambda_j^*, k_j) = \delta_{\lambda_j \lambda_j^*}, \quad (15.12)$$

此处  $\delta_{kk^*}$  是 Kronecker 記号。

以后利用求和記号  $\sum_{A_J} = \sum_{\lambda_{j_1}} \cdots \sum_{\lambda_{j_t}}$ ,  $\sum_{K_J} = \sum_{k_{j_1}} \cdots \sum_{k_{j_t}}$ , 并規定  $\lambda_j$  从 0 变到  $s_j - 1$ ;  $k_j$  从 1 变到  $s_j - 1$ . 首先,从(15.10)立刻看出

$$\sum_{A_J} U_J(A_J, K_J) = 0. \quad (15.13)$$

其次,利用(15.10)和(15.11)便得

$$\begin{aligned} & \sum_{A_J \cup J^*} U_J(A_J, K_J) U_{J^*}(A_{J^*}, K_{J^*}) \\ &= \sum_{A_J \cup J^*} \sum_{A_J^* \cup J^*} \sum_{A_J J^*} \prod_{j \in (J - J^*)} u_j(\lambda_j, k_j) \prod_{j \in (J^* - J)} u_j(\lambda_j, k_j^*) \\ & \times \prod_{j \in J \cap J^*} u_j(\lambda_j, k_j) u_j(\lambda_j, k_j^*) = \delta(J, J^*) \delta(K_J, K_{J^*}^*), \end{aligned} \quad (15.14)$$

这里令  $\delta(J, J^*)$  当  $J = J^*$  时等于 1, 其他情形等于 0;  $\delta(K_J, K_{J^*}^*)$  当  $K_J = K_{J^*}^*$  时等于 1, 其他情形等于 0.

此外,对属于  $J$  的所有  $j$  来求(15.12)的乘积,便得

$$\prod_{j \in J} \left\{ \frac{1}{s_j} + \sum_{k_j} u_j(\lambda_j, k_j) u_j(\lambda_j^*, k_j) \right\} = \delta(A_J, A_J^*). \quad (15.15)$$

这式还可以改写为下列形状:

$$\prod_{j \in J} \frac{1}{s_j} + \sum_{J' \subset J} \left( \prod_{j \in (J-J')} \frac{1}{s_j} \right) \sum_{K_{J'}} U_{J'}(\Delta_{J'}, K_{J'}) U_{J'}(\Delta_{J'}^*, K_{J'}) \\ = \delta(\Delta_J, \Delta_J^*), \quad (15.16)$$

这里  $\sum_{J' \subset J}$  是对  $J$  的所有子集  $J'$  (包含  $J$  本身, 但不包含空集合) 的求和。

根据上面的准备, 我們定义新的参数为

$$\beta_0 = \beta_0 + \sum_J \left( \prod_{j \in J} \frac{1}{s_j} \right) \sum_{\Delta_J} \beta_J(\Delta_J), \quad (15.17)$$

$$\beta_J(K_J) = \sum_{\Delta_J} U_J(\Delta_J, K_J) \sum_{J' \supset J} \left( \prod_{j \in (J'-J)} \frac{1}{s_j} \right) \sum_{\Delta_{J'-J}} \beta_{J'}(\Delta_{J'}), \quad (15.18)$$

(15.17) 是各因子效应的平均之和, 而 (15.18) 是这样得来的: 在与因子效应  $J' (\supset J)$  有关的因子中, 固定与  $J$  有关的因子水平, 而使其他因子水平变化并求其平均, 再将这个平均对所有  $J' (\supset J)$  求和, 然后再作相当于坐标軸旋轉的变换。因此, 我們有

$$\begin{aligned} & \beta_0 + \sum_J \sum_{K_J} U_J(\Delta_J, K_J) \beta_J(K_J) \\ &= \beta_0 + \sum_J \left( \prod_{j \in J} \frac{1}{s_j} \right) \sum_{\Delta_J} \beta_J(\Delta_J) + \sum_J \sum_{K_J} U_J(\Delta_J, K_J) \\ & \quad \times \sum_{\Delta_{J'}} U_{J'}(\Delta_{J'}, K_{J'}) \sum_{J' \supset J} \left( \prod_{j \in (J'-J)} \frac{1}{s_j} \right) \sum_{\Delta_{J'-J}} \beta_{J'}(\Delta_{J'}) \\ &= \beta_0 + \sum_{J'} \sum_{\Delta_{J'}} \beta_{J'}(\Delta_{J'}) \left\{ \prod_{j \in J'} \frac{1}{s_j} + \sum_{J \subset J'} \left( \prod_{j \in (J'-J)} \frac{1}{s_j} \right) \right. \\ & \quad \times \sum_{K_J} U_J(\Delta_J, K_J) U_{J'}(\Delta_J, K_J) \left. \right\} \\ &= \beta_0 + \sum_{J'} \beta_{J'}(\Delta_{J'}) \end{aligned} \quad (15.19)$$

(最后用了 (15.16))。从而数据的构造式 (15.5) 可以写成

$$y_\alpha = \beta_0 + \sum_J \sum_{K_J} U_J(\Delta_J(\alpha), K_J) \beta_J(K_J) + \varepsilon_\alpha \\ (\alpha = 1, \dots, N). \quad (15.20)$$

(15.5) 所包含的参数个数是  $1 + \sum_J \prod_{j \in J} s_j$ , 而 (15.20) 只包含

$$p = 1 + \sum_J \prod_{j \in J} (s_j - 1) \quad (15.21)$$



个参数,即减少了全部无用参数的个数。

欲使表現 (15.20) 的  $X$  表滿足正交性:

$$\sum_{\alpha} U_J(\Delta_J(\alpha), K_J) = 0 \quad (\text{对任意的 } J, K_J), \quad (15.22)$$

$$\sum_{\alpha} U_J(\Delta_J(\alpha), K_J) U_{J^*}(\Delta_{J^*}(\alpha), K_{J^*}) = 0$$

(除  $J = J^*, K_J = K_{J^*}$  的情形以外恒成立), (15.23)

其必要与充分条件是下列(1)和(2)同时成立。

(1) 对于任意的  $j$ , 因子  $F_j$  的各水平  $0, 1, \dots, s_j-1$  出現的次数相同(即每个恰好出現  $N/s_j$  次)。

(2) 若  $J = \{j_1, \dots, j_t\}$  与  $J' = \{j'_1, \dots, j'_v\}$  是沒有公共点的集合, 則水平矢量  $\Delta_J$  的可能值(有  $\prod_{j \in J} s_j$  組)中的任意一个与水平矢量  $\Delta_{J'}$  的可能值中的任意一个同时出現的次数恒为一定(即  $N / \prod_{j \in (J+J')} s_j$ )。

**証明** 必要性: 对于任意給定的  $j$  和  $\lambda_j$ , 在 (15.22) 中令  $J = \{j\}$ , 便可导出

$$\sum_{\alpha} \left\{ \frac{1}{s_j} + \sum_{k_j} u_j(\lambda_j(\alpha), k_j) u_j(\lambda_j, k_j) \right\} = \frac{N}{s_j}. \quad (15.24)$$

用(15.12)来解釋上式,便知滿足  $\lambda_j(\alpha) = \lambda_j$  的那些  $\alpha$  的个数是  $N/s_j$ 。这就意味着(1)。其次, 对于滿足  $J \cap J' = \emptyset$  的任意的  $J$  和  $J'$ , 以及任意的  $\Delta_J$  和  $\Delta_{J'}$ , 从 (15.22) 和 (15.23) 可以导出

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \prod_{j \in J} \left\{ \frac{1}{s_j} + \sum_{k_j} u_j(\lambda_j(\alpha), k_j) u_j(\lambda_j, k_j) \right\} \\ & \quad \times \prod_{j \in J'} \left\{ \frac{1}{s_j} + \sum_{k_j} u_j(\lambda_j(\alpha), k_j) u_j(\lambda_j, k_j) \right\} \\ & = N \prod_{j \in (J+J')} \left( \frac{1}{s_j} \right). \end{aligned} \quad (15.25)$$

用(15.15)来解釋上式,可知它意味着(2)。

充分性: 对任意的  $J = \{j_1, \dots, j_t\}$  和任意的  $K_J$ , 可以把 (15.22) 的左边改写为

$$\sum_{\alpha} U_J(\Delta_J(\alpha), K_J) = \sum_{\Delta_J} \sum_{1_J(\alpha)=1_J} U_J(\Delta_J, K_J), \quad (15.26)$$

此处  $\sum_{\Delta_J(\alpha)=\Delta_J}$  是对满足  $\Delta_J(\alpha) = \Delta_J$  的那些  $\alpha$  的求和。当  $t=1$  时, 从条件 (1) 和 (15.13) 推知 (15.26) 等于 0; 当  $t \geq 2$  时, 对  $\{j_1\}$  和  $J' = \{j_2, \dots, j_t\}$ , 利用条件 (2) 便得

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} U_J(\Delta_J(\alpha), K_J) \\ &= \sum_{\Delta_{J'}} \sum_{\lambda_{j_1}} \sum_{\substack{\Delta_{J'}(\alpha)=\Delta_{J'} \\ \lambda_{j_1}(\alpha)=\lambda_{j_1}}} U_{J'}(\Delta_{J'}, K_{J'}) u_{j_1}(\lambda_{j_1}, k_{j_1}) = 0. \end{aligned} \quad (15.27)$$

其次, 考虑 (15.23) 的左边。第一, 当  $J = J^*$ ,  $K_J \neq K_J^*$  时, 对某一个  $j_t \in J$  有  $k_{j_t} \neq k_{j_t}^*$ , 所以令  $J' = J - \{j_t\}$  便得

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} U_J(\Delta_J(\alpha), K_J) U_J(\Delta_J(\alpha), K_J^*) \\ &= \sum_{\Delta_{J'}} \sum_{\lambda_{j_t}} \sum_{\substack{\Delta_{J'}(\alpha)=\Delta_{J'} \\ \lambda_{j_t}(\alpha)=\lambda_{j_t}}} U_{J'}(\Delta_{J'}, K_{J'}) U_{J'}(\Delta_{J'}, K_{J'}^*) \\ & \quad \times u_{j_t}(\lambda_{j_t}, k_{j_t}) u_{j_t}(\lambda_{j_t}, k_{j_t}^*) = 0 \end{aligned} \quad (15.28)$$

(对  $J'$  和  $\{j_t\}$  利用条件 (2), 并利用 (15.11))。第二, 若  $J \neq J^*$ , 则  $J - JJ^*$  或  $J^* - JJ^*$  中至少有一个不是空集。不丧失普遍性, 可以假设  $J - JJ^* = J' \neq \emptyset$ 。对于  $J'$  和  $J^*$ , 利用条件 (2) 便得

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} U_J(\Delta_J(\alpha), K_J) U_{J^*}(\Delta_{J^*}(\alpha), K_{J^*}^*) \\ &= \sum_{\Delta_{J^*}} \sum_{\Delta_{J'}} \sum_{\substack{\Delta_{J^*}(\alpha)=\Delta_{J^*} \\ \Delta_{J'}(\alpha)=\Delta_{J'}}} U_{JJ^*}(\Delta_{JJ^*}, K_{JJ^*}) U_{J^*}(\Delta_{J^*}, K_{J^*}^*) \\ & \quad \times U_{J'}(\Delta_{J'}, K_{J'}) = 0 \end{aligned} \quad (15.29)$$

(因为从条件 (2) 推知, 既满足  $\Delta_{J^*}(\alpha) = \Delta_{J^*}$  又满足  $\Delta_{J'}(\alpha) = \Delta_{J'}$  的那些  $\alpha$  对所有的  $\Delta_{J^*}$  和  $\Delta_{J'}$  都有相同的个数)。証毕

满足上述条件 (1) 和 (2) 的試驗設計, 叫做正交多因子試驗設計。对于这种設計, 正規方程的系数矩陣是对角型的。对角綫上的元素, 对  $\beta_0$  是  $N$ , 对  $\beta_j(K_J)$  是

