统计与机器学习

第一章：方差分析

倪 葎

DaSE@ECNU
(lni@dase.ecnu.edu.cn)

目录

目录

回顾：二样本独立 t 检验

概述

检验两组数据的分布是否一致

在介绍单因子方差分析的问题之前，我们先回顾一类单因子方差分析的特殊情况——二样本独立 t 检验。

- 目的：比较两个方差相等的独立正态分布的均值；
- 数据：

$$\text{样本 } 1: x_{11}, x_{12}, \cdots, x_{1m_1},$$
$$\text{样本 } 2: x_{21}, x_{22}, \cdots, x_{2m_2}.$$

正态分布的假定下

- 假定 x_{ij} 是独立的随机变量，其分布为 $N(\mu_i, \sigma^2)$，
  - μ_i 表示第 i 组的总体均值；
  - σ^2 表示总体方差，是一个未知常数；
  - $i = 1, 2$；
  - $j = 1, 2, \cdots, m_i$；

回顾：二样本独立 t 检验

概述

在介绍单因子方差分析的问题之前，我们先回顾一类单因子方差分析的特殊情况——二样本独立 t 检验。

- 假设检验问题为

显著性检验：第一类错误发生的概率不超过alpha

$$H_0 : \mu_1 = \mu_2 \quad \text{vs} \quad H_1 : \mu_1 \neq \mu_2.$$

- 检验统计量为

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{s_w \sqrt{\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}}}$$

- $\bar{x}_1 = m_1^{-1} \sum_{j=1}^{m_1} x_{1j}$ 表示第一组样本均值；
- $s_1^2 = (m_1 - 1)^{-1} \sum_{j=1}^{m_1} (x_{1j} - \bar{x}_1)^2$ 表示该组样本方差；
- $\bar{x}_2 = m_2^{-1} \sum_{j=1}^{m_2} x_{2j}$ 表示第二组样本样本均值；
- $s_2^2 = (m_2 - 1)^{-1} \sum_{j=1}^{m_2} (x_{2j} - \bar{x}_2)^2$ 表示该组样本方差；

回顾：二样本独立 t 检验

概述

- 合方差

$$
\begin{aligned}
s_w^2 &= (m_1+m_2-2)^{-1}((m_1-1)s_1^2+(m_2-1)s_2^2) \\
&= \frac{(m_1-1)}{(m_1+m_2-2)}\cdot s_1^2+\frac{(m_2-1)}{(m_1+m_2-2)}\cdot s_2^2
\end{aligned}
$$

  可看作 s_1^2 和 s_2^2 的加权平均数。
- s_w 是合方差的平方根，即

$$
s_w=\sqrt{s_w^2}
$$

- 问题：
  - s_w^2 是用来估计什么的? 两组数据相同的方差sigma
  - s_w^2 的分布是什么? 卡方

回顾：二样本独立 t 检验

概述

- 检验统计量

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{s_w\sqrt{\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}}} \overset{H_0}{\sim} t(m_1 + m_2 - 2)$$

- 二样本独立 t 检验由此得名。
- 特别地，当 $m_1 = m_2 = m$ 时，检验统计量可简化为

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{1}{m}(s_1^2 + s_2^2)}}$$

- 原假设成立时，检验统计量 t 服从自由度为 $2(m-1)$ 的 t 分布；

回顾：二样本独立 t 检验

概述

在显著性水平 α 下，

- 拒绝域法：

$$W = \{|t| \geq t_{1-\alpha/2}(2(m-1))\}$$

  其中，$t_\alpha(2m-1))$ 为自由度为 $2(m-1)$ 的 t 分布的 α 分位数。

- p 值法：越小越显著，越小越拒绝

$$p = 2P(t > |t_0|)$$

  其中，t 表示自由度为 $2(m-1)$ 的 t 分布的随机变量，t_0 是通过样本计算的检验统计量；

回顾：二样本独立 t 检验

例子

- 现有两种为期六周的减肥计划；
- 我们分别用 A 和 B 来表示；
- 选取了 48 名志愿者，随机被分配一种减肥计划，每组有 $m = 24$ 名志愿者；
- 研究者记录了所有志愿者未参加减肥计划时的初始体重，以及参与减肥计划六周后的最终体重；
- 问题：研究者想知道这两种减肥计划的效果是否一致。

回顾：二样本独立 t 检验

例子

表 1.1: 减肥计划的数据

序号	减肥计划	体重		序号	减肥计划	体重	
		初始	最终			初始	最终
1	A	58	54.2	25	B	58	60.1
2	A	60	54.0	26	B	58	56.0
3	A	64	63.3	27	B	59	57.3
4	A	64	61.1	28	B	61	56.7
5	A	65	62.2	29	B	63	62.4
6	A	66	64.0	30	B	63	60.3
7	A	67	65.0	31	B	63	59.4
8	A	69	60.5	32	B	65	62.0
9	A	70	68.1	33	B	66	64.0
10	A	70	66.9	34	B	68	63.8
11	A	71	71.6	35	B	68	63.3
12	A	72	70.5	36	B	71	66.8
13	A	72	69.0	37	B	75	72.6
14	A	72	68.4	38	B	75	69.2
15	A	72	70.9	39	B	76	72.7
16	A	74	69.5	40	B	76	72.5
17	A	78	73.9	41	B	77	77.5
18	A	80	71.0	42	B	78	72.7
19	A	80	77.6	43	B	78	76.3
20	A	82	81.1	44	B	79	73.6
21	A	83	79.1	45	B	79	72.9
22	A	85	81.5	46	B	79	71.1
23	A	87	81.9	47	B	80	81.4
24	A	88	84.5	48	B	80	75.7

