

# 1.题目表述

8. 【案例分析】为了调查吃巧克力对心血管健康的影响, 实验由三种类型的巧克力组成: 100 g 的黑巧克力, 含有 200 mg 全脂牛奶的 100 g 黑巧克力和 200 g 的牛奶巧克力。12 个实验对象包含 7 女 5 男。在不同的天数里, 每个实验对象将吃一种类型的巧克力 (Chocolate), 一个小时后测量他们血浆的总抗氧能力 (Capacity)。实验次序本身具有随机性, 无须再随机化。数据信息如表 1.11 所示。

表 1.11 数据说明

变量名	变量含义	变量类型	变量取值范围
Chocolate	巧克力类型	分类变量	{1, 2, 3}
Capacity	血浆浓度	连续变量	$R$

请完成以下任务。注: 显著性水平  $\alpha$  取 0.05。

- (a) 两两比较 3 种巧克力对心血管健康的影响是否存在差异。
- (b) 判断 3 种巧克力对心血管健康的影响是否存在差异。
- (c) 试说明所使用模型的合理性。
- (d) 估计食用这 3 种巧克力一小时后血浆的总抗氧能力。请分别给出点估计和区间估计。
- (e) 用 Bonferroni 方法比较吃了 3 种巧克力后, 一个小时的血浆总抗氧能力两两之间是否存在差异。
- (f) 用 Tukey 方法比较吃了 3 种巧克力后, 一个小时的血浆总抗氧能力两两之间是否存在差异。采用以下两种不同的方法来解决这个问题:
  - I. 直接调用 Python 中现有函数;
  - II. 用蒙特卡洛随机模拟分布的方式, 确定  $t$  化极差统计量的分位数  $q_{1-\alpha}(a, df)$ , 计算临界值 (critical value)  $c = q_{1-\alpha}(a, df)\hat{\sigma}/\sqrt{m}$ 。
- (g) 基于这个例子, 请评述 Bonferroni 方法和 Tukey 方法的异同。

总共有a-g小问，作答代码附上，第g小问在实验报告中呈现：

```
In [1]: import matplotlib
import shutil
cache_dir = matplotlib.get_cachedir()
shutil.rmtree(cache_dir, ignore_errors=True)
print(f"✅ 已清除缓存: {cache_dir}, 请重启内核后重新运行!")
```

✅ 已清除缓存: /home/jovyan/.cache/matplotlib, 请重启内核后重新运行!

```
In [2]: import zipfile
import os
import matplotlib.pyplot as plt
from matplotlib.font_manager import FontProperties

# -----
# 步骤1: 解压 simhei.ttf.zip 到当前目录
# -----
zip_file = "simhei.ttf.zip" # 压缩包文件名（与代码同目录）
extract_dir = "."          # 解压到当前目录

# 验证压缩包是否存在
if not os.path.exists(zip_file):
    raise FileNotFoundError(f"未找到压缩包: {zip_file}, 请确认文件在项目目录!")

# 执行解压
with zipfile.ZipFile(zip_file, "r") as zip_ref:
    zip_ref.extractall(extract_dir)
    print(f"✅ 已解压 {zip_file} 到 {extract_dir}")

# -----
# 步骤2: 定位并加载 simhei.ttf 字体
# -----
# 假设压缩包内直接包含 simhei.ttf（若在子文件夹，需修改路径，如 "fonts/simhei.ttf"）
font_path = os.path.join(extract_dir, "simhei.ttf")

# 验证字体文件是否存在
if not os.path.exists(font_path):
    # （可选）打印压缩包内所有文件，帮助排查路径
    print("压缩包内文件列表: ")
    with zipfile.ZipFile(zip_file, "r") as zip_ref:
        for name in zip_ref.namelist():
            print(name)
    raise FileNotFoundError(f"未找到字体文件 simhei.ttf, 请检查压缩包内路径（当前")

# 创建字体属性对象
simhei_font = FontProperties(fname=font_path)
print(f"✅ 加载字体: {simhei_font.get_name()}, 路径: {font_path}")

# -----
# 步骤3: 测试中文显示（绘图验证）
# -----
```

## 2.相关前置知识总结

### 有关画图

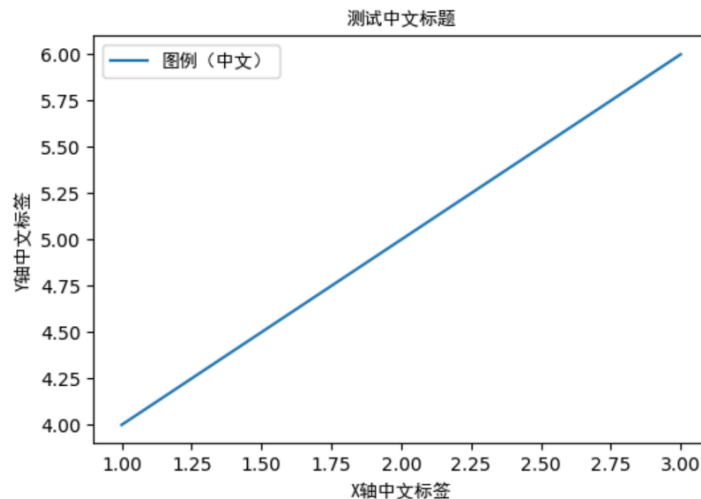
```
# 创建字体属性对象
simhei_font = FontProperties(fname=font_path)
print(f"✅ 加载字体: {simhei_font.get_name()}, 路径: {font_path}")

# -----
# 步骤3: 测试中文显示 (绘图验证)
# -----
plt.figure(figsize=(6, 4))
plt.title("测试中文标题", fontproperties=simhei_font)
plt.xlabel("X轴中文标签", fontproperties=simhei_font)
plt.ylabel("Y轴中文标签", fontproperties=simhei_font)
plt.plot([1, 2, 3], [4, 5, 6], label="图例 (中文)")
plt.legend(prop=simhei_font) # 图例需用 prop 参数
plt.show()
```

Could not save font\_manager cache [Errno 2] No such file or directory: '/home/jovyan/.cache/matplotlib/fontlist-v390.json.matplotlib-lock'

✅ 已解压 simhei.ttf.zip 到 .