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha} \{U_J(\Delta_J(\alpha), K_J)\}^2 = \sum_{\Delta_J} \sum_{1_J(\alpha)=1_J} \{U_J(\Delta_J, K_J)\}^2 \\ &= N \prod_{j \in J} \frac{1}{s_j}. \end{aligned} \quad (15.30)$$

因此,  $\hat{\beta}_0$  的估計量由

$$\hat{b}_0 = G/N, \quad G = \sum_{\alpha} y_{\alpha} \quad (15.31)$$

給出, 而  $\hat{\beta}_J(K_J)$  的估計量則由下式給出:

$$\begin{aligned} \hat{b}_J(K_J) &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sum_{\alpha} y_{\alpha} U_J(A_J(\alpha), K_J) \\ &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sum_{A_J} U_J(A_J, K_J) B_J(A_J), \end{aligned} \quad (15.32)$$

此处

$$B_J(A_J) = \sum_{A_J(\alpha) = A_J} y_{\alpha} \quad (15.33)$$

是对滿足  $A_J(\alpha) = A_J$  的那些数据所求的和。

(15.31) 和 (15.32) 的方差分別是

$$V(\hat{b}_0) = \frac{\sigma^2}{N} \text{ 和 } V(\hat{b}_J(K_J)) = \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sigma^2, \quad (15.34)$$

而且这些估計量是相互独立的。

当分別指定各因子的水平为  $\lambda_1, \dots, \lambda_m$  时,  $y$  的数学期望是

$$\theta_M = \beta_0 + \sum_J \sum_{K_J} U_J(A_J, K_J) \beta_J(K_J), \quad (15.35)$$

它可以由

$$\hat{\theta}_M = \hat{b}_0 + \sum_J \sum_{K_J} U_J(A_J, K_J) \hat{b}_J(K_J) \quad (15.36)$$

来估計, 而它的方差是

$$\begin{aligned} V(\hat{\theta}_M) &= \frac{\sigma^2}{N} + \sum_J \sum_{K_J} \{U_J(A_J, K_J)\}^2 \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sigma^2 \\ &= \frac{\sigma^2}{N} + \sum_J \prod_{j \in J} \left( 1 - \frac{1}{s_j} \right) \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sigma^2 \\ &= \frac{1}{N} \{ 1 + \sum_J \prod_{j \in J} (s_j - 1) \} \sigma^2 \\ &= \frac{p}{N} \sigma^2, \end{aligned} \quad (15.37)$$

此处  $p$  是参数的个数 (15.21)。这个  $p$  又可以理解为: “不能忽略的因子效应的自由度之和加上 1”。

[注1] 田口玄一<sup>①</sup>猜想公式(15.37)可以适用于完全因子試驗設計(多因子試驗設計)、拉丁方以及更广范的試驗設計。当多因子試驗設計为正交設計时,此式能够适用于这种設計(以及其逆)的証明已由森口<sup>②</sup>得出。

[注2] 用(15.32)可以把(15.36)的代表項改寫为

$$\begin{aligned}
 & \sum_{K_J} U_J(1_J, K_J) b_J(K_J) \\
 &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sum_{K_J} \sum_{A'_J} U_J(A_J, K_J) U_J(A'_J, K_J) B_J(A'_J) \\
 &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sum_{A'_J} B_J(A'_J) \prod_{j \in J} \sum_{k_j} u_j(\lambda_j, k_j) u_j(\lambda'_j, k_j) \\
 &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sum_{A'_J} B_J(A'_J) \prod_{j \in J} \left( \delta_{\lambda, \lambda'_j} - \frac{1}{s_j} \right) \\
 &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sum_{A'_J} B_J(A'_J) \left\{ \sum_{J' \subseteq J} \prod_{j \in J'} \delta_{\lambda, \lambda'_j} \prod_{j \in (J-J')} \left( -\frac{1}{s_j} \right) + \prod_{j \in J'} \left( -\frac{1}{s_j} \right) \right\} \\
 &= \sum_{J' \subseteq J} \frac{(-1)^{t-t'}}{N} \left( \prod_{j \in J'} s_j \right) B_{J'}(A_{J'}) + (-1)^t \frac{G}{N}, \quad (15.38)
 \end{aligned}$$

此处  $t'$  是属于  $J'$  的标号的个数。令(15.38)为  $b_J(A_J)$ , 并設  $b_0 = b_\emptyset$ , 于是它們是未經变换的原参数組的一个最小二乘解。

例如,若  $J = \{1, 2, 3\}$ , 則(15.38)变为

$$\begin{aligned}
 b_{123}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) &= \frac{s_1 s_2 s_3}{N} B_{123}(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) - \frac{s_1 s_2}{N} B_{12}(\lambda_1, \lambda_2) \\
 &\quad - \frac{s_1 s_3}{N} B_{13}(\lambda_1, \lambda_3) - \frac{s_2 s_3}{N} B_{23}(\lambda_2, \lambda_3) \\
 &\quad + \frac{s_1}{N} B_1(\lambda_1) + \frac{s_2}{N} B_2(\lambda_2) + \frac{s_3}{N} B_3(\lambda_3) - \frac{G}{N}. \quad (15.39)
 \end{aligned}$$

例③ 在因子数  $m=5$ , 水平数  $s_1=2, s_2=2, s_3=4, s_4=2, s_5=3$  的情形,  $N=48$  个測定的正交陣列的例子列如表15.1。这个設計相当于完全因子試驗的可能組合  $2^3 \times 3 \times 4 = 96$  的  $1/2$  (即部分实施)。对于  $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4)$ , 所有可能組合  $2^3 \times 4 \times 3 = 48$  都已出現。但是,例如对  $(\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$  的 16 个可能組合中的每一个,  $(\lambda_4, \lambda_5)$  的 6 个可能組合中只有 3 个出現, 所以若在

① 田口: 品质管理, 4(1953), 436.

② Sigeiti Moriguti: Rep. Stat. Appl. Res., JUSE, 3(1954), 75~97.

③ 这个設計的实用例, 可参看 C. A. Bicking: Industrial Quality Control, 9, No. 4 (1953), 8~11 (森口: 品质管理, 岩波全书, p. 104 有介紹)。

所考慮的因子效應中也把  $F_1 \times F_2 \times F_3$  和  $F_4 \times F_5$  同時包含進去, 則對應的列不是正交的①。

表 15.1  $2^3 \times 3 \times 4$  型 ( $N=48$ )

No.	$\lambda_1$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\lambda_4$	$\lambda_5$	No.	$\lambda_7$	$\lambda_2$	$\lambda_3$	$\lambda_4$	$\lambda_5$
1	0	0	0	0	0	25	1	0	0	0	0
2	0	0	0	0	1	26	1	0	0	0	1
3	0	0	0	1	2	27	1	0	0	1	2
4	0	0	1	1	0	28	1	0	1	1	0
5	0	0	1	1	1	29	1	0	1	1	1
6	0	0	1	0	2	30	1	0	1	0	2
7	0	0	2	0	0	31	1	0	2	0	0
8	0	0	2	1	1	32	1	0	2	1	1
9	0	0	2	1	2	33	1	0	2	1	2
10	0	0	3	1	0	34	1	0	3	1	0
11	0	0	3	0	1	35	1	0	3	0	1
12	0	0	3	0	2	36	1	0	3	0	2
13	0	1	0	1	0	37	1	1	0	1	0
14	0	1	0	1	1	38	1	1	0	1	1
15	0	1	0	0	2	39	1	1	0	0	2
16	0	1	1	0	0	40	1	1	1	0	0
17	0	1	1	0	1	41	1	1	1	0	1
18	0	1	1	1	2	42	1	1	1	1	2
19	0	1	2	1	0	43	1	1	2	1	0
20	0	1	2	0	1	44	1	1	2	0	1
21	0	1	2	0	2	45	1	1	2	0	2
22	0	1	3	0	0	46	1	1	3	0	0
23	0	1	3	1	1	47	1	1	3	1	1
24	0	1	3	1	2	48	1	1	3	1	2

① 原書討論  $m=6, s_1=2, s_2=2, s_3=4, s_4=2, s_5=3, s_6=3$  的情形, 並在表 15.1 中多加上一列  $\lambda_6$ , 即相當於  $2^3 \times 3^2 \times 4=288$  的  $1/6$ 。後來有人指出  $\lambda_5$  與  $\lambda_6$  不滿足正交性。著者已在“岩波講座 現代應用數學”第 13 卷附錄(1958 年 4 月 10 日)上發表了修改意見。這裡譯者已按照著者的修改意見譯出。

$\lambda_5$  與  $\lambda_6$  不滿足正交性, 是容易驗證的。 $(\lambda_5, \lambda_6)$  的可能組合是 9 個, 但測定次數  $N=48$  不是 9 的倍數, 所以每個組合出現的次數是不可能相同的。因此, 由 § 13 正交性的條件(2), 立即推出  $\lambda_5$  與  $\lambda_6$  不滿足正交性。——譯者注

## 第4章 方差分析<sup>①</sup>

### § 16 数据的分解

考虑在一般的线性模型

$$y_{\alpha} = \sum_{i=1}^p x_{\alpha i} \beta_i + \varepsilon_{\alpha} \quad (\alpha=1, 2, \dots, N) \quad (16.1)$$

中, 具有正交性

$$\sum_{\alpha} x_{\alpha i} x_{\alpha j} = 0 \quad (i \neq j) \quad (16.2)$$

的情形(上节所述的正交多因子设计也是它的特殊情形)。

根据 § 9 的几何解释, 这时  $N$  维向量  $[x_{\alpha 1}], [x_{\alpha 2}], \dots, [x_{\alpha p}]$  是相互垂直的。因此, 只要补上既与这些向量垂直而又彼此相互垂直的  $(N-p)$  个向量  $[z_{\alpha, p+1}], \dots, [z_{\alpha N}]$ , 便可以构造一个正交系。 $[x_{\alpha i}]$  ( $i=1, \dots, p$ ) 的长度分别是

$$s_i = \sqrt{\sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2} \quad (i=1, \dots, p). \quad (16.3)$$

$[z_{\alpha j}]$  ( $j=p+1, \dots, N$ ) 的长度规定都等于 1, 也就是

$$\sum_{\alpha} z_{\alpha j}^2 = 1 \quad (j=p+1, \dots, N). \quad (16.4)$$

残差  $[\varepsilon_{\alpha}]$  因为垂直于每一个  $[x_{\alpha i}]$  ( $i=1, \dots, p$ ), 所以可以写成

$$\varepsilon_{\alpha} = \sum_j z_{\alpha j} v_j. \quad (16.5)$$

一般可以把  $N$  维空间的任意向量写成  $[x_{\alpha i}]$  ( $i=1, \dots, p$ ) 和  $[z_{\alpha j}]$  ( $j=p+1, \dots, N$ ) 的线性组合。特别是数据向量  $[y_{\alpha}]$  可以表达为

---

① Scheffé [28] 有更深入更详尽的讨论。——译者注

$$[y_\alpha] = \sum_i b_i [x_{\alpha i}] + \sum_j v_j [z_{\alpha j}], \quad (16.6)$$

此处

$$b_i = \sum_\alpha y_\alpha x_{\alpha i} / \sum_\alpha x_{\alpha i}^2 \quad (i = 1, \dots, p) \quad (16.7)$$

是  $\beta_i (i=1, \dots, p)$  的最小二乘估计, 而

$$v_j = \sum_\alpha y_\alpha z_{\alpha j} \quad (j = p+1, \dots, N) \quad (16.8)$$

是(16.5)中的系数.

对标准化正交系  $[x_{\alpha i}/s_i] (i=1, \dots, p)$  和  $[z_{\alpha j}] (j=p+1, \dots, N)$  来说, 矢量  $[y_\alpha]$  可以分解为

$$[y_\alpha] = \sum_i b_i s_i [x_{\alpha i}/s_i] + \sum_j v_j [z_{\alpha j}]. \quad (16.9)$$

这又可以看做是从原坐标  $y_1, \dots, y_N$  变换为新的坐标  $b_1 s_1, \dots, b_p s_p, v_{p+1}, \dots, v_N$ .