回顾：二样本独立 t 检验

例子

表 1.2: 计算后减肥计划的数据

序号	减肥计划	体重 初始	体重 最终	体重 差异	序号	减肥计划	体重 初始	体重 最终	体重 差异
1	A	58	54.2	-3.8	25	B	58	60.1	2.1
2	A	60	54.0	-6.0	26	B	58	56.0	-2.0
3	A	64	63.3	-0.7	27	B	59	57.3	-1.7
4	A	64	61.1	-2.9	28	B	61	56.7	-4.3
5	A	65	62.2	-2.8	29	B	63	62.4	-0.6
6	A	66	64.0	-2.0	30	B	63	60.3	-2.7
7	A	67	65.0	-2.0	31	B	63	59.4	-3.6
8	A	69	60.5	-8.5	32	B	65	62.0	-3.0
9	A	70	68.1	-1.9	33	B	66	64.0	-2.0
10	A	70	66.9	-3.1	34	B	68	63.8	-4.2
11	A	71	71.6	0.6	35	B	68	63.3	-4.7
12	A	72	70.5	-1.5	36	B	71	66.8	-4.2
13	A	72	69.0	-3.0	37	B	75	72.6	-2.4
14	A	72	68.4	-3.6	38	B	75	69.2	-5.8
15	A	72	70.9	-1.1	39	B	76	72.7	-3.3
16	A	74	69.5	-4.5	40	B	76	72.5	-3.5
17	A	78	73.9	-4.1	41	B	77	77.5	0.5
18	A	80	71.0	-9.0	42	B	78	72.7	-5.3
19	A	80	77.6	-2.4	43	B	78	76.3	-1.7
20	A	82	81.1	-0.9	44	B	79	73.6	-5.4
21	A	83	79.1	-3.9	45	B	79	72.9	-6.1
22	A	85	81.5	-3.5	46	B	79	71.1	-7.9
23	A	87	81.9	-5.1	47	B	80	81.4	1.4
24	A	88	84.5	-3.5	48	B	80	75.7	-4.3

回顾：二样本独立 t 检验

例子

- 令 x_{1j} 表示减肥计划 A 六周前后的体重差异，x_{2j} 表示减肥计划 B 六周前后的体重差异，$j = 1, 2, \cdots, 24$;
- 假设

$$x_{ij} \overset{\text{独立}}{\sim} N(\mu_i, \sigma^2), \quad i = 1, 2, j = 1, 2, \cdots, 24.$$

- 检验问题为

$$H_0 : \mu_1 = \mu_2 \quad \text{vs} \quad H_1 : \mu_1 \neq \mu_2$$

- 我们可以计算

$$\bar{x}_1 = -3.3000, \quad s_1^2 = 5.0183;$$
$$\bar{x}_2 = -3.1125, \quad s_2^2 = 5.7072;$$

回顾：二样本独立 t 检验

例子

- 合方差为

$$s_w^2 = 5.3627$$

- 检验统计量为

应该服从t分布

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{s_w\sqrt{\frac{2}{m}}} = -0.2805.$$

- 取显著性水平 $\alpha = 0.05$。
- 拒绝域为

t分布根据0对称，有较大概率（1-alpha）落在这个部分

$$\{|t| \geq t_{1-\alpha/2}(2m-2)\} = \{|t| \geq 2.0129\}$$

- 我们认为这两种减肥计划的效果是一致的。

单因子方差分析的模型及假设

动机

- 如果需要比较三种减肥方式是否一致?

单因子方差分析的模型及假设

定义

- **响应变量**：我们关心的随机变量，一般用 y 表示；
- **因子**：引发响应变量 y 大小变化的因素，一般用大写字母表示，例如：A，有 a 种不同的取值，通常 $a \geq 2$；称因子 A 的一种取值为一个水平或一个处理；
- **重复次数**：在因子 A 每个水平下，随机变量的个数，记为 m；
- 在例子（两种减肥方案的比较）中，
  - 减肥计划前后的体重差作为响应变量；
  - 减肥计划为所关心的因子，$a = 2$；
  - 每组有 24 名志愿者，即 $m = 24$；
  - 样本量 $n = am = 48$；

单因子方差分析的模型及假设

定义

- 数据的结构为

水平	观测到的响应				总和	均值
1	y_{11}	y_{12}	$\cdots$	y_{1m}	$y_{1\cdot}$	$\bar{y}_{1\cdot}$
2	y_{21}	y_{22}	$\cdots$	y_{2m}	$y_{2\cdot}$	$\bar{y}_{2\cdot}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
a	y_{a1}	y_{a2}	$\cdots$	y_{am}	$y_{a\cdot}$	$\bar{y}_{a\cdot}$
汇总					$y_{\cdot\cdot}$	$\bar{y}_{\cdot\cdot}$

- y_{ij} 表示在第 i 个水平下观测到的第 j 个响应变量;
- $y_{i\cdot}$ 表示在第 i 个水平下响应变量的总和;
- $\bar{y}_{i\cdot}$ 表示在第 i 个水平下响应变量的均值;
- $y_{\cdot\cdot}$ 表示所有响应变量的总和;
- $\bar{y}_{\cdot\cdot}$ 表示所有响应变量的均值。