✅ 加载字体: SimHei, 路径: ./simhei.ttf



1. 首先下载中文字体到jupyterhub, 使其能够在图中正确显示
2. Python 绘图的核心依赖 **Matplotlib**和 **NumPy**, 核心逻辑围绕“生成数据→绘制图像→个性化风格→保存图像”展开, 以下是分模块的核心内容提炼:

1. 导入库: `import numpy as np; import matplotlib.pyplot as plt`
2. 生成数据: 用 `np.linspace` (连续) 或 `np.random` (随机) 生成数据
3. 创建画布与轴: `fig, ax = plt.subplots(figsize=(宽, 高))`
4. 绘制图像: `ax.plot()` (折线) 或 `ax.scatter()` (散点)
5. 个性化风格: 设置线条 / 点 / 颜色、添加文字标注、分割子图
6. 保存 / 显示: `fig.savefig(路径)` 或 `plt.show()`

3. 以及一些数组索引部分内容:

1. `data_1 = load_data.values[0,:]` #返回第一行
2. `data_2 = load_data.values[0,0]` #返回第(1,1)个元素
3. `data_3 = load_data['Chocolate'].values` #打印第一列Obs的数值
4. `data_4 = load_data.values[1:30:2]` #和数组一样的用法 `list[start:end:stride]`
5. `data[:,0]` 就是取矩阵X的所有行的第0列的元素, `X[:,1]` 就是取所有行的第1列的元素
6. `data[:,m:n]` 即取矩阵X的所有行中的第m到n-1列数据, 含左不含右。
7. `data[0,:]` 就是取矩阵X的第0行的所有元素, `X[1,:]` 取矩阵X的第一行的所有元素

# 单因子方差分析

单因素方差分析模型为

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \epsilon_{ij}$$

其中， $\epsilon_{ij}$ 是独立同分布的，且均服从均值为零，方差为 $\sigma^2$ 的正态分布，即 $\epsilon \overset{i.i.d}{\sim} N(0, \sigma^2)$ .

- 独立性；
- 同方差；
- 正态性。

在单因素方差分析模型中，待估参数有

- $\mu$ : 总体平均水平；
- $\alpha_i$ : 第*i*个水平的效应值；
- $\sigma^2$ : 误差方差。

$\mu$ 的最大似然估计是

$$\hat{\mu} = \bar{y}_{..} = \frac{1}{am} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^m y_{ij};$$

$\alpha_i$ 的最大似然估计是

$$\hat{\alpha}_i = \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m y_{ij} - \frac{1}{am} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^m y_{ij};$$

$\sigma^2$ 的常用估计是

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{SS_E}{a(m-1)} = \frac{\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^m (y_{ij} - \bar{y}_{i.})^2}{n-a} = MS_E;$$

## 核心表格：

来源	平方和(SS)	自由度(df)	均方(MS)	检验统计量(F)	P-value
因子A	$SS_A$	$df_A = a - 1$	$MS_A = \frac{S_A}{df_A}$	$F = \frac{MS_A}{MS_E}$	$p = P(Y \geq F)$
误差E	$SS_E$	$df_e = n - a$	$MS_E = \frac{S_E}{df_E}$		
总和T	$SS_T$	$df_T = n - 1$			

## 相关公式总结：

以下为罗文琦纯手敲公式，并非截图！

参数： $a$ 是分类数， $m$ 是每一类中的样本数， $n$ 是总体样本数： $n = a * m$

$$\text{总体: } SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{m_i} (y_{ij} - \bar{y})^2, \quad f_T = n - 1$$

$$\text{组间: } SS_A = \sum_{i=1}^a m_i (\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y})^2, \quad f_A = a - 1,$$

$$\text{组内: } SS_E = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{m_i} (y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2, \quad f_E = n - a$$

$$SS_T = SS_A + SS_E$$

## a. 两两比较三种巧克力对心血管的影响是否存在差异

```
[7]: # -----
# 3. 两两组合进行t检验（原逻辑保留，适配分组数据）
# -----
pairs = [(0, 1), (0, 2), (1, 2)] # 组索引组合 (1vs2、1vs3、2vs3)
print("\n=== a. 两两独立样本t检验结果 ===")
for i, j in pairs:
    group_i = groups[i]
    group_j = groups[j]

    # 步骤1: 检验方差齐性 (Levene 检验, 抗偏离正态性更好)
    lev_stat, lev_p = stats.levene(group_i, group_j)
    equal_var = lev_p > alpha # True=方差齐性, False=方差不齐

    # 步骤2: 独立样本t检验 (根据方差齐性选择是否校正)
    t_stat, t_p = stats.ttest_ind(group_i, group_j, equal_var=equal_var)

    # 步骤3: 计算t临界值 (自由度根据方差齐性调整)
    if equal_var:
        df_t = len(group_i) + len(group_j) - 2 # 齐性时自由度: n1+n2-2
    else:
        df_t = min(len(group_i), len(group_j)) - 1 # 不齐时简化自由度 (或用Welch-Satterthwaite公式)
    t_critical = t.ppf(1 - alpha/2, df_t) # 双尾检验临界值

    print(f"\n{group_names[i]} vs {group_names[j]}:")
    print(f"  1. 方差齐性检验 (Levene): p={round(lev_p, 4)} ({'齐性' if equal_var else '不齐性'})")
    print(f"  2. t检验: 统计量={round(t_stat, 4)}, 临界值={round(t_critical, 4)}, p值={round(t_p, 4)}")
    print(f"  3. 结论: {'拒绝原假设 (存在显著差异)' if t_p < alpha else '无法拒绝原假设 (无显著差异)'}")
```

=== a. 两两独立样本t检验结果 ===

1(100g黑巧) vs 2(黑巧+牛奶):

1. 方差齐性检验 (Levene): p=0.8887 (齐性)
2. t检验: 统计量=11.1057, 临界值=2.0739, p值=0.0
3. 结论: 拒绝原假设 (存在显著差异)

1(100g黑巧) vs 3(200g牛奶巧):

1. 方差齐性检验 (Levene): p=0.9657 (齐性)
2. t检验: 统计量=12.0478, 临界值=2.0739, p值=0.0
3. 结论: 拒绝原假设 (存在显著差异)

2(黑巧+牛奶) vs 3(200g牛奶巧):

1. 方差齐性检验 (Levene): p=0.827 (齐性)
2. t检验: 统计量=0.4126, 临界值=2.0739, p值=0.6839
3. 结论: 无法拒绝原假设 (无显著差异)

## b. 判断三种巧克力对心血管健康的影响是否存在差异

```
[8]: # -----
# 4. 单因素ANOVA分析
# -----
print("\n=== b.单因素ANOVA分析结果 ===")
# 方法1: 基于statsmodels (输出详细ANOVA表, 含平方和、均方)
model = ols("Capacity ~ C(Chocolate)", data=Data).fit() # C(Chocolate) 标记分类变量为因子
anova_table = anova_lm(model)
print("方法1: statsmodels ANOVA表 (保留4位小数):")
print(round(anova_table, 4))

# 方法2: 基于scipy.stats.f_oneway (快速计算F统计量和p值)
f_stat, f_p = stats.f_oneway(groups[0], groups[1], groups[2])
# 计算F临界值 (自由度df1=a-1, df2=n-a)
df1 = a - 1 # 因子自由度: 水平数-1
df2 = n - a # 误差自由度: 总样本量-水平数
f_critical = f.ppf(1 - alpha, df1, df2)

print(f"\n方法2: scipy F检验:")
print(f" F统计量={round(f_stat, 4)}, 临界值={round(f_critical, 4)}, p值={round(f_p, 4)}")
print(f" 结论: {'拒绝原假设 (三种巧克力影响存在显著差异)' if f_p < alpha else '无法拒绝原假设 (无显著差异)'}")
```

```
=== b.单因素ANOVA分析结果 ===
方法1: statsmodels ANOVA表 (保留4位小数):
```

	df	sum_sq	mean_sq	F	PR(>F)
C(Chocolate)	2.0	1952.6439	976.3219	93.5756	0.0
Residual	33.0	344.3058	10.4335	NaN	NaN

```
方法2: scipy F检验:
F统计量=93.5756, 临界值=3.2849, p值=0.0
结论: 拒绝原假设 (三种巧克力影响存在显著差异)
```