这个变换是正交变换. 因此可以把概率元素

$$\prod_{\alpha=1}^N \left[ \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (y_\alpha - \sum_i x_{\alpha i} \beta_i)^2 \right\} \right] dy_1 \cdots dy_N \quad (16.10)$$

变换为

$$\begin{aligned} & \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \right)^N \prod_{i=1}^p \exp \left\{ -\frac{(b_i s_i - \beta_i s_i)^2}{2\sigma^2} \right\} \prod_{j=p+1}^N \exp \left( -\frac{v_j^2}{2\sigma^2} \right) \\ & \times d(b_1 s_1) \cdots d(b_p s_p) dv_{p+1} \cdots dv_N. \end{aligned} \quad (16.11)$$

所以  $b_i s_i (i=1, \dots, p)$  与  $v_j (j=p+1, \dots, N)$  相互独立, 而且  $b_i s_i$  遵循正态分布  $N(\beta_i s_i, \sigma^2)$ ,  $v_j$  遵循正态分布  $N(0, \sigma^2)$ .

## § 17 平方和的分解

因为残差平方和

$$S_E = \sum_\alpha e_\alpha^2 = \sum_\alpha \left( \sum_j z_{\alpha j} v_j \right)^2 = \sum_j v_j^2 \quad (17.1)$$

是遵循正态分布  $N(0, \sigma^2)$  的  $(N-p)$  个独立随机变数  $v_j (j=p+1, \dots, N)$  的平方和, 所以

$$\chi^2 = S_E / \sigma^2 \quad (17.2)$$

遵循具有  $(N-p)$  个自由度的  $\chi^2$  分布

[注] 設有  $\phi$  个随机变数  $u_1, \dots, u_\phi$  独立地遵循标准正态分布  $N(0, 1)$ , 于是

$$\chi^2 = u_1^2 + \dots + u_\phi^2 \quad (17.3)$$

遵循具有  $\phi$  个自由度的  $\chi^2$  分布。它的概率元素可以计算为

$$\begin{aligned} \int \dots \int_{\chi^2 < \sum_1^{\phi} u_i^2 < \chi^2 + d(\chi^2)} \left( \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^\phi \exp \left( -\frac{1}{2} \sum_1^{\phi} u_i^2 \right) du_1 \dots du_\phi \\ = \text{const.} \exp \left( -\frac{\chi^2}{2} \right) \int \dots \int_{\chi^2 < \sum_1^{\phi} u_i^2 < \chi^2 + d(\chi^2)} du_1 \dots du_\phi \\ = \text{const.} \exp \left( -\frac{\chi^2}{2} \right) d(C\chi^\phi) \\ = \text{const.} \exp \left( -\frac{\chi^2}{2} \right) (\chi^2)^{\phi/2-1} d(\chi^2), \end{aligned} \quad (17.4)$$

此处, 最后的 const. 必须是  $(1/2)^{\phi/2} / \Gamma(\phi/2)$ , 因为关于  $\chi^2$  从 0 到  $\infty$  积分得 1.

数据的平方和  $\sum_\alpha y_\alpha^2$  对坐标变换 (16.9) (是不变式), 可以变换为

$$\sum_\alpha y_\alpha^2 = \sum_i (b_i s_i)^2 + \sum_j v_j^2. \quad (17.5)$$

其中,  $\sum_j v_j^2$  是残差平方和, 这在上面已经讨论过。第一项  $\sum_i (b_i s_i)^2$  含有参数的影响, 所以  $\sum_i (b_i s_i)^2 / \sigma^2$  遵循具有  $p$  个自由度和非中心参数  $\delta = \left\{ \sum_i (\beta_i s_i)^2 / \sigma^2 \right\}^{1/2}$  的非中心  $\chi^2$  分布。又若把它分解为若干个分量时, 包含着  $i=1, 2, \dots, p$  中的某  $q$  个分量的自由度则为  $q$ , 而且  $\sum_i$  的  $i$  只能在  $q$  个数上变动, 因而上面的结果仍然成立。

[注] 設有  $\phi$  个随机变数  $u_1, \dots, u_\phi$  独立地遵循标准正态分布  $N(0, 1)$ , 于是

$$\chi'^2 = (u_1 + \delta_1)^2 + \dots + (u_\phi + \delta_\phi)^2 \quad (17.6)$$



遵循具有  $\phi$  个自由度和非中心参数

$$\delta = \sqrt{\delta_1^2 + \cdots + \delta_s^2} \quad (17.7)$$

的非中心  $\chi^2$  分布。

因为  $b_i s_i$  的数学期望是  $\beta_i s_i$ , 方差是  $\sigma^2$ , 所以

$$\begin{aligned} E\{(b_i s_i)^2\} &= V(b_i s_i) + \{E(b_i s_i)\}^2 \\ &= \sigma^2 + (\beta_i s_i)^2. \end{aligned} \quad (17.8)$$

因此, 令  $\sum_i^q$  为  $i=1, \dots, p$  中的任意  $q$  个的和, 便有

$$E\left\{\sum_i^q (b_i s_i)^2\right\} = q\sigma^2 + \sum_i^q (\beta_i s_i)^2. \quad (17.9)$$

**例 1** 在  $s^n$  型正交阵列的情形中, 对应于 (13.5) 的数据的分解是

$$y_\alpha = \bar{m} + \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^{s-1} u_{ik} b_{ik} + e_\alpha \quad (\alpha=1, 2, \dots, N), \quad (17.10)$$

而相应的数据平方和的分解是

$$\sum_\alpha y_\alpha^2 = N\bar{m}^2 + \sum_{i=1}^m \sum_{k=1}^{s-1} \frac{N}{s} b_{ik}^2 + \sum_\alpha e_\alpha^2. \quad (17.11)$$

参数的个数是  $p=1+m(s-1)$ , 残差平方和  $S_E = \sum_\alpha e_\alpha^2$  是这样的分布: 它可表示为具有  $\phi=(N-p)$  个自由度的  $\chi^2$  与  $\sigma^2$  的乘积。它的数学期望是  $(N-p)\sigma^2$ 。把其余部分分解为下列  $(1+m)$  个分量:

$$S_M = N\bar{m}^2, \quad (17.12)$$

$$S_i = \sum_{k=1}^{s-1} \frac{N}{s} b_{ik}^2 \quad (i=1, \dots, m), \quad (17.13)$$

于是  $S_M/\sigma^2$  遵循具有 1 个自由度和非中心参数  $\delta = \sqrt{N} \bar{\mu}$  的非中心  $\chi^2$  分布; 而  $S_i/\sigma^2$  遵循具有  $(s-1)$  个自由度和非中心参数

$$\delta_i = (N/s)^{\frac{1}{2}} \left( \sum_k \beta_{ik}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (17.14)$$

的非中心  $\chi^2$  分布。它们的数学期望是

$$\left. \begin{aligned} E(S_M) &= \sigma^2 + N\mu^2, \\ E(S_i) &= (s-1)\sigma^2 + (N/s) \sum_k \beta_{ik}^2. \end{aligned} \right\} \quad (17.15)$$

这时,若定义“无偏方差”为

$$\left. \begin{aligned} V_E &= S_E / (N-p), \\ V_i &= S_i / (s-1) \quad (i=1, \dots, m), \\ V_M &= S_M / 1, \end{aligned} \right\} \quad (17.16)$$

则有

$$\left. \begin{aligned} E(V_E) &= \sigma^2, \\ E(V_i) &= \sigma^2 + (N/s) (\sum_k \beta_{ik}^2) / (s-1) \quad (i=1, \dots, m), \\ E(V_M) &= \sigma^2 + N\mu^2. \end{aligned} \right\} \quad (17.17)$$

通常把它们列为“方差分析表”如表 17.1。

表 17.1 方差分析表( $s^m$  型正交阵列)

变 因	平 方 和	自 由 度	无偏方差	无偏方差的数学期望
平 均	$S_M$	1	$V_M$	$\sigma^2 + N\mu^2$
因 子 $F_1$	$S_1$	$s-1$	$V_1$	$\sigma^2 + (N/s)\sigma_1^2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
因 子 $F_m$	$S_m$	$s-1$	$V_m$	$\sigma^2 + (N/s)\sigma_m^2$
残 差	$S_E$	$N-p$	$V_E$	$\sigma^2$
和	$\sum_k y_k^2$	$N$	—	—

表中  $\sigma_i^2$  叫做第  $i$  因子的“方差分量”,其定义是

$$\sigma_i^2 := (\sum_k \beta_{ik}^2) / (s-1) \quad (i=1, \dots, m). \quad (17.18)$$

若以原参数(参看(13.1))来表达,就是

$$\sigma_i^2 = \{ \sum_k \beta_{ik}^2 - (\sum_k \beta_{ik})^2 / s \} / (s-1) \quad (i=1, \dots, m). \quad (17.19)$$

在表 17.1 中,方差分量的系数( $N/s$ )等于第  $i$  因子的各水平的重复次数。

[注 1] 平方和分量的实际计算,按照 § 13 的记号如下地进行,颇为方便。

$$\left. \begin{aligned} S_M &= G^2/N, \\ S_i &= (\sum_k B_{ik}^2) / (N/s_i) - (G^2/N) \quad (i=1, \dots, m), \\ S_E &= \sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 - \sum_i (\sum_k B_{ik}^2) / (N/s_i) + (m-1) (G^2/N). \end{aligned} \right\} \quad (17.20)$$

[注 2] 当交互作用存在时, 按照 § 14 的方法处理, 则上面的讨论仍然成立。但是, 例如对表 14.1 的情形, 一般是把  $S_3$  和  $S_4$  (通常记作  $S_{(AB)}$  和  $S_{(AB^2)}$ ) 凑在一起记作  $S_{A \times B}$ , 并把它看做具有 4 个自由度的分量。

**例 2** 在正交多因子设计 (§ 15) 中, 对应于 (15.20) 的数据的分解是

$$y_{\alpha} = \dot{b}_0 + \sum_J \sum_{K_J} U_J(A_J(\alpha), K_J) \dot{b}_J(K_J) + e_{\alpha} \quad (\alpha=1, \dots, N), \quad (17.21)$$

平方和的分解是

$$\sum_{\alpha} y_{\alpha}^2 = N \dot{b}_0^2 + \sum_J \sum_{K_J} \left( N \prod_{j \in J} \frac{1}{s_j} \right) \dot{b}_J(K_J)^2 + \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2. \quad (17.22)$$

平方和分量是:

$$\text{平均:} \quad S_M = N \dot{b}_0^2, \quad (17.23)$$

$$\text{因子效应 } J: \quad S_J = \left( N \prod_{j \in J} \frac{1}{s_j} \right) \sum_{K_J} \dot{b}_J(K_J)^2 \quad (J \in \mathfrak{S}), \quad (17.24)$$

$$\text{残差:} \quad S_E = \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2. \quad (17.25)$$

它们的自由度分别是:

$$\left. \begin{aligned} \text{平均:} \quad & \phi_M = 1, \\ \text{因子效应 } J: \quad & \phi_J = \prod_{j \in J} (s_j - 1), \\ \text{残差:} \quad & \phi_E = N - p = N - 1 - \sum_J \phi_J, \end{aligned} \right\} \quad (17.26)$$

于是得方差分析表如表 17.2。

表中, 对因子效应  $J$ , 我们用

$$n_J = N \prod_{j \in J} \frac{1}{s_j} \quad (17.27)$$

表示各水平组合  $A_J$  的重复次数, 并定义了“方差分量”为

$$\sigma_J^2 = \sum_{K_J} \beta_J (K_J)^2 / \phi_J. \quad (17.28)$$

表 17.2 方差分析表(正交多因子設計)

变 因	平 方 和	自 由 度	无偏方差	无偏方差的数学期望
平 均	$S_M$	1	$V_M$	$\sigma^2 + N\beta_0^2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$J$	$S_J$	$\phi_J$	$V_J$	$\sigma^2 + n_J \sigma_J^2$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
残 差	$S_E$	$\phi_E$	$V_E$	$\sigma^2$
和	$\sum_{\alpha} n_{\alpha}^2$	$N$	—	—