单因子方差分析的模型及假设

定义

- 这些符号之间的关系为

$$y_{i\cdot} = \sum_{j=1}^{m} y_{ij} \quad \bar{y}_{i\cdot} = \frac{y_{i\cdot}}{m} \quad i = 1, 2, \cdots, a$$

$$y_{\cdot\cdot} = \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{m} y_{ij} \quad \bar{y}_{\cdot\cdot} = \frac{y_{\cdot\cdot}}{n}$$

单因子方差分析的模型及假设

模型：均值模型

- 方差分析模型的一般形式为

$$y_{ij} = \mu_i + \varepsilon_{ij}, \begin{cases} i = 1, 2, \cdots, a \\ j = 1, 2, \cdots, m \end{cases}$$

i表示因子

  - y_{ij} 表示在因子的第 i 种水平下所观测到的第 j 个响应变量；
  - μ_i 表示因子的第 i 个水平下的均值；每一个mu不完全相同，这样才能表示因子不相同
  - ε_{ij} 是随机误差；通常认为随机误差的期望为零，即 $E(\varepsilon_{ij}) = 0$。

参数可识别性

- 很明显的结果为 $E(y_{ij}) = \mu_i, j = 1, 2, \cdots, m$
- 称这个模型为**均值模型**。均值只跟减重方案有关系

单因子方差分析的模型及假设

模型：效应模型

- 令

$$\mu_i = \mu + \alpha_i, i = 1, 2, \cdots, a.$$

- 方差分析模型的另一种形式为

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij}, \begin{cases} i = 1, 2, \cdots, a \\ j = 1, 2, \cdots, m \end{cases}$$

- 称这个模型为**效应模型**。mu和减重方案无关，是人本身要下降的体重，alpha_i是方案的效应值

单因子方差分析的模型及假设

说明

- 相比于均值模型，效应模型参数个数有所增加。
- 为了避免参数无法识别的问题，我们通常需要对参数 $(\mu, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_a)$ 给出一个合理的约束。a+1个随机变量得不到唯一解
- 最常用的约束之一为

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i = 0.$$

- 这表明了因子 A 的各个水平的效应在零附近波动，且所有效应的总和为零。

单因子方差分析的模型及假设

说明

析因分析

- 在效应模型中，

$$\mu_i = \mu + \alpha_i, i = 1, 2, \cdots, a.$$

  在因子的第 i 个水平下的均值可以划分为两部分，
  - 其一为总体均值 $\mu = a^{-1}\sum_{i=1}^{a}\mu_i$，
  - 其二为第 i 个水平的效应 α_i，也就是说，各个水平的效应是各个水平的均值与总体均值的偏差。
- 因为在均值模型（或效应模型）中仅考虑了一个因子，所以，称这两个模型为**单因子方差分析模型**。

单因子方差分析的模型及假设

假设

- 随机误差的假定:

$$\varepsilon_{ij} \overset{\text{i.i.d}}{\sim} N(0, \sigma^2)$$

  - 独立同分布;
  - 以均值为零，方差为 σ^2 正态分布的随机变量;
- 这表明：不同水平下，响应变量的波动大小是一致的;
- 观测到的数据是相互独立且均服从正态分布，即

$$y_{ij} \sim N(\mu + \alpha_i, \sigma^2).$$

单因子方差分析的模型及假设

总结

- 单因子方差分析的模型为

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij},\ \varepsilon_{ij} \overset{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2),\ \begin{cases} i = 1, 2, \cdots, a \\ j = 1, 2, \cdots, m \end{cases}$$

s.t.

$$\sum_{i=1}^{a} \alpha_i = \quad 0,$$

单因子方差分析的检验

假设

原假设：全都相等，备择假设：存在不等

- 均值模型的假设

$H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_a$

H_1 : 存在在两种水平 i, j 下的均值不相等，即$\mu_i \neq \mu_j$.

- 效应模型的假设

$$H_0 : \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_a = 0$$

H_1 : 存在第 i 个水平不为零，即$\alpha_i \neq 0$.

- 这两种假设都是正确且等价的，只是针对不同的模型而提出的。

单因子方差分析的检验

回顾：二样本 t 检验

- 检验统计量为

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{1}{m}(s_1^2 + s_2^2)}}$$

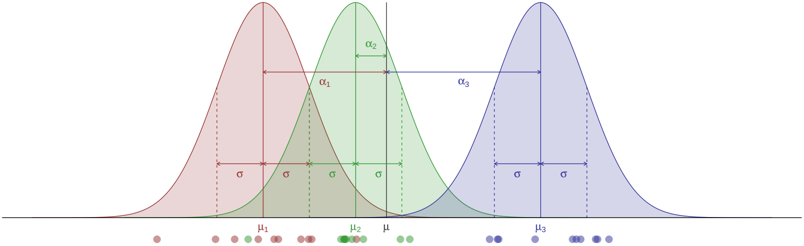
与数据波动有关的

- 本质上比较的是两组样本均值差异与数据波动的大小。
- 相比于数据的波动，两组样本均值的差异大得多，那么我们才能有足够的证据支撑说明这两组数据的均值是不一致的。 组之间差异是否是数据本身的波动造成的