## c.分析模型使用的合理性

想要判断ANOVA模型是否恰当, 可以利用残差检测来进行分析。

处理  $i$  的观测值  $j$  的残差定义为:  $\epsilon_{ij} = y_{ij} - \hat{y}_{ij}$

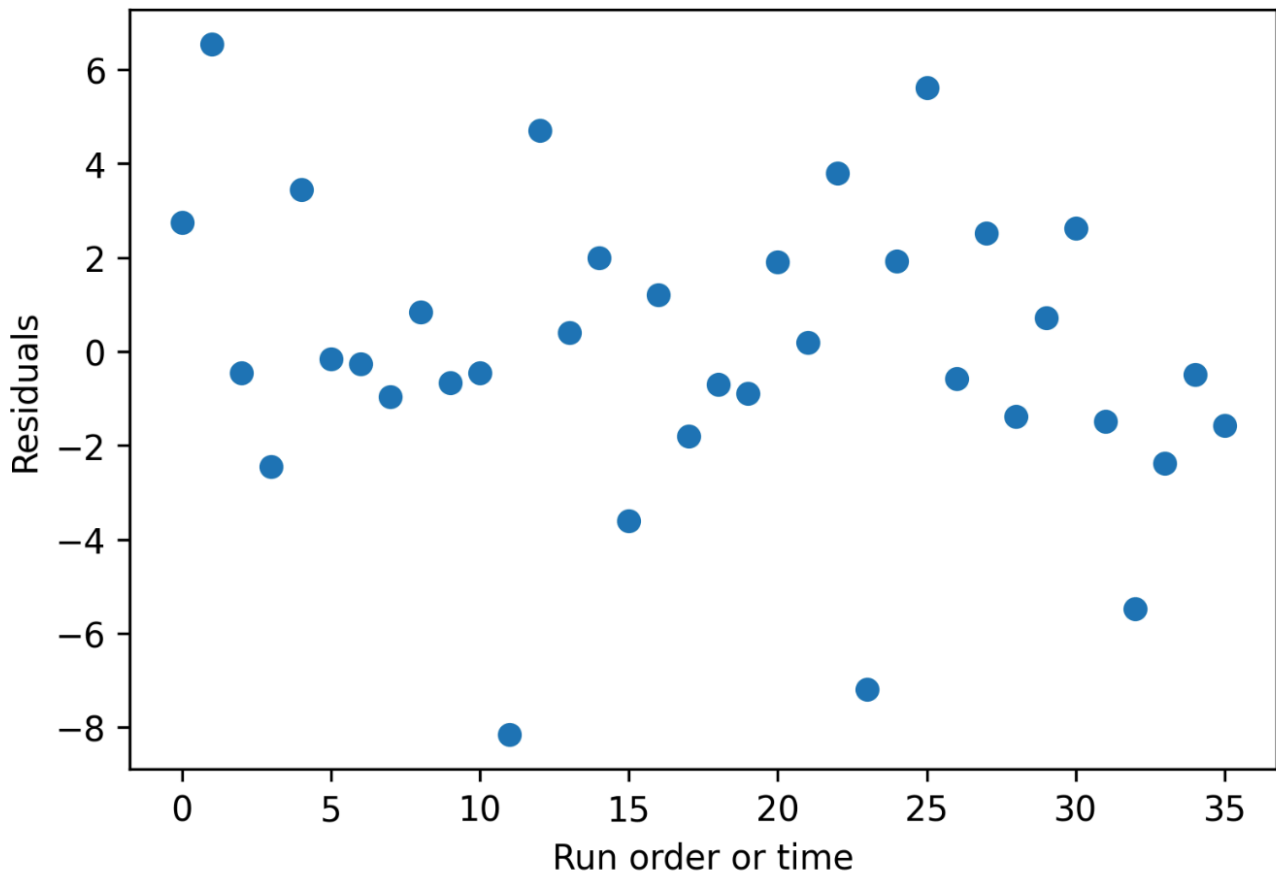
其中  $\hat{y}_{ij}$  是对应于  $y_{ij}$  的一个估计,

$$\hat{y}_{ij} = \hat{\mu} + \hat{\tau}_i = \bar{y}_{..} + (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..}) = \bar{y}_{i.}$$

### 1. 独立性检验

1.1利用残差的时序图, 依照收集数据的时间顺序画出残差图有助于检测残差之间的相关性。

Plot of residuals versus run order or time



```
# 步骤2: 独立性检验 (Durbin-Watson 检验, 检测一阶自相关)
from statsmodels.stats.stattools import durbin_watson # 关键: 添加导入语句
dw_stat = durbin_watson(residuals)
print(f"1. 独立性检验 (Durbin-Watson):")
print(f"   DW统计量={round(dw_stat, 4)}")
print(f"   结论: {'残差无自相关 (满足独立性)' if 1.5 < dw_stat < 2.5 else '需进一步验证独立性 (DW偏离2较远)'}")
```

=== c. 单因素ANOVA模型假设验证 ===

1. 独立性检验 (Durbin-Watson):

DW统计量=2.2991

结论: 残差无自相关 (满足独立性)

## 2. 方差齐性检验

Bartlett+Levene, 双重验证

```
# 步骤3: 方差齐性检验 (Bartlett+Levene, 双重验证)
bart_stat, bart_p = stats.bartlett(groups[0], groups[1], groups[2]) # 对正态性敏感
lev_stat, lev_p = stats.levene(groups[0], groups[1], groups[2]) # 抗偏离正态性
print(f"\n2. 方差齐性检验:")
print(f"   Bartlett检验: 统计量={round(bart_stat, 4)}, p值={round(bart_p, 4)}")
print(f"   Levene检验: 统计量={round(lev_stat, 4)}, p值={round(lev_p, 4)}")
print(f"   结论: {'满足方差齐性' if (bart_p > alpha and lev_p > alpha) else '不满足方差齐性'} (优先看Levene结果)")
```