[注] 把(15.32)代入(17.24), 并如(15.38)那样计算, 便得

$$\begin{aligned}
 S_J &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sum_{K_J} \left\{ \sum_{J_J} U_J(A_J, K_J) B_J(A_J) \right\}^2 \\
 &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sum_{A_J} \sum_{A'_J} \sum_{K_J} U_J(A_J, K_J) U_J(A'_J, K_J) B_J(A_J) B_J(A'_J) \\
 &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \sum_{A_J} \sum_{A'_J} B_J(A_J) B_J(A'_J) \prod_{j \in J} \left( \delta_{\lambda_j \lambda'_j} - \frac{1}{s_j} \right) \\
 &= \left( \frac{1}{N} \prod_{j \in J} s_j \right) \left\{ \sum_{J \subset J'} \sum_{A_{J'}} B_{J'}(A_{J'})^2 \prod_{j \in (J-J')} \left( -\frac{1}{s_j} \right) + G^2 \prod_{j \in J} \left( -\frac{1}{s_j} \right) \right\} \\
 &= \sum_{J' \subset J} \frac{(-1)^{t-t'}}{N} \left( \prod_{j \in J'} s_j \right) \sum_{A_{J'}} B_{J'}(A_{J'})^2 + (-1)^t \frac{G^2}{N} \\
 &= \sum_{J' \subset J} \frac{(-1)^{t-t'}}{n_{J'}} \sum_{A_{J'}} B_{J'}(A_{J'})^2 + (-1)^t \frac{G^2}{N}. \quad (17.29)
 \end{aligned}$$

这样, 当进行实际计算时, 预先求  $G^2/N$  和  $\sum_{A_J} B_J(A_J)^2/n_J$  ( $J \in \mathfrak{J}$ ), 然后再根据(17.29)作加或减, 就可以求得平方和分量。例如, 若  $J = \{1, 2\}$ , 则可从

$$S_{12} = \frac{1}{n_{12}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} B_{12}(\lambda_1, \lambda_2)^2 - \frac{1}{n_1} \sum_{\lambda_1} B_1(\lambda_1)^2 - \frac{1}{n_2} \sum_{\lambda_2} B_2(\lambda_2)^2 + \frac{1}{N} G^2 \quad (17.30)$$

来计算。

**例 3** 利用正交多项式配二次式 (§ 10) 的方差分析表如表 17.3。

这时, “无偏方差的数学期望”这一栏与其说是用来估计  $\beta_i^2$ , 毋宁说是用来读取  $\beta_i$  的估计量  $b_i$  的方差  $\sigma^2/N_i$  (以及为了读取  $S_i$  的数值)。

表 17.3 方差分析表(正交多項式)

变 因	平 方 和	自 由 度	无偏方差	无偏方差的数学期望
平 均	$(\sum y)^2/n$	1	$V_M$	$\sigma^2 + n\beta_0^2$
一次效应	$(\sum yX_1)^2/S_1$	1	$V_1$	$\sigma^2 + S_1\beta_1^2$
二次效应	$(\sum yX_2)^2/S_2$	1	$V_2$	$\sigma^2 + S_2\beta_2^2$
残 差	$S_E$	$n-3$	$V_E$	$\sigma^2$
和	$\sum y^2$	$n$	—	—

§ 18  $F$  檢 驗

如上节所述, 設数据的平方和可以分解为殘差平方和  $S_E$  以及其他的几个分量。除殘差平方和以外, 其他分量都受到某些“效应”的影响。令其中的一个为  $S_1$ , 那末依照(17.9)記号的意义, 可以把它写成

$$S_1 = \sum_{i=1}^{\phi_1} (b_i s_i)^2. \quad (18.1)$$

于是  $S_1/\sigma^2$  遵循具有  $\phi_1$  个自由度和非中心参数

$$\delta_1 = \left\{ \sum_{i=1}^{\phi_1} (\beta_i s_i)^2 / \sigma^2 \right\}^{1/2} \quad (18.2)$$

的非中心  $\chi^2$  分布。另一方面,  $S_E/\sigma^2$  遵循具有  $\phi_E = (N-p)$  个自由度的  $\chi^2$  分布。这样,

$$F = \frac{S_1/\phi_1}{S_E/\phi_E} \quad (18.3)$$

遵循具有  $\phi_1$  和  $\phi_E$  个自由度以及非中心参数  $\delta_1$  的非中心  $F$  分布(注1)。

如果  $\delta_1 = 0$ , 換句話說, 如果(18.2)所包含的效应  $\beta_i$  实际上不存在, 那末(18.3)遵循具有  $\phi_1$  和  $\phi_E$  个自由度的  $F$  分布。令这个  $F$  分布的上側 5% 的点为  $F_{0.05}$ , 于是当  $\delta_1 = 0$  时, 有

$$\Pr\{F > F_{0.05}\} = 0.05. \quad (18.4)$$

若  $\delta_1 > 0$ , 則  $F$  的分布偏右,  $\delta_1$  越大就越偏右, 因而

$$P = \Pr\{F > F_{0.05}\} \quad (18.5)$$

就越来越大(图 18.1)。这就是說, 事件  $F > F_{0.05}$  当  $\delta_1 = 0$  时是罕見的, 但是随着  $\delta_1$  的增大而越来越容易出現。假如从观测值算出的  $F$  大于  $F_{0.05}$  时判定  $\delta_1 > 0$ , 那末当  $\delta_1 = 0$  时錯誤地判定为  $\delta_1 > 0$  的概率(冒險率, 显著性水平)是 5%, 而当  $\delta_1 > 0$  时判定为  $\delta_1 > 0$  的概率(檢驗功效), 如图 18.2 所示, 随着  $\delta_1$  的增大而增大, 甚至几乎达到 100%。这就是  $F$  檢驗。

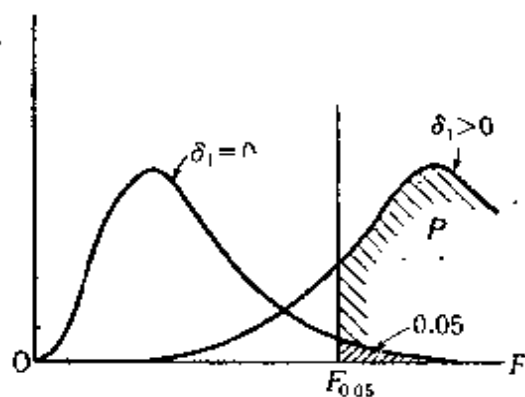


图 18.1  $F$  檢驗

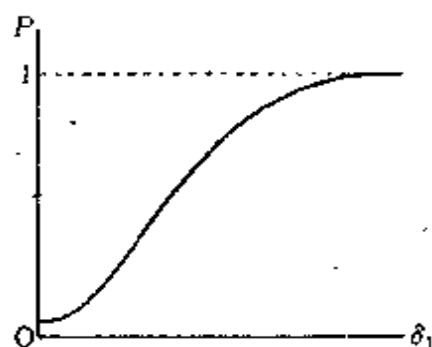


图 18.2 檢驗功效曲綫

[注 1] 令  $x_1^2$  和  $x_2^2$  为独立, 而且  $x_1^2$  遵循具有  $\phi_1$  个自由度和非中心参数  $\delta_1$  的非中心  $\chi^2$  分布,  $x_2^2$  遵循具有  $\phi_2$  个自由度的  $\chi^2$  分布, 于是  $(x_1^2/\phi_1)/(x_2^2/\phi_2)$  遵循具有  $\phi_1$  和  $\phi_2$  个自由度以及非中心参数  $\delta_1$  的非中心  $F$  分布。特别当  $\delta_1 = 0$  时就是普通的  $F$  分布。

[注 2]  $F$  分布的上側概率  $\alpha$  的点記作  $F_{\alpha}(\phi_1, \phi_2)$  或者  $F_{\alpha_2}^{\phi_1}(\alpha)$ .  $F_{\alpha}(\phi_1, \phi_2)$  对于  $\alpha = 0.005, 0.01, 0.025, 0.05, 0.10, 0.25, 0.50$  的表 ( $F$  表) 已經造出, 特别是 0.01 和 0.05 的表經常被利用。

[注 3] 对于种种的  $\phi_1$  和  $\phi_2$ , 使 (18.5) 的  $P$  等于 0.90 的那些  $\delta_1$  的值已被造成了表①。

① Shoji Ura: Rep. Stat. Appl. Res., JUSE, 3 (1954), 23~28; 日本科学技术联盟, 品质管理用数值表 B, 4~5.

## 第5章 裂区試驗

### § 19 分枝設計

到此为止,所討論的模型只包含形如(1.1)的“誤差” $\varepsilon_\alpha$ 。本章將討論包含多級誤差的模型。作为它的最簡單情形的例子,我們首先考虑

$$\begin{aligned} y_{\alpha\beta\gamma} &= \mu + \varepsilon_\alpha + \varepsilon_{\alpha\beta} + \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \quad (\alpha=1, \dots, n_1; \\ \beta &= 1, \dots, n_2; \\ \gamma &= 1, \dots, n_3). \end{aligned} \quad (19.1)$$

这是三級分枝設計,数据总共有  $N = n_1 n_2 n_3$  个(图 19.1)。每級都包含“誤差”,我們假設这些誤差相互独立,并設第一級誤差  $\varepsilon_\alpha$  遵循  $N(0, \sigma_{E1}^2)$ , 第二級誤差  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  遵循  $N(0, \sigma_{E2}^2)$ , 第三級誤差  $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$  遵循  $N(0, \sigma_{E3}^2)$ 。順着分枝倒推,把相当于結节的平均記为

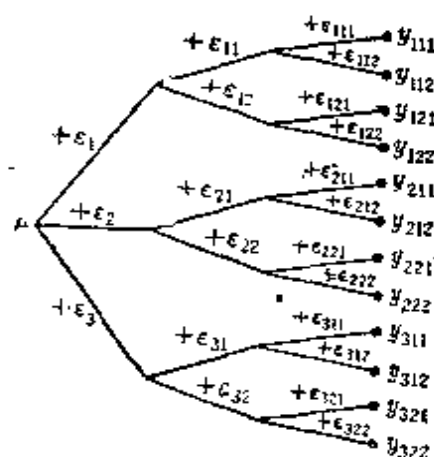


图 19.1 三級設計  
( $n_1=3, n_2=2, n_3=2$ )

$$\left. \begin{aligned} \bar{y}_{\alpha\beta\cdot} &= \frac{1}{n_3} \sum_{\gamma=1}^{n_3} y_{\alpha\beta\gamma}, \\ \bar{y}_{\alpha\cdot\cdot} &= \frac{1}{n_2} \sum_{\beta=1}^{n_2} \bar{y}_{\alpha\beta\cdot}, \\ \bar{y}_{\cdot\cdot\cdot} &= \frac{1}{n_1} \sum_{\alpha=1}^{n_1} \bar{y}_{\alpha\cdot\cdot} \end{aligned} \right\} \quad (19.2)$$

此处足碼中的  $\cdot$  表示对原足碼的平均。从(19.1)来考察(19.2)的各个平均的构造,便知

$$\left. \begin{aligned} \bar{y}_{\alpha\beta} &= \mu + \varepsilon_{\alpha} + \varepsilon_{\alpha\beta} + \bar{\varepsilon}_{\alpha\beta}, \\ \bar{y}_{\alpha..} &= \mu + \varepsilon_{\alpha} + \bar{\varepsilon}_{\alpha.} + \bar{\varepsilon}_{\alpha..}, \\ \bar{y}_{...} &= \mu + \bar{\varepsilon}_{.} + \bar{\varepsilon}_{..} + \bar{\varepsilon}_{...} \end{aligned} \right\} \quad (19.3)$$