单因子方差分析的检验

图示

- 以 $a = 3$ 个水平的因子为例,



单因子方差分析的检验

平方和分解公式

- 总偏差平方和 SS_T 可拆分为两部分，即

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_{\cdot\cdot})^2 &= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}\left((\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{\cdot\cdot})+(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})\right)^2 \\
&= m\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{\cdot\cdot})^2+\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})^2 \\
&\quad +2\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{\cdot\cdot})(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})\ \text{=0} \\
&= m\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{\cdot\cdot})^2+\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})^2
\end{aligned}
$$

单因子方差分析的检验

平方和分解公式

- 交叉项为零，这是因为

$$\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot}) = y_{i\cdot} - m\bar{y}_{i\cdot} = y_{i\cdot} - y_{i\cdot} = 0.$$

单因子方差分析的检验

平方和分解公式

- 平方和分解公式

$$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_{\cdot\cdot})^2 = m\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{\cdot\cdot})^2+\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})^2.$$

- 第一项为组间偏差平方和 SS_A，即

$$SS_A = m\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{\cdot\cdot})^2.$$

SS_A 表示了不同水平下数据的平均值与所有数据的总平均值之间的偏差平方和，既包含了因子 A 取不同水平引起的数据差异，又包含了随机误差对它的影响；

单因子方差分析的检验

平方和分解公式

- 平方和分解公式

$$\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_{\cdot\cdot})^2 = m\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{\cdot\cdot})^2+\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})^2.$$

- 第二项为组内偏差平方和 SS_E，即

$$SS_E=\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\bar{y}_{i\cdot})^2.$$

SS_E 表示同一水平下数据 y_{ij} 与其平均值 $\bar{y}_{i\cdot}$ 的差异，是由于试验误差引起的。

单因子方差分析的检验

检验统计量

- 平方和分解公式简记为

$$SS_T = SS_A + SS_E$$

- 对于给定的一组数据，总偏差平方和 SS_T 是不变的。
- 如果原假设成立，SS_A 仅仅受到随机误差方差的影响，取值应该不大。是因为每组的样本均值 $\bar{y}_{i\cdot}$ 是 μ_i 的一个合理的估计，也应该取值接近。
- 一个直观的想法是比较比值

$$SS_A/SS_T,$$

如果这个比值越大，我们越有证据支持备择假设；反之我们认为原假设更为合理。

单因子方差分析的检验

检验统计量

- 根据平方和分解公式

$$SS_T = SS_A + SS_E$$

- SS_A/SS_E 随 SS_A/SS_T 增大而增大的。
- 在单因子方差分析模型中，我们所构造的检验统计量是基于

$$\frac{SS_A}{SS_E}.$$

- 问题：SS_A 和 SS_E 的分布是什么?

单因子方差分析的检验

定理

在单因子方差分析模型中，我们有：

- 组内偏差平方和的分布为

$$\frac{SS_E}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-a).$$

- 在原假设 H_0 成立时，组间偏差平方和的分布为

$$\frac{SS_A}{\sigma^2} \sim \chi^2(a-1).$$

- 组间偏差平方和与组内偏差平方和独立。ssa和sse独立

我们先看看这个定理有什么用? **点击这里**。

单因子方差分析的检验

定理（第一部分）

在单因子方差分析模型中，我们有：

- 组内偏差平方和的分布为

$$\frac{SS_E}{\sigma^2} \sim \chi^2(n-a);$$

单因子方差分析的检验

证明：定理（第一部分）

- 根据单因子方差分析模型

$$y_{ij} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij},$$

- SS_E 可以写为

$$\begin{aligned}
SS_E &= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2 \\
&= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}\left((\mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij}) - m^{-1}\sum_{j=1}^{m}(\mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij})\right)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}\left((\mu + \alpha_i + \varepsilon_{ij}) - (\mu + \alpha_i + m^{-1}\sum_{j=1}^{m}\varepsilon_{ij})\right)^2 \\
&= \sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{i\cdot})^2
\end{aligned}$$

单因子方差分析的检验

证明：定理（第一部分）

- 由于 ε_{ij} 是独立同分布的正态随机变量，即

$$\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2)$$

- 在因子 A 的第 i 个水平下，$\varepsilon_{i1}, \varepsilon_{i2}, \cdots, \varepsilon_{im}$ 可以看作来自正态总体 $N(0, \sigma^2)$ 的一组样本量为 m 的样本，而 $\bar{\varepsilon}_{i\cdot} = m^{-1} \sum_{j=1}^{m} \varepsilon_{ij}$ 可以看作这组样本的样本均值；
- 那么

$$\frac{1}{\sigma^2} \sum_{j=1}^{m} (\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{i\cdot})^2 \sim \chi^2(m-1), \quad i = 1, 2, \cdots, a.$$

而且不同水平下的偏差平方和是相互独立的。

单因子方差分析的检验

证明：定理（第一部分）

- 根据卡方分布的可加性，我们有

$$\frac{SS_E}{\sigma^2} = \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{i\cdot})^2 \sim \chi^2(a(m-1))$$