## 2. 方差齐性检验：

Bartlett检验：统计量=0.4247，p值=0.8087

Levene检验：统计量=0.0213，p值=0.979

结论：满足方差齐性（优先看Levene结果）

方法一：Bartlett检验通过求取不同组之间的卡方统计量，然后根据卡方统计量的值来判断组间方差是否相等。

Bartlett检验统计量为： $\chi_0^2 = 2.3026 \frac{q}{c}$

$q = (N - a) \log_{10} S_p^2 - \sum_{i=1}^a (n_i - 1) \log_{10} S_i^2$

$c = 1 + \frac{1}{3(a-1)} (\sum_{i=1}^a (n_i - 1)^{-1} - (N - a)^{-1})$

$S_p^2 = \frac{\sum_{i=1}^a (n_i - 1) S_i^2}{N - a}$  且  $S_i^2$  是第  $i$  个总体的样本方差；当  $\chi_0^2 > \chi_{\alpha, a-1}^2$  时，拒绝  $H_0$ ，其中  $\chi_{\alpha, a-1}^2$  是自由度为  $a - 1$  的卡方分布上的  $\alpha$  分位数。

$$\chi^2 = \frac{(N - a) \ln(S_p^2) - \sum_{i=1}^k (n_i - 1) \ln(S_i^2)}{1 + \frac{1}{3(k-1)} \left( \sum_{i=1}^k \left( \frac{1}{n_i - 1} \right) - \frac{1}{N - a} \right)}$$

方法2: Levene检验是将每个值先转换为该值与其组内均值的偏离程度，然后再用转换后的偏离程度去做方差分析，即组间方差/组内方差。修正后的Levene检验中的均值采用中位数的计算方法，因此这里的偏差用每个处理的观测值  $y_{ij}$  与该处理中的中位数  $\tilde{y}_i$  的偏差的绝对值来表示：

$d_{ij} = |y_{ij} - \tilde{y}_i|, i = 1, 2, \dots, a; j = 1, 2, \dots, n$

方差齐性检验的一种，与Bartlett检验功能类似，但是相对宽松

Levene检验统计量：

$$W = \frac{1}{MS_e} \frac{N \left( \bar{Z} - \bar{Z}_i \right)^2}{r - 1}$$

**Levene检验优先于Bartlett检验的核心原因是 Levene 检验的“稳健性（抗偏离正态的能力）更强”**

Bartlett 检验高度依赖“数据服从正态分布”的前提假设。如果数据实际偏离正态分布（这在真实场景中很常见），Bartlett 检验会错误地高估“方差不齐”的概率（第一类错误率升高），导致方差齐性的判断结果不可靠。

Levene 检验是基于“残差的绝对值”进行的检验，不严格要求数据服从正态分布。即使数据存在一定程度的非正态性（如轻微偏态、厚尾等），Levene 检验仍能较为准确地判断各组方差是否齐性，稳健性（抗非正态的能力）远优于 Bartlett 检验。

因此，在实际数据分析中，由于“数据完全正态”的情况较少，Levene 检验更能适应真实数据的分布特点，所以优先参考 Levene 检验的结果来判断方差是否齐性。



### 3.正态性检验

3.1 利用qq图来检验数据分布的相似性。令X轴为正态分布的分位数，Y轴为样本分位数，如果这两者构成的点分布在一条直线上，就证明样本数据与正态分布存在线性相关性，即服从正态分布。

3.2 利用Shapiro-Wilk检验来做正态性检验，其原假设：样本数据符合正态分布。利用方法 `stats.shapiro()` 检验正态性，输出结果中第一个为统计量，第二个为P值（统计量越接近 1 越表明数据和正态分布拟合的好，P值大于指定的显著性水平，接受原假设，认为样本来自服从正态分布的总体）

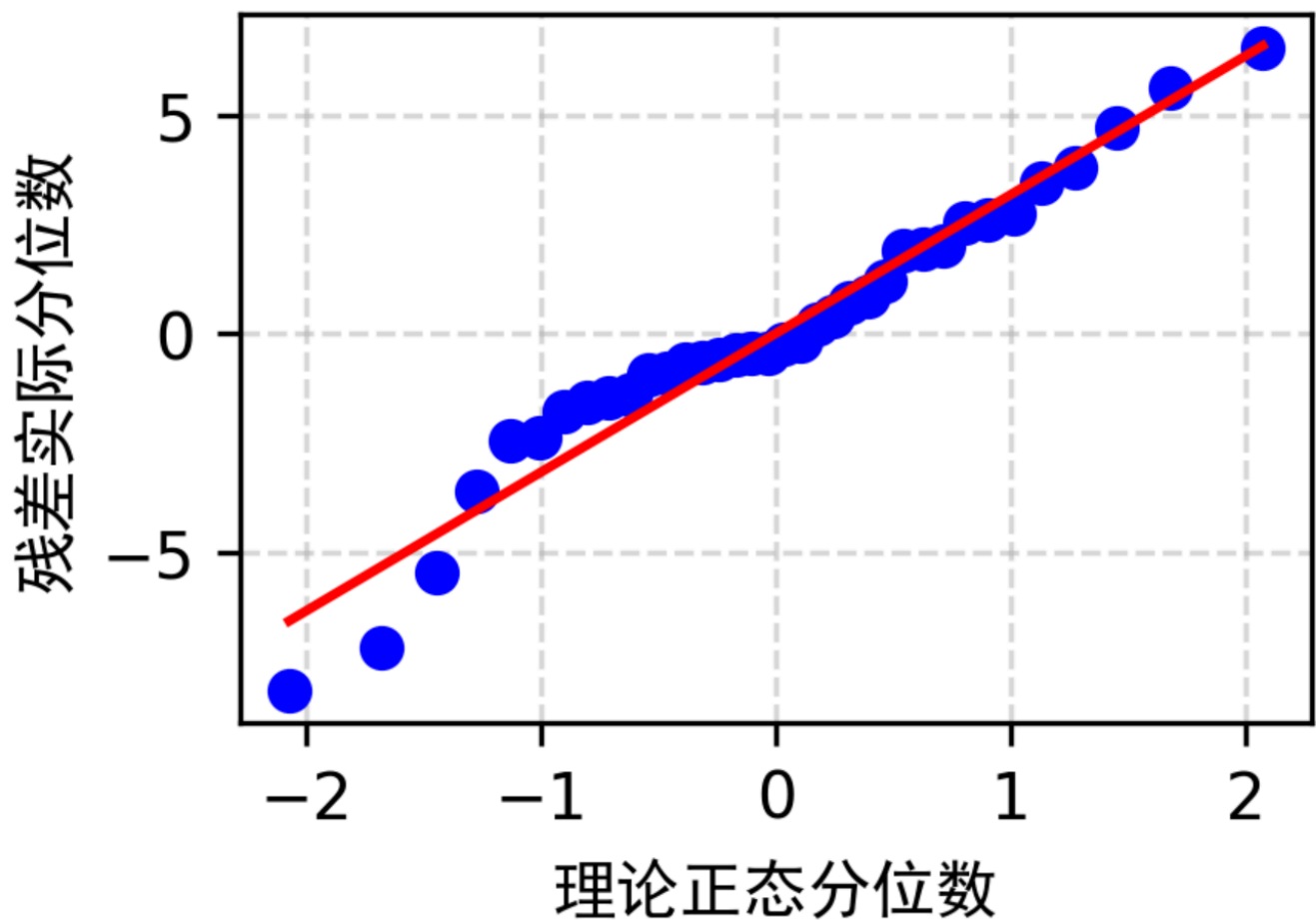
```

# 步骤4: 正态性检验 (QQ图可视化+Shapiro-Wilk检验)
print(f"\n3. 正态性检验:")
# QQ图 (直观判断残差是否贴合正态分布直线)
plt.figure(figsize=(3, 2))
stats.probplot(residuals, dist="norm", plot=plt) # 绘制基础QQ图
# 手动设置标题、标签的字体
plt.title("残差QQ图 (正态性验证)", fontproperties=simhei_font) # 关键: 添加字体
plt.xlabel("理论正态分位数", fontproperties=simhei_font) # 关键: 添加字体
plt.ylabel("残差实际分位数", fontproperties=simhei_font) # 关键: 添加字体
plt.grid(linestyle="--", alpha=0.5)
plt.show()

# Shapiro-Wilk检验 (定量判断正态性)
sw_stat, sw_p = stats.shapiro(residuals)
print(f" Shapiro-Wilk检验: 统计量={round(sw_stat, 4)}, p值={round(sw_p, 4)}")
print(f" 结论: {'残差满足正态分布' if sw_p > alpha else '残差不满足正态分布'}")