这样,定义

$$\left. \begin{aligned} e_{\alpha\beta\gamma} &\equiv y_{\alpha\beta\gamma} - \bar{y}_{\alpha\beta} = \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} - \bar{\varepsilon}_{\alpha\beta}, \\ e_{\alpha\beta} &\equiv \bar{y}_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha..} = (\varepsilon_{\alpha\beta} - \bar{\varepsilon}_{\alpha.}) + (\bar{\varepsilon}_{\alpha\beta} - \bar{\varepsilon}_{\alpha..}), \\ e_{\alpha} &\equiv \bar{y}_{\alpha..} - \bar{y}_{...} = (\varepsilon_{\alpha.} - \bar{\varepsilon}_{.}) + (\bar{\varepsilon}_{\alpha.} - \bar{\varepsilon}_{..}) + (\bar{\varepsilon}_{\alpha..} - \bar{\varepsilon}_{...}), \\ m &\equiv \bar{y}_{...} = \mu + \bar{\varepsilon}_{.} + \bar{\varepsilon}_{..} + \bar{\varepsilon}_{...}, \end{aligned} \right\} \quad (19.4)$$

便有对应于(19.1)的数据分解式

$$y_{\alpha\beta\gamma} = m + e_{\alpha} + e_{\alpha\beta} + e_{\alpha\beta\gamma}. \quad (19.5)$$

上式右边各项的数学期望和方差是

$$E(m) = \mu, \quad E(e_{\alpha}) = 0, \quad E(e_{\alpha\beta}) = 0, \quad E(e_{\alpha\beta\gamma}) = 0, \quad (19.6)$$

$$\left. \begin{aligned} V(m) &= \frac{\sigma_{E1}^2}{n_1} + \frac{\sigma_{E2}^2}{n_1 n_2} + \frac{\sigma_{E3}^2}{n_1 n_2 n_3}, \\ V(e_{\alpha}) &= \frac{n_1 - 1}{n_1} \sigma_{E1}^2 + \frac{n_1 - 1}{n_1} \frac{\sigma_{E2}^2}{n_2} + \frac{n_1 - 1}{n_1} \frac{\sigma_{E3}^2}{n_2 n_3}, \\ V(e_{\alpha\beta}) &= \frac{n_2 - 1}{n_2} \sigma_{E2}^2 + \frac{n_2 - 1}{n_2} \frac{\sigma_{E3}^2}{n_3}, \\ V(e_{\alpha\beta\gamma}) &= \frac{n_3 - 1}{n_3} \sigma_{E3}^2. \end{aligned} \right\} \quad (19.7)$$

而且各项是互不相关的(这些性质,反复利用§3中例1的那些性质便可导出)。

取(19.5)的平方,并对所有的数据求和,使得

$$\sum_{\alpha\beta\gamma} y_{\alpha\beta\gamma}^2 = n_1 n_2 n_3 m^2 + n_2 n_3 \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2 + n_3 \sum_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta}^2 + \sum_{\alpha\beta\gamma} e_{\alpha\beta\gamma}^2. \quad (19.8)$$

因为,如

$$2n_2 \sum_{\alpha} \sum_{\beta} e_{\alpha} e_{\alpha\beta} = 2n_3 \sum_{\alpha} e_{\alpha} \sum_{\beta} (y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha..}) = 0$$

那样,所有的乘积项都消掉了。把(19.8)的右边各项分别记作  $S_M$ ,  $S_{E1}$ ,  $S_{E2}$  和  $S_{E3}$ , 正确地写就是



$$\left. \begin{aligned} S_M &= n_1 n_2 n_3 m^2 \cdots N \bar{y}^2 \cdots, \\ S_{E1} &= n_2 n_3 \sum_{\alpha} (\bar{y}_{\alpha \cdots} - \bar{y} \cdots)^2, \\ S_{E2} &= n_3 \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (\bar{y}_{\alpha \beta \cdot} - \bar{y}_{\alpha \cdots})^2, \\ S_{E3} &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} (y_{\alpha \beta \gamma} - \bar{y}_{\alpha \beta \cdot})^2. \end{aligned} \right\} \quad (19.9)$$

利用(19.6)和(19.7)便可算出它們的数学期望为

$$\left. \begin{aligned} E(S_M) &= N \mu^2 + n_2 n_3 \sigma_{E1}^2 + n_3 \sigma_{E2}^2 + \sigma_{E3}^2, \\ E(S_{E1}) &= (n_1 - 1) (n_2 n_3 \sigma_{E1}^2 + n_3 \sigma_{E2}^2 + \sigma_{E3}^2), \\ E(S_{E2}) &= n_1 (n_2 - 1) (n_3 \sigma_{E2}^2 + \sigma_{E3}^2), \\ E(S_{E3}) &= n_1 n_2 (n_3 - 1) \sigma_{E3}^2. \end{aligned} \right\} \quad (19.10)$$

“自由度”分别是(注2)

$$\phi_M = 1, \phi_{E1} = n_1 - 1, \phi_{E2} = n_1 (n_2 - 1), \phi_{E3} = n_1 n_2 (n_3 - 1), \quad (19.11)$$

于是得方差分析表如表 19.1。

表 19.1 方差分析表(三級設計)

变 因	平方和	自由度	无偏方差	无偏方差的数学期望
平 均	$S_M$	1	$V_M$	$\sigma_{E3}^2 + n_3 \sigma_{E2}^2 + n_2 n_3 \sigma_{E1}^2 + N \mu^2$
誤差 1	$S_{E1}$	$n_1 - 1$	$V_{E1}$	$\sigma_{E3}^2 + n_3 \sigma_{E2}^2 + n_2 n_3 \sigma_{E1}^2$
誤差 2	$S_{E2}$	$n_1 (n_2 - 1)$	$V_{E2}$	$\sigma_{E3}^2 + n_3 \sigma_{E2}^2$
誤差 3	$S_{E3}$	$n_1 n_2 (n_3 - 1)$	$V_{E3}$	$\sigma_{E3}^2$
和	$\sum y^2$	$N$	—	—

因此各級的誤差方差可以估計为

$$\left. \begin{aligned} \hat{\sigma}_{E1}^2 &= (V_{E1} - V_{E2}) / n_2 n_3, \\ \hat{\sigma}_{E2}^2 &= (V_{E2} - V_{E3}) / n_3, \\ \hat{\sigma}_{E3}^2 &= V_{E3}. \end{aligned} \right\} \quad (19.12)$$

$\mu$  的估計量  $m = \bar{y} \cdots$  的方差已在(19.7)的第一式看到,而在表 19.1 中,它則等于用  $\mu^2$  的系数  $N$  去除  $V_M$  的数学期望中不包含  $\mu$  的那些部分。于是可以用  $V_{E1}/N$  来估計它。

[注1] 当进行平方和分量的实际数值計算时,最好是先求出小和、中和、大和:

$$Y_{\alpha\beta\gamma} = \sum_{\gamma} y_{\alpha\beta\gamma}, \quad Y_{\alpha..} = \sum_{\beta} Y_{\alpha\beta.}, \quad Y_{...} = \sum_{\alpha} Y_{\alpha..}, \quad (19.13)$$

然后再利用公式:

$$\left. \begin{aligned} S_M &= Y_{...}^2 / N, \\ S_{E1} &= \sum_{\alpha} Y_{\alpha..}^2 / n_2 n_3 - Y_{...}^2 / N, \\ S_{E2} &= \sum_{\alpha\beta} Y_{\alpha\beta.}^2 / n_3 - \sum_{\alpha} Y_{\alpha..}^2 / n_2 n_3, \\ S_{E3} &= \sum_{\alpha\beta\gamma} y_{\alpha\beta\gamma}^2 - \sum_{\alpha\beta} Y_{\alpha\beta.}^2 / n_3. \end{aligned} \right\} \quad (19.14)$$

[注2] 例如,  $S_{E2}$  的自由度  $\phi_{E2}$  是这样計算的: 由于(19.9)的第三式包含的  $(\bar{y}_{\alpha\beta.} - \bar{y}_{\alpha..})$  总共有  $n_1 n_2$  个, 而且恒满足  $n_1$  个关系

$$\sum_{\beta} (\bar{y}_{\alpha\beta.} - \bar{y}_{\alpha..}) = 0 \quad (\alpha = 1, \dots, n_1), \quad (19.15)$$

因此可以由  $\phi_{E2} = n_1 n_2 - n_1 = n_1 (n_2 - 1)$  来計算。  $\phi_{E1}$  和  $\phi_{E3}$  也是如此。

## § 20 正交裂区試驗

考虑在上节的模型(19.1)中再加上各种因子效应的模型。这种模型的数据通常在所謂“混杂法”的試驗設計中得到。其中的特殊情形有人叫做“裂区法”, 但如

$$y_{\alpha\beta} = \mu + \left( \sum_{i=1}^{p_1} x_{\alpha i} \beta_i + \varepsilon_{\alpha} \right) + \left( \sum_{j=1}^{p_2} x_{\alpha\beta j} \gamma_j + \varepsilon_{\alpha\beta} \right) \quad (20.1)$$

$$(\alpha = 1, \dots, n_1; \beta = 1, \dots, n_2)$$

所示, 这里更广泛地把分枝的各級含有参数效应的构造模型叫做“裂区模型”。特別把依

$$\left. \begin{aligned} \sum_{\alpha} \hat{x}_{\alpha i} &= 0, \\ \sum_{\alpha} x_{\alpha i} x_{\alpha i'} &= 0 \quad (i \neq i'), \\ \sum_{\beta} x_{\alpha\beta j} &= 0, \\ \sum_{\beta} x_{\alpha\beta j} x_{\alpha\beta j'} &= 0 \quad (j \neq j') \end{aligned} \right\} \quad (20.2)$$

意义的正交設計叫做正交裂区試驗設計。关于誤差,如上节一样,假設  $\varepsilon_\alpha$  是遵循  $N(0, \sigma_{E1}^2)$  的独立随机变数,  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  是遵循  $N(0, \sigma_{E2}^2)$  的独立随机变数。

例1 图 20.1 所示的例子是在构造式(20.1)中令  $n_1=4, n_2=2, p_1=1, p_2=2$  的情形,其系数  $x_{\alpha i}, x_{\alpha\beta j}$  如表 20.1 所示。

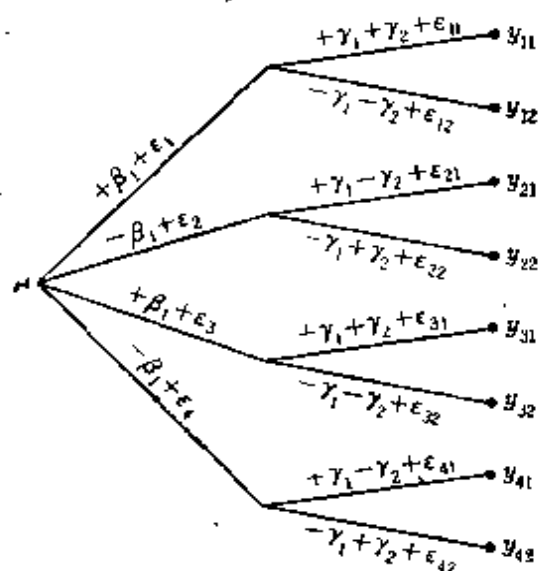


表 20.1 构造表

$\alpha$	$x_{\alpha 1}$	$\beta$	$x_{\alpha\beta 1}$	$x_{\alpha\beta 2}$
1	+1	1	+1	+1
		2	-1	-1
2	-1	1	+1	-1
		2	-1	+1
3	+1	1	+1	+1
		2	-1	-1
4	-1	1	+1	-1
		2	-1	+1

图 20.1 裂区試驗的例子

从表中立刻看出,这些系数满足依(20.2)意义的正交性。

[注] 在这个例子中,  $\mu$  是“一般平均”。取二水平的因子 2 个,若计划安排因子組合使得它們的主要效应分别为  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  (参看 § 12), 則  $\beta_1$  是交互作用。这时,若把  $\alpha$  看做“区組号数”, 則交互作用与区組效应  $\varepsilon_\alpha$  混杂(“混杂法”)①。