- 注意到，$a(m-1) = am - a = n - a$；

单因子方差分析的检验

定理（第二部分）

在单因子方差分析模型中，我们有：

- 在原假设 H_0 成立时，组间偏差平方和的分布为

$$\frac{SS_A}{\sigma^2} \sim \chi^2(a-1);$$

单因子方差分析的检验

证明：定理（第二部分）

- 组间偏差平方和 SS_A 可写为

$$
\begin{aligned}
SS_A &= m\sum_{i=1}^{a}(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{\cdot\cdot})^2 \\
&= m\sum_{i=1}^{a}\left(\frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}(\mu+\alpha_i+\varepsilon_{ij})-\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(\mu+\alpha_i+\varepsilon_{ij})\right)^2 \\
&= m\sum_{i=1}^{a}(\alpha_i+\bar{\varepsilon}_{i\cdot}-\bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot})^2 \\
&= m\sum_{i=1}^{a}\left(\alpha_i^2+(\bar{\varepsilon}_{i\cdot}-\bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot})^2+2\alpha_i(\bar{\varepsilon}_{i\cdot}-\bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot})\right) \\
&= m\sum_{i=1}^{a}\alpha_i^2+m\sum_{i=1}^{a}(\bar{\varepsilon}_{i\cdot}-\bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot})^2+2m\sum_{i=1}^{a}\alpha_i(\bar{\varepsilon}_{i\cdot}-\bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot}),
\end{aligned}
$$

单因子方差分析的检验

证明：定理（第二部分）

- 因为 $\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2)$ 且相互独立，所以

$$\bar{\varepsilon}_{i\cdot} = m^{-1}\sum_{j=1}^{m}\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2 m^{-1}) \quad \text{和} \quad \bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot} = n^{-1}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}\varepsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2 n^{-1}).$$

- 于是，交叉项的期望为

$$E\left(2m\sum_{i=1}^{a}\alpha_i(\bar{\varepsilon}_{i\cdot} - \bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot})\right) = 2m\sum_{i=1}^{a}\alpha_i E(\bar{\varepsilon}_{i\cdot} - \bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot}) = 0,$$

- 那么，我们有

$$E(SS_A) = m\sum_{i=1}^{a}\alpha_i^2 + mE\left(\sum_{i=1}^{a}(\bar{\varepsilon}_{i\cdot} - \bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot})^2\right).$$

单因子方差分析的检验

证明：定理（第二部分）

- $\bar{\varepsilon}_{i\cdot}$ 是第 i 个水平下随机误差的样本均值，因为不同水平下的随机误差是相互独立的，所以，这些随机误差的样本均值 $\bar{\varepsilon}_{1\cdot}, \bar{\varepsilon}_{2\cdot}, \cdots, \bar{\varepsilon}_{a\cdot}$ 是相互独立的。
- 而

$$\bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}\varepsilon_{ij} = \frac{1}{a}\sum_{i=1}^{a}\bar{\varepsilon}_{i\cdot}$$

  可以看作 a 个 $\bar{\varepsilon}_{1\cdot}, \bar{\varepsilon}_{2\cdot}, \cdots, \bar{\varepsilon}_{a\cdot}$ 的样本均值。
- 于是，

$$(\sigma^2 m^{-1})^{-1}\sum_{i=1}^{a}(\bar{\varepsilon}_{i\cdot} - \bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot})^2 \sim \chi^2(a-1)$$

单因子方差分析的检验

证明：定理（第二部分）

- 在原假设 H_0 成立时，即 $\alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_a = 0$，我们有

$$\frac{SS_A}{\sigma^2} = \frac{\sum_{i=1}^{a}(\bar{\varepsilon}_{i\cdot} - \bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot})^2}{\sigma^2/m} \sim \chi^2(a-1).$$

推论

- 组间偏差平方和的期望为

$$E(SS_A) = m\sum_{i=1}^{a}\alpha_i^2 + (a-1)\sigma^2.$$

单因子方差分析的检验

定理（第三部分）

在单因子方差分析模型中，我们有：

- 组间偏差平方和与组内偏差平方和独立，即

$$SS_A \perp SS_E.$$

单因子方差分析的检验

证明：定理（第三部分）

- 因为

$$SS_A = m \sum_{i=1}^{a} (\alpha_i + \bar{\varepsilon}_{i\cdot} - \bar{\varepsilon}_{\cdot\cdot})^2$$

  可以是 $\bar{\varepsilon}_{1\cdot}, \bar{\varepsilon}_{2\cdot}, \cdots, \bar{\varepsilon}_{a\cdot}$ 的函数。
- 同时，我们知道 $\sum_{j=1}^{m} (\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{i\cdot})^2$ 与 $\bar{\varepsilon}_{i\cdot}$ 是相互独立的，而且因子不同水平下的随机误差是相互独立的。
- 因此，SS_A 与 SS_E 独立。

单因子方差分析的检验

检验统计量

- 检验统计量为

$$F_A = \frac{SS_A/(a-1)}{SS_E/(n-a)}$$

- 在原假设 H_0 成立下服从自由度分别为 $a-1$ 和 $n-a$ 的 F 分布，即 $F_A \sim F(a-1, n-a)$。
- 在显著性水平 α 下，如果

$$F_A \geq F_{1-\alpha}(a-1, n-a)$$

那么，我们会拒绝原假设，其中 $F_\alpha(a-1, n-a)$ 是自由度分别为 $a-1$ 和 $n-a$ 的 F 分布的 α 分位数。

单因子方差分析的检验

方差分析表

来源	平方和 SS	自由度 df	均方和 MS	F 值
因子 A	SS_A	$a-1$	$MS_A = \frac{SS_A}{a-1}$	$F_A = \frac{MS_A}{MS_E}$
误差 E	SS_E	$n-a$	$MS_E = \frac{SS_E}{n-a}$	
总和	SS_T	$n-1$		