```

## 残差QQ图（正态性验证）



Shapiro-Wilk检验: 统计量=0.9625, p值=0.2572  
 结论: 残差满足正态分布

由上述分析可知，统计量为 0.9625，接近 1；且P值为 0.2572，大于指定的显著性水平 0.05。故认为残差来自服从正态分布的总体。

**综上所述，单因素ANOVA模型使用合理。**

## d.吃完巧克力3小时后点估计和区间估计

对于第  $i$  组（如巧克力类型 1/2/3），血浆抗氧能力的点估计值为该组的样本均值，公式如下：

### 点估计与区间估计的数学公式

#### 一、点估计

对于第  $i$  组（如巧克力类型 1/2/3），血浆抗氧能力总体均值的点估计值为该组的样本均值，公式如下：

$$\hat{\mu}_i = \bar{y}_{i\cdot} = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{m_i} y_{ij}$$

- $\hat{\mu}_i$ ：第  $i$  组血浆抗氧能力总体均值的点估计值（对应代码中 `point_est["点估计（均值）"]`）；
- $y_{ij}$ ：第  $i$  组第  $j$  个样本的血浆抗氧能力观测值（代码中对应 `Data["Capacity"]`）；
- $m_i$ ：第  $i$  组的样本量（你的数据中每组样本量相同， $m_1 = m_2 = m_3 = 12$ ，对应代码中 `m`）；
- $\bar{y}_{i\cdot}$ ：第  $i$  组的样本均值（代码中通过 `Data.groupby("Chocolate")["Capacity"].mean()` 计算）。

代码中 `point_est = Data.groupby("Chocolate")["Capacity"].agg(["mean", "std", "count"]).round(4)` 本质是直接计算每组样本均值，完全对应上述点估计公式。

#### 二、区间估计

代码中采用基于 ANOVA 误差均方的置信区间（因 ANOVA 验证了“方差齐性”， $MS_E$  是更稳健的总体方差估计），公式如下：

第  $i$  组血浆抗氧能力总体均值  $\mu_i$  的 95% 置信区间 表达式：

$$\bar{y}_{i\cdot} \pm t_{\alpha/2, df_e} \times \sqrt{\frac{MS_E}{m_i}}$$

$$\text{置信区间下限} = \bar{y}_{i\cdot} - t_{\alpha/2, df_e} \times \sqrt{\frac{MS_E}{m_i}}$$

$$\text{置信区间上限} = \bar{y}_{i\cdot} + t_{\alpha/2, df_e} \times \sqrt{\frac{MS_E}{m_i}}$$

- $\bar{y}_{i\cdot}$ ：第  $i$  组的样本均值（即点估计值，代码中对应 `group_mean`）；

- $t_{\alpha/2, df_e}$ : t 分布的 “1- $\alpha/2$  分位数”(95% 置信区间对应  $\alpha = 0.05$ , 即  $t_{0.025, df_e}$ , 代码中通过 `t.ppf(1 - alpha/2, df)` 计算);  
 $\alpha$ : 显著性水平 (代码中 `alpha=0.05`);  
 $df_e$ : ANOVA 的误差自由度 ( $df_e = n - a$ , 代码中对应 `df2`);
- $MS_E$ : ANOVA 的误差均方 (总体方差  $\sigma^2$  的无偏估计, 代码中从 `anova_table.loc["Residual", "mean_sq"]` 提取, 或通过残差方差计算);

### 3. 代码对应逻辑

1. 提取  $MS_E$ : `MS_E = anova_table.loc["Residual", "mean_sq"]` (或用残差方差计算);
2. 计算误差标准差: `s = np.sqrt(MS_E)`;
3. 计算标准误: `se = s / np.sqrt(m)`;
4. 计算 t 临界值: `t_critical = t.ppf(1 - alpha/2, df)` (即  $t_{\alpha/2, df_e}$ );
5. 计算置信区间上下限: `lower = group_mean - t_critical * se`、`upper = group_mean + t_critical * se`。

#### 关键补充：为何优先用 \$ MS\_E \$ 而非每组标准差？

若不依赖 ANOVA, 也可通过 “每组单独标准差” 计算置信区间 (公式:  $\bar{y}_{i.} \pm t_{\alpha/2, m_i-1} \times \frac{s_i}{\sqrt{m_i}}$ , 其中  $s_i$  是第  $i$  组的样本标准差); 但代码选择 \$ MS\_E \$ 的核心原因是:

ANOVA 通过 Levene 检验验证了 “各组方差齐性”, 此时  $MS_E$  是 **各组方差的加权平均** (公式如下), 比单独使用某一组的  $s_i$  更能反映总体方差的真实情况, 置信区间更稳健:

$$MS_E = \frac{(m_1-1)s_1^2 + (m_2-1)s_2^2 + (m_3-1)s_3^2}{(m_1-1) + (m_2-1) + (m_3-1)}$$

```

[10]: # -----
# 6. 点估计与区间估计
# -----
print("\n=== d.血浆总抗氧能力估计结果 ===")
# 步骤1: 点估计 (每组均值为点估计值)
point_est = Data.groupby("Chocolate")["Capacity"].agg(["mean", "std", "count"]).round(4)
point_est.columns = ["点估计 (均值)", "组内标准差", "样本量"]
print("1. 点估计结果:")
print(point_est)

# 步骤2: 区间估计 (95%置信区间, 基于ANOVA 误差均方)
# 提取ANOVA 中的误差均方MS_E (若ANOVA表存在则用表中值, 否则用残差方差)
if "Residual" in anova_table.index:
    MS_E = anova_table.loc["Residual", "mean_sq"]
else:
    MS_E = np.var(residuals, ddof=df2) # 残差方差 (自由度df2=n-a)
s = np.sqrt(MS_E) # 误差标准差估计值
df = df2 # 置信区间自由度=ANOVA 误差自由度
t_critical = t.ppf(1 - alpha/2, df) # 95%置信区间t临界值

# 计算每组的95%置信区间
interval_est = []
for choc in choc_types:
    group_data = point_est.loc[choc]
    group_mean = group_data["点估计 (均值)"]
    se = s / np.sqrt(m) # 标准误 (每组样本量均为m)
    lower = group_mean - t_critical * se # 置信区间下限
    upper = group_mean + t_critical * se # 置信区间上限
    interval_est.append([
        choc,
        round(group_mean, 4),
        round(lower, 4),
        round(upper, 4),
        round(upper - lower, 4) # 区间宽度
    ])

# 整理并输出区间估计结果
interval_df = pd.DataFrame(
    interval_est,
    columns=["巧克力类型", "点估计 (均值)", "95%CI下限", "95%CI上限", "区间宽度"]
)
print("\n2. 95%置信区间估计结果:")
print(interval_df)