另一方面,若設計使这两个因子的主要效应分别为  $\beta_1$  和  $\gamma_1$ , 則  $\gamma_2$  是交互作用。这时一个主要效应与区組混杂(“裂区法”)②。

为了分析模型(20.1)的正交裂区試驗数据,首先要进行类似于上节分枝試驗的分析。也就是說,考虑平均值

$$\left. \begin{aligned} \bar{y}_{\alpha\cdot} &= \mu + \sum_i x_{\alpha i} \beta_i + \varepsilon_\alpha + \bar{\varepsilon}_{\alpha\cdot}, \\ \bar{y}_{\cdot\cdot} &= \mu + \bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot} + \bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot} \end{aligned} \right\} \quad (20.3)$$

① 見 § 14 譯者注。詳見 Cochran-Cox [4], Kempthorne [9], 北川 [21, II] 和增山 [22]。——譯者注

② 詳見 Cochran-Cox [4] 和 Kempthorne [9]。——譯者注

(利用了(20.2)的第一式和第三式), 并把数据分解为

$$y_{\alpha\beta} = \bar{y}_{..} + (\bar{y}_{\alpha.} - \bar{y}_{..}) + (y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha.}), \quad (20.4)$$

取上式的平方, 然后求和使得

$$\sum_{\alpha\beta} y_{\alpha\beta}^2 = n_1 n_2 \bar{y}_{..}^2 + n_2 \sum_{\alpha} (\bar{y}_{\alpha.} - \bar{y}_{..})^2 + \sum_{\alpha\beta} (y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha.})^2, \quad (20.5)$$

从此再去分析各级的平方和分量。因为对  $\bar{y}_{..}$  不能再作进一步的分析, 故可以置之不动。对于  $\bar{y}_{\alpha.}$ , 由(20.3)可知, 这是第4章所讨论的单纯正交设计的数据, 所以  $\beta_i$  的估计值由

$$b_i = \sum_{\alpha} x_{\alpha i} \bar{y}_{\alpha.} / \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2 \quad (i=1, \dots, p) \quad (20.6)$$

给出。利用上式可以把  $\bar{y}_{\alpha.}$  分解为

$$\bar{y}_{\alpha.} = \bar{y}_{..} + \sum_i x_{\alpha i} b_i + e_{\alpha}, \quad (20.7)$$

于是取其平方和使得

$$\sum_{\alpha} \bar{y}_{\alpha.}^2 = n_1 \bar{y}_{..}^2 + \sum_i \left( \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2 \right) b_i^2 + \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2. \quad (20.8)$$

从上式左边减去右边第一项就是  $\sum_{\alpha} (\bar{y}_{\alpha.} - \bar{y}_{..})^2$ , 所以

$$n_2 \sum_{\alpha} (\bar{y}_{\alpha.} - \bar{y}_{..})^2 = n_2 \sum_i \left( \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2 \right) b_i^2 + n_2 \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2. \quad (20.9)$$

因为(20.3)的误差项的方差是

$$V(\varepsilon_{\alpha} + \bar{\varepsilon}_{\alpha.}) = \sigma_{E1}^2 + \sigma_{E2}^2 / n_2, \quad (20.10)$$

所以  $\sum_{\alpha} e_{\alpha}^2$  的数学期望是  $(n_1 - 1 - p_1) (\sigma_{E1}^2 + \sigma_{E2}^2 / n_2)$ , 从而

$$S_{E1} = n_2 \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2 \quad (20.11)$$

的数学期望是

$$E(S_{E1}) = (n_1 - 1 - p_1) (\sigma_{E2}^2 + n_2 \sigma_{E1}^2), \quad (20.12)$$

至于第二阶段的分析, 从(20.1)减去(20.3)使得

$$y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha.} = \sum_j x_{\alpha\beta j} \gamma_j + \varepsilon_{\alpha\beta} - \bar{\varepsilon}_{\alpha.}, \quad (20.13)$$

于是看来可以考虑形如

$$y_{\alpha\beta} = \mu_{\alpha} + \sum_j x_{\alpha\beta j} \gamma_j + \varepsilon_{\alpha\beta} \quad (20.14)$$

的模型。在(20.14)中,  $\mu_{\alpha}$  和  $\gamma_j$  的最小二乘估计分别由

$$m_{\alpha} = \bar{y}_{\alpha.}, \quad (20.15)$$

$$c_j = \sum_{\alpha\beta} x_{\alpha\beta j} y_{\alpha\beta} / \sum_{\alpha\beta} x_{\alpha\beta j}^2 \quad (20.16)$$

給出,因而数据的分解式变成

$$y_{\alpha\beta} = \bar{y}_{\alpha.} + \sum_j x_{\alpha\beta j} c_j + e_{\alpha\beta}, \quad (20.17)$$

平方和的分解变成

$$\sum_{\alpha\beta} y_{\alpha\beta}^2 = n_2 \sum_{\alpha} \bar{y}_{\alpha.}^2 + \sum_j \left( \sum_{\alpha\beta} x_{\alpha\beta j}^2 \right) c_j^2 + \sum_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta}^2. \quad (20.18)$$

而且得到

$$S_{F2} = \sum_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta}^2 \quad (20.19)$$

的数学期望为

$$E(S_{E2}) = \{n_1(n_2-1) - p_2\} \sigma_{E2}^2, \quad (20.20)$$

从 (20.18) 的左边减去右边第一項就是  $\sum_{\alpha\beta} (y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha.})^2$ , 所以可得分解

$$\sum_{\alpha\beta} (y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha.})^2 = \sum_j \left( \sum_{\alpha\beta} x_{\alpha\beta j}^2 \right) c_j^2 + \sum_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta}^2. \quad (20.21)$$

以上述作为依据, 并参看 § 17, 便可造出方差分析表如表 20.2。

表 20.2 方差分析表(裂区試驗)

变 因	平 方 和	自 由 度	无偏方差	无偏方差的数学期望
平 均	$S_M = n_1 n_2 \bar{y}_{..}^2$	1	$V_M$	$\sigma_{E2}^2 + n_2 \sigma_{E1}^2 + n_1 n_2 \mu^2$
第 1 級	$S_1 = n_2 \sum_{\alpha} (\bar{y}_{\alpha.} - \bar{y}_{..})^2$	$n_1 - 1$	—	—
$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ \beta_i \\ \vdots \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ S_{B_i} = n_2 \left( \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2 \right) b_i^2 \\ \vdots \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ V_{B_i} \\ \vdots \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ \sigma_{E2}^2 + n_2 \sigma_{E1}^2 + \left( \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2 \right) \beta_i^2 \\ \vdots \end{array} \right.$
誤差 1	$S_{E1} = n_2 \sum_{\alpha} e_{\alpha}^2$	$n_1 - 1 - p_1$	$V_{E1}$	$\sigma_{E2}^2 + n_2 \sigma_{E1}^2$
第 2 級	$S_2 = \sum_{\alpha\beta} (y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha.})^2$	$n_1(n_2 - 1)$	—	—
$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ \gamma_j \\ \vdots \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ S_{C_j} = \left( \sum_{\alpha\beta} x_{\alpha\beta j}^2 \right) c_j^2 \\ \vdots \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ 1 \\ \vdots \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ V_{C_j} \\ \vdots \end{array} \right.$	$\left\{ \begin{array}{l} \vdots \\ \sigma_{E2}^2 + \left( \sum_{\alpha\beta} x_{\alpha\beta j}^2 \right) \gamma_j^2 \\ \vdots \end{array} \right.$
誤差 2	$S_{E2} = \sum_{\alpha\beta} e_{\alpha\beta}^2$	$n_1(n_2 - 1) - p_2$	$V_{E2}$	$\sigma_{E2}^2$
和	$\sum_{\alpha\beta} y_{\alpha\beta}^2$	$n_1 n_2$	—	—

例2 对例1, 可得方差分析表如表20.3。

表20.3 方差分析表(例1)

变 因	平 方 和	自 由 度	无偏方差	无偏方差的数学期望
平 均	$S_M = 8\bar{y}^2$	1	$V_M$	$\sigma_{E2}^2 + 2\sigma_{E1}^2 + 8\mu^2$
第1級	$S_1 = 2 \sum (\bar{y}_{\alpha.} - \bar{y}_{..})^2$	3	—	—
$\beta_1$	$S_{B1} = 8b_1^2$	1	$V_{B1}$	$\sigma_{E2}^2 + 2\sigma_{E1}^2 + 8\beta_1^2$
误差1	$S_{E1} = \dots$	2	$V_{E1}$	$\sigma_{E2}^2 + 2\sigma_{E1}^2$
第2級	$S_2 = \sum (y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha.})^2$	4	—	—
$\gamma_1$	$S_{C1} = 8c_1^2$	1	$V_{C1}$	$\sigma_{E2}^2 + 8\gamma_1^2$
$\gamma_2$	$S_{C2} = 8c_2^2$	1	$V_{C2}$	$\sigma_{E2}^2 + 8\gamma_2^2$
误差2	$S_{E2} = \dots$	2	$V_{E2}$	$\sigma_{E2}^2$
和	$\sum y^2$	8	—	—

[注1] 当进行实际的数值计算时, 首先计算下列的和:

$$Y_{\alpha.} = y_{\alpha 1} + y_{\alpha 2} \quad (\alpha = 1, 2, 3, 4),$$

$$Y_{..} = Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4,$$

$$B_1 = Y_1 - Y_2 + Y_3 - Y_4,$$

$$C_1 = y_{11} - y_{12} + y_{21} - y_{22} + y_{31} - y_{32} + y_{41} - y_{42},$$

$$C_2 = y_{11} - y_{12} - y_{21} + y_{22} + y_{31} - y_{32} - y_{41} + y_{42}.$$

其次计算

$$(I) = \sum y^2, \quad (II) = (Y_1^2 + Y_2^2 + Y_3^2 + Y_4^2)/2, \quad (III)_1 = Y_{..}^2/8,$$

$$S_{B1} = B_1^2/8, \quad S_{C1} = C_1^2/8, \quad S_{C2} = C_2^2/8,$$

最后由下式就可完成平方和的计算:

$$S_M = (III),$$

$$S_1 = (II) - (III), \quad S_{E1} = S_1 - S_{B1},$$

$$S_2 = (I) - (II), \quad S_{E2} = S_2 - S_{C1} - S_{C2}.$$

$\mu$ ,  $\beta_1$ ,  $\gamma_1$  和  $\gamma_2$  的估计值分别由以下各式给出:

$$m = Y_{..}/8, \quad b_1 = B_1/8, \quad c_1 = C_1/8 \text{ 和 } c_2 = C_2/8.$$

[注2]  $\sigma_{E1}^2$  和  $\sigma_{E2}^2$  的估计值分别由

$$\hat{\sigma}_{E1}^2 = (V_{E1} - V_{E2})/2 \text{ 和 } \hat{\sigma}_{E2}^2 = V_{E2}$$