单因子方差分析的检验

p 值的计算

- 计算 p 值来进行判断，即

$$p_A = P(F \geq F_A)$$

  其中，F_A 是通过样本计算而得的检验统计量，F 为一个自由度为 $a-1$ 和 $n-a$ 的 F 分布的随机变量。
- 如果 $p_A < \alpha$，那么我们会拒绝原假设；否则，我们无法拒绝原假设。

单因子方差分析的参数估计

点估计

- 由于

$$y_{ij} \overset{\text{独立}}{\sim} N(\mu+\alpha_i,\sigma^2) i=1,2,\cdots,a, j=1,2,\cdots,m,$$

- 可以采用极大似然估计来估计参数

$$(\mu,\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_a,\sigma^2)$$

单因子方差分析的参数估计

点估计

- 似然函数为 $L(\mu, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_a, \sigma^2) =$

$$\prod_{i=1}^{a} \prod_{j=1}^{m} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left\{ -\frac{(y_{ij} - \mu - \alpha_i)^2}{2\sigma^2} \right\} \right\}$$

- 其对数似然函数为

$$\begin{aligned} & l(\mu, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_a, \sigma^2) \\ = \quad & \ln L(\mu, \alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_a, \sigma^2) \\ = \quad & -\frac{n}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{m} \frac{(y_{ij} - \mu - \alpha_i)^2}{2\sigma^2}. \end{aligned}$$

单因子方差分析的参数估计

点估计

- 对各个参数求偏导，得似然方程为

$$\begin{cases} \dfrac{\partial l}{\partial \mu} = \dfrac{1}{\sigma^2}\displaystyle\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\mu-\alpha_i) = 0, \\ \dfrac{\partial l}{\partial \alpha_i} = \dfrac{1}{\sigma^2}\displaystyle\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\mu-\alpha_i) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, a, \\ \dfrac{\partial l}{\partial \sigma^2} = -\dfrac{n}{2\sigma^2} + \dfrac{1}{2\sigma^4}\displaystyle\sum_{i=1}^{a}\sum_{j=1}^{m}(y_{ij}-\mu-\alpha_i)^2 = 0. \end{cases}$$

- 我们可以发现，上述的 $a+2$ 个方程中有 1 个方程是多余的。（问题：为什么?）

单因子方差分析的参数估计

点估计

- 效应模型的约束

$$\sum_{i=1}^{a} \alpha_i = 0$$

单因子方差分析的参数估计

点估计

- 于是，我们可以求出各参数的极大似然估计为

$$\begin{cases} \hat{\mu} = \bar{y}_{\cdot\cdot}, \\ \hat{\alpha}_i = \bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot}, \quad i = 1, 2, \cdots, a, \\ \hat{\sigma}^2_{\mathrm{MLE}} = \dfrac{1}{n} \displaystyle\sum_{i=1}^{a} \sum_{j=1}^{m} (y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2 = \dfrac{SS_E}{n}. \end{cases}$$

- 由极大似然估计的不变性，各个水平的均值 μ_i 的极大似然估计为

$$\hat{\mu}_i = \bar{y}_{i\cdot}.$$

- 因为 $E(SS_E) = \sigma^2(n-a)$，所以，$\hat{\sigma}^2_{\mathrm{MLE}}$ 并不是 σ^2 的一个无偏估计，而常用 $\hat{\sigma}^2 = \frac{SS_E}{n-a} = MS_E$。

单因子方差分析的参数估计

区间估计

- 讨论各水平均值 μ_i 的置信区间。
- 由于

$$
\begin{aligned}
\bar{y}_{i\cdot} &= \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m} y_{ij} = \mu + \alpha_i + \bar{\varepsilon}_{i\cdot} \sim N(\mu + \alpha_i, \sigma^2 m^{-1}) \\
\frac{SS_E}{\sigma^2} &\sim \chi^2(n-a),
\end{aligned}
$$

- 而且 $\bar{y}_{1\cdot}, \bar{y}_{2\cdot}, \cdots, \bar{y}_{a\cdot}$ 均与 SS_E 相互独立，
- 所以，

$$
\frac{\sqrt{m}(\bar{y}_{i\cdot} - \mu_i)}{\sqrt{SS_E/(n-a)}} \sim t(n-a), \quad i = 1, 2, \cdots, a.
$$

单因子方差分析的参数估计

区间估计

- 于是，因子 A 的第 i 个水平的均值 μ_i 的 $1-\alpha$ 置信区间为

$$\left[\bar{y}_{i\cdot} - t_{1-\alpha/2}\hat{\sigma}/\sqrt{m}, \bar{y}_{i\cdot} + t_{1-\alpha/2}\hat{\sigma}/\sqrt{m}\right]$$

其中，$t_\alpha(n-a)$ 为自由度为 $n-a$ 的 t 分布的分位数，而 $\hat{\sigma} = \sqrt{\hat{\sigma}^2}$。

目录

水平均值差的置信区间

概述

- 在单因子方差分析模型中，经检验，**因子 A 是显著的。**
- 有**充分的理由**认为因子 A 的各个水平中**至少存在一对水平**的均值是不相等的。
- 但这并不说明，所有的水平均值都不相等的。

水平均值差的置信区间

概述

- 问题：我们想要知道哪些水平的均值是不相等的。
- 一个自然的想法：给定一对水平 (i, i')，构造 $\mu_i - \mu_{i'}$ 的区间估计。

水平均值差的置信区间

回顾：枢轴量法

- 分布为

$$\bar{y}_{i\cdot} \sim N(\mu_i, \sigma^2 m^{-1}) \quad \text{和} \quad \bar{y}_{i'\cdot} \sim N(\mu_{i'}, \sigma^2 m^{-1})$$