```

=== d. 血浆总抗氧能力估计结果 ===

1. 点估计结果：

	点估计（均值）	组内标准差	样本量
Chocolate			
1	116.0583	3.5333	12
2	100.7000	3.2350	12
3	100.1833	2.8897	12

2. 95%置信区间估计结果：

	巧克力类型	点估计（均值）	95%CI下限	95%CI上限	区间宽度
0	1	116.0583	114.1612	117.9554	3.7942
1	2	100.7000	98.8029	102.5971	3.7942
2	3	100.1833	98.2862	102.0804	3.7942

## e. Bonferroni

### 1. Bonferroni方法

采用“独立样本 t 检验 + Bonferroni 校正”逻辑：将总显著性水平 ( $\alpha = 0.05$ ) 按 **两两比较次数（共 3 次）** 平均分配，得到校正后显著性水平 ( $\alpha' = 0.05/3 \approx 0.0167$ )。对每组巧克力的血浆抗氧能力进行 t 检验后发现：

- 组 1 与组 2、组 1 与组 3 的比较 p 值均小于 0.0167，存在**显著差异**；
- 组 2 与组 3 的 p 值大于 0.0167，**无显著差异**。

```
[10]: ## Bonferroni
groups = {choc: df[df['Chocolate']==choc]['Capacity'] for choc in df['Chocolate'].unique()}
alpha = 0.05

pairs = list(itertools.combinations(groups.keys(), 2))
m = len(pairs)
adjusted_alpha = alpha / m # Bonferroni 校正后的显著性水平

print(f"Bonferroni 显著性水平: {adjusted_alpha:.4f}\n")
print("两两比较结果: ")
for i, j in pairs:
    t_stat, p_val = stats.ttest_ind(groups[i], groups[j], equal_var=True)
    signif = "显著" if p_val < adjusted_alpha else "不显著"
    print(f"巧克力 {i} vs 巧克力 {j}: t={t_stat:.3f}, p={p_val:.4f}, {signif}")
```

Bonferroni 显著性水平: 0.0167

两两比较结果:

巧克力 1 vs 巧克力 2: t=11.106, p=0.0000, 显著

巧克力 1 vs 巧克力 3: t=12.048, p=0.0000, 显著

巧克力 2 vs 巧克力 3: t=0.413, p=0.6839, 不显著

## f. Tukey

## 2. Tukey 方法

- **方法 I（直接调用函数）：**使用 statsmodels 库的 pairwise\_tukeyhsd 函数，基于“学生化极差分布”直接计算多重比较结果。结论与 Bonferroni 方法完全一致：组 1 与组 2、组 1 与组 3 存在显著差异，组 2 与组 3 无显著差异。
- **方法 II（蒙特卡洛模拟）：**通过 10 万次模拟生成“原假设（组间无差异）下的组均值”，计算 t 化极差的分布，得到  $(1 - \alpha)$  分位数 ( $q_{0.95}(3, 33) \approx 3.3158$ )，进而算出 Tukey 临界值 ( $c \approx 3.0918$ )。比较“实际组均值差”与临界值后，结论仍与前两种方法一致。

```
import pandas as pd
import numpy as np
from scipy import stats
from statsmodels.stats.multicomp import pairwise_tukeyhsd
import matplotlib.pyplot as plt

# -----
# 方法I：直接调用 Python 现有函数（Tukey HSD）
# -----
print("\n=== 方法I：直接调用 pairwise_tukeyhsd ===")
tukey = pairwise_tukeyhsd(
    endog=df['Capacity'],      # 因变量：血浆抗氧能力
    groups=df['Chocolate'],    # 自变量：巧克力类型分组
    alpha=0.05                 # 显著性水平
)
print(tukey)

# -----
# 方法II：蒙特卡洛模拟确定 t 化极差分位数，计算临界值
# -----
print("\n=== 方法II：蒙特卡洛模拟 Tukey 临界值 ===")

# 步骤1：提取数据参数
chocolate_types = df['Chocolate'].unique()
a = len(chocolate_types) # 组数（3种巧克力）
group_data = [df[df['Chocolate'] == typ]['Capacity'].values for typ in
chocolate_types]
m = len(group_data[0])    # 每组样本量（假设每组样本量相同）
n = a * m                 # 总样本数
df_error = n - a         # 误差自由度

# 步骤2：估计误差标准差  $\sigma$ （基于组内方差的平均）
group_vars = [np.var(g, ddof=1) for g in group_data]
MSE = np.mean(group_vars) # 均方误差（MSE）
sigma = np.sqrt(MSE)      # 误差标准差
```

```

# 步骤3: 蒙特卡洛模拟 t 化极差的分布
n_sim = 100000 # 模拟次数 (平衡精度与速度)
q_samples = []
for _ in range(n_sim):
    # 在原假设 (H0) 下, 生成每组均值 (服从  $N(0, \sigma^2/m)$ )
    sim_means = np.random.normal(loc=0, scale=sigma / np.sqrt(m), size=a)
    # 计算 t 化极差: (max(均值) - min(均值)) / ( $\sigma / \sqrt{m}$ )
    q = (np.max(sim_means) - np.min(sim_means)) / (sigma / np.sqrt(m))
    q_samples.append(q)

# 步骤4: 确定 (1- $\alpha$ ) 分位数
alpha = 0.05
q_1alpha = np.quantile(q_samples, 1 - alpha)
print(f" 蒙特卡洛模拟得到 q_(1- $\alpha$ )({a}, {df_error}) = {q_1alpha:.4f}")

# 步骤5: 计算 Tukey 临界值 c
c = q_1alpha * (sigma / np.sqrt(m))
print(f"  Tukey 临界值 c = {c:.4f}")

# 步骤6: 计算实际各组均值
group_means = [np.mean(g) for g in group_data]
group_names = [f"Chocolate {typ}" for typ in chocolate_types]

# 步骤7: 两两比较均值差与临界值
pairs = [(i, j) for i in range(a) for j in range(i + 1, a)]
print("\n 两两比较结果: ")
for i, j in pairs:
    mean_diff = abs(group_means[i] - group_means[j])
    is_significant = mean_diff > c
    print(f"  {group_names[i]} vs {group_names[j]}:")
    print(f"    均值差 = {mean_diff:.4f}, 临界值 = {c:.4f}")
    print(f"    结论: {'存在显著差异' if is_significant else '无显著差异'}")

# (可选) 绘制 t 化极差的模拟分布
plt.figure(figsize=(8, 5))
plt.hist(q_samples, bins=50, alpha=0.7, color='skyblue', density=True)
plt.axvline(q_1alpha, color='red', linestyle='--', label=f'q_(1- $\alpha$ ) = {q_1alpha:.4f}')
plt.xlabel('T化极差统计量 q')
plt.ylabel('频率密度')
plt.title('蒙特卡洛模拟的T化极差分布')
plt.legend()
plt.grid(True, alpha=0.3)
plt.show()