给出。这时由于  $V_{E1}$  和  $V_{E2}$  的自由度都很小, 所以估计的精度非常低 (对于

誤差的估計量,至少要給予5或者6个自由度,最好还是給予10个以上的自由度)。

## § 21 裂区試驗的估計理論

本节将对裂区試驗作如 § 5 对单纯綫性模型所作的那种討論。

首先对分枝設計 (§ 19) 的情形,証明 (19.12) 的  $\hat{\sigma}_{E1}^2$ ,  $\hat{\sigma}_{E2}^2$  和  $\hat{\sigma}_{E3}^2$  分别是  $\sigma_{E1}^2$ ,  $\sigma_{E2}^2$  和  $\sigma_{E3}^2$  的最优无偏估計。可以把具有构造模型如 (19.1) 的数据的联合分布概率密度写成:

$$\begin{aligned} f(y_{111}, \dots, y_{n_1 n_2 n_3}) = & \int \cdots \int \left( \frac{1}{2\pi\sigma_{E1}^2} \right)^{\frac{n_1}{2}} \left( \frac{1}{2\pi\sigma_{E2}^2} \right)^{\frac{n_2 n_1}{2}} \left( \frac{1}{2\pi\sigma_{E3}^2} \right)^{\frac{n_1 n_2 n_3}{2}} \\ & \times \exp \left( -\frac{Q_1}{2\sigma_{E1}^2} - \frac{Q_2}{2\sigma_{E2}^2} - \frac{Q_3}{2\sigma_{E3}^2} \right) \\ & \times d\varepsilon_1 \cdots d\varepsilon_{n_1} \cdots d\varepsilon_{n_1 n_2} \cdots d\varepsilon_{n_1 n_2 n_3}, \end{aligned} \quad (21.1)$$

$$\left. \begin{aligned} \text{此处 } Q_1 = \sum_{\alpha=1}^{n_1} \varepsilon_{\alpha}^2, \quad Q_2 = \sum_{\alpha=1}^{n_1} \sum_{\beta=1}^{n_2} \varepsilon_{\alpha\beta}^2, \\ Q_3 = \sum_{\alpha=1}^{n_1} \sum_{\beta=1}^{n_2} \sum_{\gamma=1}^{n_3} (y_{\alpha\beta\gamma} - \mu - \varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\alpha\beta})^2. \end{aligned} \right\} \quad (21.2)$$

并假設关于  $\varepsilon_{\alpha}$  ( $\alpha=1, \dots, n_1$ ) 和关于  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  ( $\alpha=1, \dots, n_1; \beta=1, \dots, n_2$ ) 的积分都从  $-\infty$  积到  $+\infty$ 。

可以把 (21.1) 改写为下列形状:

$$\begin{aligned} f = & \left( \frac{1}{2\pi\theta_1} \right)^{\frac{1+\phi_{E1}}{2}} \left( \frac{1}{2\pi\theta_2} \right)^{\frac{\phi_{E2}}{2}} \left( \frac{1}{2\pi\theta_3} \right)^{\frac{\phi_{E3}}{2}} \\ & \times \exp \left\{ -\frac{N(\bar{y}_{\dots} - \mu)^2 + S_{E1}}{2\theta_1} - \frac{S_{E2}}{2\theta_2} - \frac{S_{E3}}{2\theta_3} \right\}, \end{aligned} \quad (21.3)$$

此处  $S_{E1}$ ,  $S_{E2}$ ,  $S_{E3}$  和  $\phi_{E1}$ ,  $\phi_{E2}$ ,  $\phi_{E3}$  的定义已分别在 (19.9) 和 (19.11) 中給出,而且

$$\left. \begin{aligned} \theta_1 &= \sigma_{E3}^2 + n_3\sigma_{E2}^2 + n_2n_3\sigma_{E1}^2, \\ \theta_2 &= \sigma_{E3}^2 + n_3\sigma_{E2}^2, \\ \theta_3 &= \sigma_{E3}^2. \end{aligned} \right\} \quad (21.4)$$

証明的要點 第一,  $Q_3$  可以分解为

$$Q_3 = n_3 \sum_{\alpha\beta} (\bar{y}_{\alpha\beta} - \mu - \varepsilon_\alpha - \varepsilon_{\alpha\beta})^2 + S_{E1}. \quad (21.5)$$

第二,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{1}{2\pi\sigma_{E2}^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{n_3}{2\pi\sigma_{E3}^2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{\varepsilon_{\alpha\beta}^2}{2\sigma_{E2}^2} - \frac{n_3(\bar{y}_{\alpha\beta} - \mu - \varepsilon_\alpha - \varepsilon_{\alpha\beta})^2}{2\sigma_{E3}^2} \right\} \\ \times d\varepsilon_{\alpha\beta} = \left\{ \frac{n_3}{2\pi(\sigma_{E3}^2 + n_3\sigma_{E2}^2)} \right\}^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{n_3(\bar{y}_{\alpha\beta} - \mu - \varepsilon_\alpha)^2}{2(\sigma_{E3}^2 + n_3\sigma_{E2}^2)} \right\}. \quad (21.6)$$

如此反复計算即可。

[注] (21.6) 相当于下列公式的特殊情形:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{1}{2\pi\sigma_1^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left( \frac{1}{2\pi\sigma_2^2} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{x^2}{2\sigma_1^2} - \frac{(z-x)^2}{2\sigma_2^2} \right\} dx \\ = \left\{ \frac{1}{2\pi(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)} \right\}^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{z^2}{2(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)} \right\}. \quad (21.7)$$

上式表明, 若  $x$  遵循  $N(0, \sigma_1^2)$ ,  $y$  遵循  $N(0, \sigma_2^2)$ , 而且  $x$  和  $y$  独立, 则  $z = x + y$  遵循  $N(0, \sigma_1^2 + \sigma_2^2)$ . (21.7) 是这样得到的: 先把左边 { } 的里边改写为

$$\frac{x^2}{\sigma_1^2} + \frac{(z-x)^2}{\sigma_2^2} = \frac{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}{\sigma_1^2 \sigma_2^2} \left( x - \frac{\sigma_1^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} z \right)^2 + \frac{z^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}, \quad (21.8)$$

然后利用

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\sigma_1^2 + \sigma_2^2}{\sigma_1^2 \sigma_2^2} \left( x - \frac{\sigma_1^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} z \right)^2 \right\} dx = \left( 2\pi \frac{\sigma_1^2 \sigma_2^2}{\sigma_1^2 + \sigma_2^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (21.9)$$

取 (21.3) 的自然对数, 使得

$$\ln f = -\frac{N}{2} \ln(2\pi) - \frac{1 + \phi_{E1}}{2} \ln \theta_1 - \frac{\phi_{E2}}{2} \ln \theta_2 - \frac{\phi_{E3}}{2} \ln \theta_3 \\ - \frac{N(\bar{y}_{...} - \mu)^2 + S_{E1}}{2\theta_1} - \frac{S_{E2}}{2\theta_2} - \frac{S_{E3}}{2\theta_3}, \quad (21.10)$$

这时, 微分上式使得

$$\frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \theta_1} = -\frac{1 + \phi_{E1}}{2\theta_1} + \frac{N(\bar{y}_{...} - \mu)^2 + S_{E1}}{2\theta_1^2}, \quad (21.11)$$

$$\frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \theta_2} = -\frac{\phi_{E2}}{2\theta_2} - \frac{S_{E2}}{2\theta_2^2}, \quad (21.12)$$



$$\frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \theta_3} = -\frac{\phi_{E3}}{2\theta_3} + \frac{S_{E3}}{2\theta_3^2}, \quad (21.13)$$

$$\frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \mu} = \frac{N(\bar{y}_{...} - \mu)}{\theta_1}, \quad (21.14)$$

$$\frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial \mu^2} = -\frac{N}{\theta_1} + \frac{N^2(\bar{y}_{...} - \mu)^2}{\theta_1^2}. \quad (21.15)$$

由此推出

$$(\bar{y}_{...} - \mu)f = \frac{\theta_1}{N} \frac{\partial f}{\partial \mu}, \quad (21.16)$$

$$(S_{E1} - \phi_{E1}\theta_1)f = 2\theta_1^2 \frac{\partial f}{\partial \theta_1} - \frac{\theta_1^2}{N} \frac{\partial^2 f}{\partial \mu^2}, \quad (21.17)$$

$$(S_{E2} - \phi_{E2}\theta_2)f = 2\theta_2^2 \frac{\partial f}{\partial \theta_2}, \quad (21.18)$$

$$(S_{E3} - \phi_{E3}\theta_3)f = 2\theta_3^2 \frac{\partial f}{\partial \theta_3}, \quad (21.19)$$

所以根据 § 5 的定理可知,  $\bar{y}_{...}$ ,  $S_{E1}$ ,  $S_{E2}$  和  $S_{E3}$  分别是  $\mu$ ,  $\phi_{E1}\theta_1$ ,  $\phi_{E2}\theta_2$  和  $\phi_{E3}\theta_3$  的最优无偏估計。此外, 还可推出

$$\begin{aligned} & \left( \frac{V_{E1} - V_{E2}}{n_2 n_3} - \frac{\theta_1 - \theta_2}{n_2 n_3} \right) f \\ &= \frac{1}{n_2 n_3} \left\{ \frac{\theta_1^2}{\phi_{E1}} \left( 2 \frac{\partial f}{\partial \theta_1} - \frac{1}{N} \frac{\partial^2 f}{\partial \mu^2} \right) - \frac{2\theta_2^2}{\phi_{E2}} \frac{\partial f}{\partial \theta_2} \right\}, \end{aligned} \quad (21.20)$$

$$\left( \frac{V_{E2} - V_{E3}}{n_3} - \frac{\theta_2 - \theta_3}{n_3} \right) f = \frac{1}{n_3} \left\{ \frac{2\theta_2^2}{\phi_{E2}} \frac{\partial f}{\partial \theta_2} - \frac{2\theta_3^2}{\phi_{E3}} \frac{\partial f}{\partial \theta_3} \right\}. \quad (21.21)$$

由此可知  $\hat{\sigma}_{E1}^2 = (V_{E1} - V_{E2})/n_2 n_3$  和  $\hat{\sigma}_{E2}^2 = (V_{E2} - V_{E3})/n_3$  分别是  $\sigma_{E1}^2 = (\theta_1 - \theta_2)/n_2 n_3$  和  $\sigma_{E2}^2 = (\theta_2 - \theta_3)/n_3$  的最优无偏估計。

[注] 由 § 5 中的系便可算出上述估計量的方差为

$$\begin{aligned} V(\hat{\sigma}_{E1}^2) &= \frac{1}{n_2 n_3} \left\{ \frac{\theta_1^2}{\phi_{E1}} \left( 2 \frac{\partial}{\partial \theta_1} - \frac{1}{N} \frac{\partial^2}{\partial \mu^2} \right) - \frac{2\theta_2^2}{\phi_{E2}} \frac{\partial}{\partial \theta_2} \right\} \left( \frac{\theta_1 - \theta_2}{n_2 n_3} \right) \\ &= \left( \frac{1}{n_2 n_3} \right)^2 \left( \frac{2\theta_1^2}{\phi_{E1}} + \frac{2\theta_2^2}{\phi_{E2}} \right), \end{aligned} \quad (21.22)$$

$$\begin{aligned} V(\hat{\sigma}_{E2}^2) &= \frac{1}{n_3} \left( \frac{2\theta_2^2}{\phi_{E2}} \frac{\partial}{\partial \theta_2} - \frac{2\theta_3^2}{\phi_{E3}} \frac{\partial}{\partial \theta_3} \right) \frac{\theta_2 - \theta_3}{n_3} \\ &= \left( \frac{1}{n_3} \right)^2 \left( \frac{2\theta_2^2}{\phi_{E2}} + \frac{2\theta_3^2}{\phi_{E3}} \right). \end{aligned} \quad (21.23)$$

其次,討論具有正交性的(即(20.2)成立的)裂区試驗(20.1)的情形。这时  $y_{\alpha\beta}(\alpha=1, \dots, n_1; \beta=1, \dots, n_2)$  的联合分布概率密度是

$$f = \left\{ \dots \right\} \left( \frac{1}{2\pi\sigma_{E1}^2} \right)^{\frac{n_1}{2}} \left( \frac{1}{2\pi\sigma_{E2}^2} \right)^{\frac{n_1 n_2}{2}} \exp \left\{ -\frac{Q_1}{2\sigma_{E1}^2} - \frac{Q_2}{2\sigma_{E2}^2} \right\} d\varepsilon_1 \dots d\varepsilon_{n_1}, \quad (21.24)$$

此处

$$\left. \begin{aligned} Q_1 &= \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha}^2, \\ Q_2 &= \sum_{\alpha\beta} (y_{\alpha\beta} - \mu - \sum_i x_{\alpha i} \beta_i - \varepsilon_{\alpha} - \sum_j x_{\alpha\beta j} \gamma_j)^2, \end{aligned} \right\} \quad (21.25)$$

并假设关于  $\varepsilon_{\alpha}(\alpha=1, \dots, n_1)$  的积分是从  $-\infty$  积到  $+\infty$ 。