- $\bar{y}_{i\cdot}$ 和 $\bar{y}_{i'\cdot}$ 是独立的。
- 于是，

$$\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{i'\cdot} \sim N(\mu_i - \mu_{i'}, \overset{\text{方差相加}}{2\sigma^2} m^{-1}).$$

- 但是，这个分布中 σ^2 是未知的。
- 我们用 $\hat{\sigma}^2$ 代替 σ^2。

水平均值差的置信区间

回顾：枢轴量法

- 因为

$$SS_E/\sigma^2 \sim \chi^2(n-a)$$

且与 $\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{i'\cdot}$ 独立。

- 方差的估计为

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{SS_E}{n-a}$$

- 因此，枢轴量为

$$\frac{(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{i'\cdot}) - (\mu_i - \mu_{i'})}{\sqrt{\frac{2}{m}}\hat{\sigma}} \sim t(n-a).$$

水平均值差的置信区间

概述

- 问题：我们想要知道哪些水平的均值是不相等的。
- 一个自然的想法：给定一对水平 (i, i')，构造 $\mu_i - \mu_{i'}$ 的区间估计。
- 置信水平为 $1-\alpha$ 的置信区间为

$$(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{i'\cdot}) \pm \sqrt{\frac{2}{m}}\hat{\sigma} \cdot t_{1-\alpha/2}(n-a)$$

标准差x分位数

水平均值差的置信区间

概述

- 置信区间与双侧假设检验是存在对应关系的。
- 置信水平为 $1-\alpha$ 的置信区间为

$$(\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{i'\cdot}) \pm \sqrt{\frac{2}{m}}\hat{\sigma}\cdot t_{1-\alpha/2}(n-a)$$

  可以转化为两正态总体均值差的检验问题

$$H_0:\mu_i=\mu_{i'} \quad \text{vs} \quad H_0:\mu_i\neq\mu_{i'}$$

  的接受域。
- 如果置信区间覆盖零，则认为 μ_i 与 $\mu_{i'}$ 无明显差异；
- 若置信区间未覆盖零，则认为 μ_i 与 $\mu_{i'}$ 之间存在明显的差异。

多重比较问题

概述

- 由于因子 A 总共有 a 个不同的水平，总共有

$$\binom{a}{2} = \frac{a(a-1)}{2}.$$

- 对不同的水平组合。对于每一对水平 (i, i')，

$$(\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{i'\cdot}) \pm \sqrt{\frac{2}{m}}\hat{\sigma} \cdot t_{1-\alpha/2}(n-a)$$

  是 $\mu_i - \mu_{i'}$ 的置信区间，置信水平为 $1-\alpha$。
- 然而，总共有 $a(a-1)/2$ 个区间，要求其同时成立，其联合置信水平就无法达到 $1-\alpha$。

多重比较问题

概述

- 若 $A_1, A_2, \cdots, A_k$ 表示 k 个随机事件，且每个事件发生的概率均为 $1-\alpha$，即 $P(A_i) = 1-\alpha, i = 1, 2 \cdots, k$，则其共同发生的概率为

$$
\begin{aligned}
P\left(\cap_{i=1}^k A_i\right) &\leq P(A_1) = 1-\alpha \\
P\left(\cap_{i=1}^k A_i\right) &= 1 - P\left(\cup_{i=1}^k \overline{A}_i\right) \\
&\geq 1 - \sum_{i=1}^k P(\overline{A}_i) = 1 - k(1-(1-\alpha)) \\
&= 1 - k\alpha.
\end{aligned}
$$

- 这表明了它们同时发生的概率实际上应介于 $1-k\alpha$ 和 $1-\alpha$ 之间，可能比 $1-\alpha$ 小得多。

多重比较问题

概述

- 为了使得它们同时发生的概率不低于 $1-\alpha$，一个很自然的方法是把每一个事件发生的概率提高。
- 具体来说，将 $t_{1-\alpha/2}(n-a)$ 调整为 $t_{1-\alpha/(a(a-1))}(n-a)$；
- 这样使得每个置信区间的置信水平提高到 $1-\alpha/(a(a-1)/2)$；
- 于是，

$$P\left(\cap_{i=1}^{a(a-1)/2} A_i\right) \geq 1-a(a-1)/2\cdot\frac{\alpha}{a(a-1)/2}=1-\alpha.$$

- 称该方法为 Bonferroni **方法**。
- 虽然简单，但是会导致所得到的置信区间过于保守，精度很差。

比较长

多重比较问题

概述

- 在方差分析中，经 F 检验拒绝原假设，表明因子 A 是显著的，即 a 个水平的均值不全相等。
- 进一步，我们需要确定哪些水平之间是存在差异的，哪些水平之间是没有差异的。
- 在 $a(a>2)$ 个水平均值中同时比较任意两个水平均值间有无明显差异的问题称为**多重比较**。
- 也就是说，在显著性水平为 α 同时检验 $a(a-1)/2$ 个假设
$$H_0^{ii'}: \mu_i = \mu_{i'}, \quad 1 \le i < i' \le a.$$
- 当 $H_0^{ii'}$ 成立时，$|\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{i'\cdot}|$ 不应过大，过大就应拒绝 $H_0^{ii'}$。