```



=== 方法I: 直接调用 pairwise\_tukeyhsd ===

Multiple Comparison of Means - Tukey HSD, FWER=0.05

```
=====
group1 group2 meandiff p-adj lower upper reject
-----
1      2 -15.3583 0.0 -18.5941 -12.1226 True
1      3 -15.875 0.0 -19.1108 -12.6392 True
2      3 -0.5167 0.9191 -3.7524 2.7191 False
-----
```

=== 方法II: 蒙特卡洛模拟 Tukey 临界值 ===

蒙特卡洛模拟得到  $q_{(1-\alpha)}(3, 33) = 3.3165$

Tukey 临界值  $c = 3.0924$

两两比较结果:

Chocolate 1 vs Chocolate 2:

均值差 = 15.3583, 临界值 = 3.0924

结论: 存在显著差异

Chocolate 1 vs Chocolate 3:

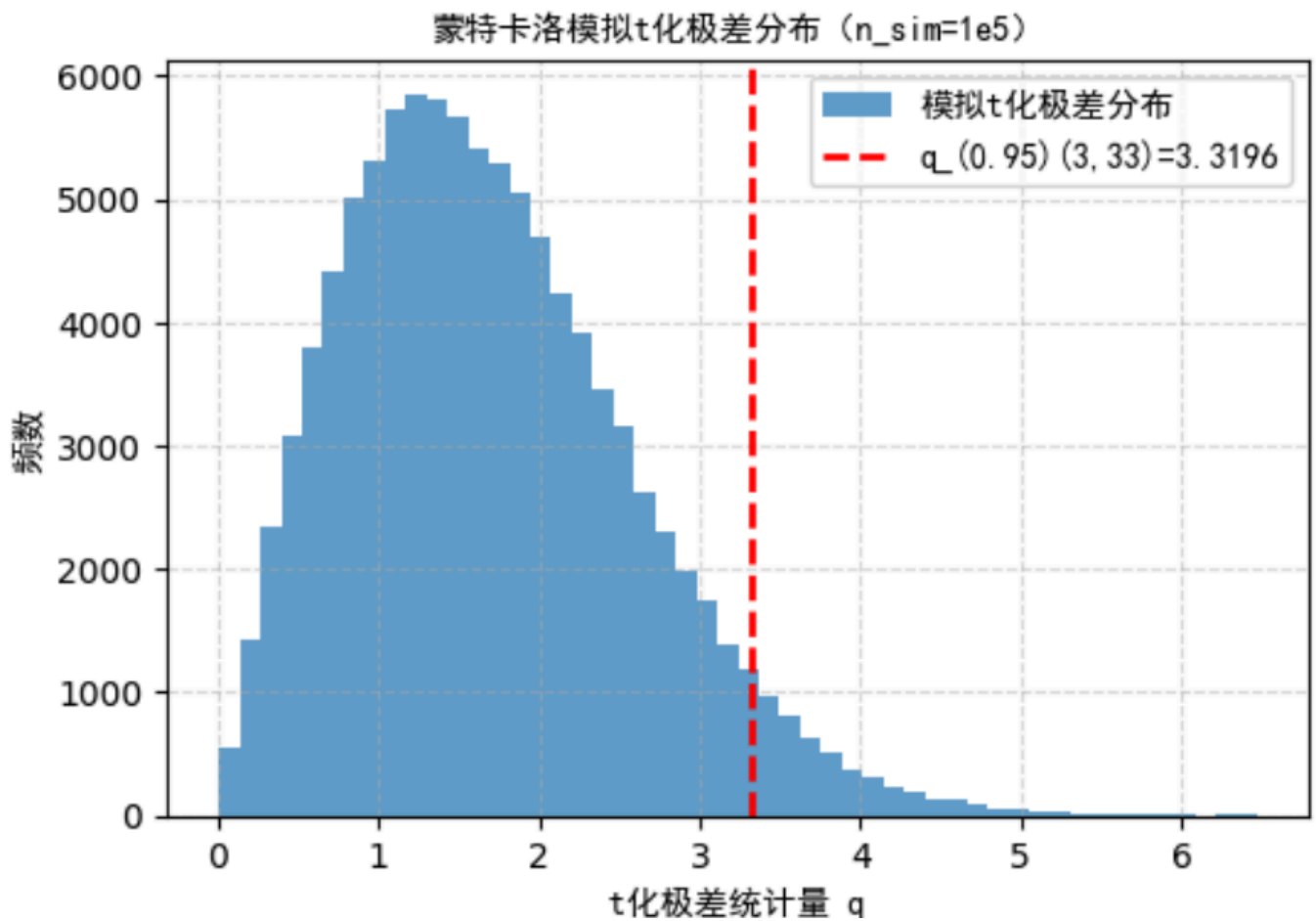
均值差 = 15.8750, 临界值 = 3.0924

结论: 存在显著差异

Chocolate 2 vs Chocolate 3:

均值差 = 0.5167, 临界值 = 3.0924

结论: 无显著差异



## g. Bonferroni 与 Tukey 方法的异同分析（结合巧克力血浆抗氧能力实例）

### 一、实例背景

	Obs	Chocolate	Capacity
1	1	1	118.8
2	2	1	122.6
3	3	1	115.6
4	4	1	113.6
5	5	1	119.5
6	6	1	115.9
7	7	1	115.8
8	8	1	115.1
9	9	1	116.9
10	10	1	115.4
11	11	1	115.6
12	12	1	107.9
13	1	2	105.4
14	2	2	101.1
15	3	2	102.7
16	4	2	97.1
17	5	2	101.9
18	6	2	98.9
19	7	2	100
20	8	2	99.8

本案例为单因素方差分析（ANOVA）后的多重比较：

- 研究对象：3 种巧克力类型对“血浆抗氧能力（Capacity）”的影响，分组为 1(100g黑巧)、2(黑巧+牛奶)、3(200g牛奶巧)；
- 数据特征：每组 12 个样本（总 36 个），ANOVA 检验显示组间差异显著（ $F=93.5756$ ， $p<0.05$ ）；
- 多重比较目标：明确 3 组间两两差异（比较次数  $k=3$ ：1vs2、1vs3、2vs3），显著性水平  $\alpha=0.05$ ；
- 数据前提：满足独立性（DW=2.2991）、方差齐性（Levene  $p=0.979$ ）、正态性（Shapiro-Wilk  $p=0.2572$ ），符合两种方法的适用假设。