如前面一样, (21.24) 可以改写为下列形状:

$$f = \left( \frac{1}{2\pi\theta_1} \right)^{\frac{n_1}{2}} \left( \frac{1}{2\pi\theta_2} \right)^{\frac{n_1(n_2-1)}{2}} \exp \left\{ -\frac{Q'_1}{2\theta_1} - \frac{Q'_2}{2\theta_2} \right\}, \quad (21.26)$$

此处

$$\theta_1 = \sigma_{E2}^2 + n_2 \sigma_{E1}^2, \quad \theta_2 = \sigma_{E2}^2; \quad (21.27)$$

$$\left. \begin{aligned} Q'_1 &= n_1 n_2 (\bar{y}_{..} - \mu)^2 + n_2 \sum_{\alpha} (\bar{y}_{\alpha.} - \bar{y}_{..} - \sum_i x_{\alpha i} \beta_i)^2, \\ Q'_2 &= \sum_{\alpha\beta} (y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha.} - \sum_j x_{\alpha\beta j} \gamma_j)^2. \end{aligned} \right\} \quad (21.28)$$

这样,微分  $\ln f$  便得

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \mu} &= \frac{n_1 n_2 (\bar{y}_{..} - \mu)}{\theta_1}, \\ \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \beta_i} &= \frac{n_2 \sum_{\alpha} (\bar{y}_{\alpha.} - \bar{y}_{..} - \sum_k x_{\alpha k} \beta_k) x_{\alpha i}}{\theta_1} \\ &= \frac{n_2 (\sum_{\alpha} x_{\alpha i} \bar{y}_{\alpha.} - \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2 \beta_i)}{\theta_1}, \\ \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \gamma_j} &= \frac{\sum_{\alpha\beta} (y_{\alpha\beta} - \bar{y}_{\alpha.} - \sum_k x_{\alpha\beta k} \gamma_k) x_{\alpha\beta j}}{\theta_2} \\ &= \frac{\sum_{\alpha\beta} x_{\alpha\beta j} y_{\alpha\beta} - \sum_{\alpha\beta} x_{\alpha\beta j}^2 \gamma_j}{\theta_2}, \end{aligned} \right\} \quad (21.29)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial \mu^2} &= -\frac{n_1 n_2}{\theta_1} + \frac{n_1^2 n_2^2 (\bar{y}_{..} - \mu)^2}{\theta_1^2}, \\ \frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial \beta_i^2} &= -\frac{n_2 \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2}{\theta_1} + \frac{n_2^2 (\sum_{\alpha} x_{\alpha i} \bar{y}_{\alpha.} - \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2 \beta_i)^2}{\theta_1^2}, \\ \frac{1}{f} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma_j^2} &= -\frac{\sum_{\alpha \beta} x_{\alpha \beta j}^2}{\theta_2} + \frac{(\sum_{\alpha \beta} x_{\alpha \beta j} y_{\alpha \beta} - \sum_{\alpha \beta} x_{\alpha \beta j}^2 \gamma_j)^2}{\theta_2^2}, \end{aligned} \right\} \quad (21.30)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \theta_1} &= -\frac{n_1}{2\theta_1} + \frac{n_1 n_2 (\bar{y}_{..} - \mu)^2 + n_2 \sum_{\alpha} (\bar{y}_{\alpha.} - \bar{y}_{..} - \sum_i x_{\alpha i} \beta_i)^2}{2\theta_1^2}, \\ \frac{1}{f} \frac{\partial f}{\partial \theta_2} &= -\frac{n_1(n_2-1)}{2\theta_2} + \frac{\sum_{\alpha \beta} (y_{\alpha \beta} - \bar{y}_{\alpha.} - \sum_j x_{\alpha \beta j} \gamma_j)^2}{2\theta_2^2}. \end{aligned} \right\} \quad (21.31)$$

因而根据 § 5 的定理, 从 (21.29) 可以看出  $\bar{y}_{..}$ ,  $b_i = \sum_{\alpha} x_{\alpha i} \bar{y}_{\alpha.} / \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2$  和  $c_j = \sum_{\alpha \beta} x_{\alpha \beta j} y_{\alpha \beta} / \sum_{\alpha \beta} x_{\alpha \beta j}^2$  分别是  $\mu$ ,  $\beta_i$  和  $\gamma_j$  的最优无偏估计。又可从 (21.31) 和 (21.30) 导出

$$\left. \begin{aligned} 2\theta_1^2 \frac{\partial f}{\partial \theta_1} - \frac{\theta_1^2}{n_1 n_2} \frac{\partial^2 f}{\partial \mu^2} - \sum_i \frac{\theta_1^2}{n_2 \sum_{\alpha} x_{\alpha i}^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \beta_i^2} \\ = \{S_{E1} - (n_1 - 1 - p_1) \theta_1\} f, \\ 2\theta_2^2 \frac{\partial f}{\partial \theta_2} - \sum_j \frac{\theta_2^2}{\sum_{\alpha \beta} x_{\alpha \beta j}^2} \frac{\partial^2 f}{\partial \gamma_j^2} \\ = \{S_{E2} - (n_1(n_2 - 1) - p_2) \theta_2\} f, \end{aligned} \right\} \quad (21.32)$$

所以  $S_{E1}$  和  $S_{E2}$  分别是  $(n_1 - 1 - p_1) \theta_1$  和  $(n_1(n_2 - 1) - p_2) \theta_2$  的最优无偏估计。此外还可以得出这样的推论:

$$\hat{\sigma}_{k1}^2 = \frac{1}{n_2} \left( \frac{S_{E1}}{n_1 - 1 - p_1} - \frac{S_{E2}}{n_1(n_2 - 1) - p_2} \right)$$

$$\text{和} \quad \hat{\sigma}_{k2}^2 = \frac{S_{E2}}{n_1(n_2 - 1) - p_2} \quad (21.33)$$

分别是  $\sigma_{k1}^2 = (\theta_1 - \theta_2) \cdot n_2$  和  $\sigma_{k2}^2 = \theta_2$  的最优无偏估计

[注] 正如 § 5 的注 2 所说, 即使放宽正态性的假定, 但若把估计量的形

式限定于二次型,則可以得到同样的結論,Graybill<sup>①</sup>对分枝試驗所作的研究就是一个例子。另一方面,連求无偏方差的数学期望的式子也可以在更寬的假設下討論。特別有趣的是,可以把各种效应作为由有限总体得到的标本来加以处理<sup>②</sup>。

## 参考文献

讲解統計方法的参考书是很多的,这里仅列出其中很少的一部分。經典著作有:

- [1] R. A. Fisher: Statistical Methods for Research Workers (Oliver and Boyd, 1948)。
- [2] R. A. Fisher: The Design of Experiments, 5th ed. (Oliver and Boyd, 1949)。

对普及最有貢獻的有:

- [3] G. W. Snedecor: Statistical Methods. 4th ed. (Iowa State College Press, 1946) (日文譯本——畑村等譯:統計的方法,上、下,岩波,1952)。
- [4] W. G. Cochran and G. M. Cox: Experimental Designs (Wiley, 2nd ed., 1957) (日文譯本——田口・松本譯:实验計画法 I, II, 丸善,第二版,1960)。

理論基础首先要从下列一书所收集的論文中求得:

- [5] R. A. Fisher: Contributions to Mathematical Statistics (Wiley, 1950)。

特別接近本书观点的有:

- [6] R. C. Bose: Least Square Aspects of Analysis of Variance, Institute of Statistics, Univ. of North Carolina, Mimeo. Ser. 9.
- [7] A. Wald: The Efficient Design of Experimental Investigations, Lecture notes (Columbia University, 1943)。
- [8] H. B. Mann: Analysis and Design of Experiments (Dover, 1949) (中譯本将由科学出版社出版)。
- [9] O. Kempthorne: The Design and Analysis of Experiments (Wiley,

① F. A. Graybill: Annals of Math. Stat., 25 (1954), 267~372.

② 參看 J. Cornfield and J. W. Tukey: Annals of Math. Stat., 27 (1956), 907~949, 以及其文献表。

1952); (日文譯本——宮城・磯部譯: 実験の計画と解析, 1~4, 日本規格協会, 1956)。

欲求更廣博的知識, 讀下列文獻比較適合:

- [10] H. Cramér: *Mathematical Methods of Statistics* (Princeton University Press, 1946)。(有中譯本, 人民教育出版社出版)
  - [11] M. G. Kendall: *The Advanced Theory of Statistics*, 1, 2 (Griffin, 1948)。
  - [12] S. S. Wilks: *Mathematical Statistics* (Princeton Univ. Press, 1943) (日文譯本——小河原正己譯: 数理統計学, 上、下, 春日出版社, 1951)。
- 作为教本的, 除上列 [10] 和 [12] 以外, 还有:
- [13] A. M. Mood: *Introduction to the Theory of Statistics* (McGraw-Hill, 1950)。
  - [14] Anderson and Bancroft: *Statistical Theory in Research* (McGraw-Hill, 1952)。
  - [15] C. R. Rao: *Advanced Statistical Methods in Biometric Research* (Wiley, 1952)。
  - [16] M. H. Quenouille: *The Design and Analysis of Experiment* (Griffin, 1953)。
  - [17] Bennett and Franklin: *Statistical Analysis in Chemistry and Chemical Industry* (Wiley, 1954) (日文譯本——奥津恭譯: 化学および化学工場における統計解析, I, 丸善, 1956)。

除了标准方法(本书所討論的)以外, 其他方法的例子可参看:

- [18] M. G. Kendall: *Rank Correlation Methods* (Griffin, 1948)。
- [19] Dixon and Massey: *An Introduction to Statistical Analysis* (McGraw-Hill, 1951)。

至于最小二乘法, 下列文獻值得参考:

- [20] W. E. Denning: *Statistical Adjustment of Data* (Wiley, 1943) (日文譯本——森口繁一譯: 推計学にするデータのまとめ方, 岩波, 1950)。

日本的事物中比較有特点的是:

- [21] 北川敏男: 実験計画法讲义(培風館), I (1955), II (1956)。
- [22] 増山元三郎: 実験計画法(岩波, 1956)。
- [23] 増山元三郎: 少数例のまとめ方(河出书房, 1953)。

至于辞典和表,有:

- [24] 中山伊知郎編: 統計学辞典(东洋經濟新报社, 1951; 增补版, 1957)。
- [25] 北川・増山: 新編統計数值表(河出书房, 1952)。
- [26] 北川・三留: 実験計画・要因配置表(培风館, 1953)。
- [27] 品質管理用数值表(日本科学技术連盟), A, 3版(1955): B (1956)。

### 譯者補充文獻

- [28] H. Scheffé: The Analysis of Variance (Wiley, 1959)。
- [29] O. L. Davies (Ed.): Design and Analysis of Industrial Experiments (Oliver & Boyd, 2nd ed., 1956)。
- [30] K. A. Brownlee: Industrial Experimentation (Chem. Publ. Co. Inc., 1949) (有中譯本, 陈蔭枋譯: 工业試驗統計, 科学出版社, 1959; 还有俄譯本)。
- [31] 増山元三郎: 実験計画法(岩波講座 現代应用数学, 1957) (有中譯本, 刘璋温譯: 試驗設計法, 上海科学技术出版社, 即将出版)。
- [32] E. J. Williams: Regression Analysis (Wiley, 1959)。
- [33] W. T. Federer: Experimental Design (Macmillan, 1955)。

[28] 总结了迄今为止的成果, 是一本系統的著作, [31]和[22]同样介紹設計的数学理論, 对于数学基础較好的讀者, 这三本书都值得推荐。[29]和[30]可作为工业特别是化学工业試驗設計的参考; [32]包含各方面的例題, 比較实用。[33]被評为“百科全书”, 适于查閱。

关于最小二乘法的理論基础, 下列文獻值得推荐:

- [34] Ю. В. Липшик: Метод наименьших квадратов и основы математико-статистической теории обработки наблюдений, Физматгиз, 1958。