多重比较问题

概述

- 于是，在同时考察 $a(a-1)/2$ 个假设 $H_0^{ii'}$ 时，这些 $H_0^{ii'}$ 中至少有一个不成立就构成了多重比较检验问题的拒绝域，即拒绝域的形式为

$$W = \bigcup_{1 \le i < i' \le a} \{|\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{i'\cdot}| \ge c_{ii'}\},$$

其中 $c_{ii'}$ 是临界值，由原假设 $H_0^{ii'}$ 成立时 $P(W) = \alpha$ 而确定。

Tukey 方法

概述

- 我们需要求 $a(a-1)/2$ 个临界值 $\{c_{ii'} : 1 \leq i < i' \leq a\}$；
- 为了简化这个问题，我们可以对所求的临界值提出一些合理的假设；
- 由于各个水平下重复次数均相等，基于对称性一个很自然的要求是 $c_{ii'}$ 是相等的，我们记为 c。

Tukey 方法

概述

- 考虑多重比较的检验问题

$$H_0^{ii'}: \mu_i = \mu_{i'}, \quad 1 \leq i < i' \leq a$$

- 在原假设成立时，$\mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_a = \mu.$

Tukey 方法

概述

- 我们有

$$
\begin{aligned}
P(W) &= P\left(\bigcup_{1\le i<i'\le a}\{|\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{i'\cdot}|\ge c\}\right)\\
&= 1-P\left(\bigcap_{1\le i<i'\le a}\{|\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{i'\cdot}|< c\}\right)\\
&= 1-P\left(\max_{1\le i<i'\le a}|\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{i'\cdot}|< c\right)\\
&= P\left(\max_{1\le i<i'\le a}|\bar{y}_{i\cdot}-\bar{y}_{i'\cdot}|\ge c\right)\\
&= P\left(\max_{1\le i<i'\le a}\left|\frac{(\bar{y}_{i\cdot}-\mu)-(\bar{y}_{i'\cdot}-\mu)}{\hat{\sigma}/\sqrt{m}}\right|\ge \frac{c}{\hat{\sigma}/\sqrt{m}}\right)\\
&= P\left(\max_i\frac{\bar{y}_{i\cdot}-\mu}{\hat{\sigma}/\sqrt{m}}-\min_i\frac{\bar{y}_{i\cdot}-\mu}{\hat{\sigma}/\sqrt{m}}\ge \frac{c}{\hat{\sigma}/\sqrt{m}}\right).
\end{aligned}
$$

概述

- 令
$$q(a,df)=\max_i \frac{\bar{y}_{i\cdot}-\mu}{\hat{\sigma}/\sqrt{m}}-\min_i \frac{\bar{y}_{i\cdot}-\mu}{\hat{\sigma}/\sqrt{m}}.$$
- 因为
$$\frac{\bar{y}_{i\cdot}-\mu}{\hat{\sigma}/\sqrt{m}}\sim t(n-a),$$
- $q(a,df)$ 可以看作 a 个独立同分布的自由度为 df 的 t 分布的随机变量的极差；
- 所以，一般称 q 为 t 化极差统计量。
- 这个分布并不是我们常见的分布之一，这个分布与水平数目 a 和 t 分布的自由度 $df=n-a$ 有关，但与 μ,σ^2,m 都无关。

Tukey 方法

概述

- 如何获得 t 化极差统计量的分布?
- 该分布可以通过蒙特卡洛的方法获得。
- 具体算法如下。

算法 t 化极差统计量的蒙特卡洛分布

Require: 水平数目 a，t 分布的自由度 df，重复次数 N;
Ensure: t 化极差统计量的 N 个观测值

```
for  n = 1, 2, ⋯ , N  do
    从标准正态分布 N(0, 1) 产生 a 个随机数：x_1, x_2, ⋯ , x_a;
    将 a 个数据进行排序，令 x_max 为最大值，x_min 为最小值;
    从自由度为 df 的 χ^2 分布产生一个随机数 y;
    计算 q_n = (x_max − x_min)/√(y/df);
```

for $n = 1, 2, \cdots, N$ do

  从标准正态分布 $N(0,1)$ 产生 a 个随机数：$x_1, x_2, \cdots, x_a$;

  将 a 个数据进行排序，令 $x_{\max}$ 为最大值，$x_{\min}$ 为最小值;

  从自由度为 df 的 χ^2 分布产生一个随机数 y;

  计算 $q_n = (x_{\max} - x_{\min})/\sqrt{y/df}$;

Tukey 方法

概述

- 于是，由

$$P(W) = P(q(a, df) \geq \sqrt{m}c/\hat{\sigma}) = \alpha$$

可推出

$$c = q_{1-\alpha}(a, df)\hat{\sigma}/\sqrt{m}$$

其中，$q_\alpha(a, df)$ 表示 $q(a, df)$ 的 α 分位数。

Tukey 方法

步骤

- 在给定的显著性水平 α 下，确定 t 化极差统计量的分位数 $q_{1-\alpha}(a, df)$，并计算 $c = q_{1-\alpha}(a, df)\hat{\sigma}/\sqrt{m}$；
- 比较每一组样本均值的差 $|\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{i'\cdot}|$ 临界值 c 的大小；
- 如果

$$|\bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{i'\cdot}| \geq c$$

- 那么认为水平 i 与水平 i' 之间有显著差异；反之，则认为这两个水平无差异。