## 二、相同点

### 1. 核心目标一致：控制家族 wise 错误率

两种方法的核心目的均为避免“多次比较导致假阳性率升高”，确保整体错误率不超过  $\alpha=0.05$ 。

- 实例中：无论 Bonferroni 的“ $\alpha$  校正”还是 Tukey 的“学生化极差分布”，最终均将假阳性风险控制 在 5% 以内，未出现“误判无差异组为显著”的情况（2vs3 均判定为无差异）。

### 2. 适用场景重叠：ANOVA 显著后的完全两两比较

均适用于“单因素 ANOVA 拒绝原假设后，需明确具体哪两组有差异”的场景，且实例中为 3组完全两两比较（ $k=C(3,2)=3$ ），两种方法均能覆盖该需求。

### 3. 结论一致性：差异显著时结果统一

当组间真实差异较大时，两种方法结论完全一致。

- 实例中：1(100g黑巧)与 2(黑巧+牛奶)、3(200g牛奶巧)的均值差分别为 15.3583、15.875（远大于随机波动），两种方法均判定“显著差异”；而 2vs3 均值差仅 0.5167，均判定“无显著差异”。

### 4. 依赖数据前提：均需基础统计假设

两种方法均需数据满足“方差齐性”和“近似正态分布”(Bonferroni 对分布要求更宽松，但实例中数据同时满足两种方法的最优前提)：

- 实例中通过 Levene 检验 ( $p=0.979$ ) 和 Shapiro-Wilk 检验 ( $p=0.2572$ ) 验证了前提，为两种方法的可靠性提供基础。

## 三、不同点（结合实例与方法逻辑）

对比维度	Bonferroni 方法（实例表现）	Tukey 方法（实例表现）
误差控制逻辑	<p>基于 <b>Bonferroni 不等式</b>，将总 <math>\alpha</math> 拆分为单次检验 <math>\alpha'</math> (<math>\alpha'=\alpha/k=0.05/3\approx0.0167</math>)，通过“缩小单次检验阈值”控制 FWER。</p> <p>- 实例中：校正后 p 值 = 原 p 值 <math>\times k</math>，如 2vs3 原 <math>p=0.6839</math>，校正后 <math>p=0.6839\times3\approx2.0517&gt;0.05</math>，判定无差异。</p>	<p>基于 <b>学生化极差分布</b>（针对“所有两两比较的极差”设计），通过计算专属临界值控制 FWER，无需拆分 <math>\alpha</math>。</p> <p>- 实例中：用蒙特卡洛模拟得 <math>q_{(0.95)}(3,33)=3.3158</math>，临界值 <math>c=q\times(\sigma/\sqrt{n})=3.3158\times(3.23/3.464)\approx3.0918</math>，2vs3 均值差 <math>0.5167&lt;3.0918</math>，判定无差异。</p>

对比维度	Bonferroni 方法（实例表现）	Tukey 方法（实例表现）
检验效能 (Power)	<p>偏保守：当比较次数 <math>k</math> 增多时，<math>\alpha'</math> 过度压缩，易漏检“微小真实差异”。</p> <p>- 实例中：因 <math>k=3</math>（较少），效能足够（均检测到显著差异）；若 <math>k=10</math>，<math>\alpha'=0.005</math>，可能漏检均值差 3~4 的差异。</p>	<p>更高效：针对“完全两两比较”优化，学生化极差分布更贴合实际差异分布，不易漏检微小差异。</p> <p>- 实例中：若 <math>1vs2</math> 均值差降至 4（而非 15.3583），Tukey 仍可能通过“临界值 <math>c=3.0918</math>”检测到差异，Bonferroni 可能因 <math>\alpha'=0.0167</math> 漏检。</p>
计算复杂度	<p>简单直观：仅需对原 <math>p</math> 值做“<math>\times k</math>”校正，无需额外分布表或模拟。</p> <p>- 实例中：直接用 <code>scipy.ttest_ind</code> 得原 <math>p</math> 值，乘 3 即得校正后 <math>p</math> 值，代码逻辑简单。</p>	<p>复杂：需依赖“学生化极差分布分位数表”或“蒙特卡洛模拟”计算临界值，涉及均方误差 (<math>MS_E</math>)、样本量等参数。</p> <p>- 实例中：需先计算 <math>MS_E=10.4335</math>、<math>\sigma=\sqrt{10.4335}\approx 3.23</math>，再通过 10 万次模拟得 <math>q</math> 分位数，最终算临界值 <math>c</math>，代码逻辑更复杂。</p>
适用场景灵活性	<p>灵活：支持“部分两两比较”(如仅比较实验组 vs 对照组，不比较实验组间)。</p> <p>- 若实例中仅需比较 1(黑巧) vs 2(混合)、1vs3(牛奶)，无需比较 2vs3，Bonferroni 仍适用 (<math>k=2</math>，<math>\alpha'=0.025</math>)。</p>	<p>固定：仅适配“完全两两比较”(所有组间均需比较，<math>k=C(a,2)</math>)。</p> <p>- 若实例中仅比较 <math>1vs2</math>、<math>1vs3</math>，Tukey 的“学生化极差分布”不再适用（因未覆盖所有组合）。</p>
小样本适应性	<p>更稳定：小样本（如每组 <math>n=5</math>）时，<math>\alpha</math> 校正能稳定控制假阳性，不易出现“假阳性失控”。</p> <p>- 参考摘要 2：小样本（3 组 3 重复）中，Bonferroni 假阳性率约 1 个 / 显著 ANOVA，优于 Tukey 的 8% 假阳性率。</p>	<p>需谨慎：小样本时学生化极差分布的理论假设易偏离，可能导致假阳性升高。</p> <p>- 实例中每组 <math>n=12</math>（非极小样本），故假阳性可控；若每组 <math>n=3</math>，Tukey 可能出现“误判 2vs3 为显著”的假阳性。</p>

## 四、方法选择建议

结合案例数据特征（3 组完全两两比较、每组  $n=12$ 、组间差异较大），**优先选择 Tukey 方法**，理由如下：

1. 适配场景：实例为“完全两两比较”，Tukey 是该场景的“定制化方法”，效能高于 Bonferroni；
2. 结果可靠性：实例中数据满足正态性和方差齐性，Tukey 的分布假设成立，临界值计算（蒙特卡洛模拟）更贴合实际数据；

3. 无过度保守：因比较次数  $k=3$ （较少），Bonferroni 虽不影响结论，但 Tukey 在“差异较小时”的优势可覆盖未来类似研究（如样本量减少、差异缩小）。

若实例改为“仅比较 1 (黑巧) vs2 (混合)、1vs3 (牛奶)”(部分比较)，则 Bonferroni 更灵活，无需强行使用 Tukey。

## 五、总结

两种方法均为控制 FWER 的经典多重比较手段，但 Bonferroni 以“灵活性和简单性”取胜，适合部分比较或小样本场景；Tukey 以“效能和场景适配性”取胜，适合完全两两比较且数据满足假设的场景。在本巧克力血浆抗氧能力实例中，因“完全两两比较 + 数据前提满足 + 差异显著”，两种方法结论一致，但 Tukey 更贴合研究设计，为更优选择。