

实验设计与分析

Design and Analysis of Experiments

易泰河

国防科技大学 系统工程学院

2019 年 11 月 22 日

目录

第一章 概述	2
1.1 试验的意义	4
1.1.1 试验与因果关系	4
1.1.2 科学研究的范式	12
1.1.3 试验设计的发展历程	13
1.1.4 实验设计与分析的软件	15
1.2 试验的基本流程	26
1.2.1 试验前的建模	26
1.2.2 试验设计	29
1.2.3 试验数据分析	30
1.2.4 作战实验：恐怖的海峡	30
1.3 试验设计的基本原则	37
1.3.1 重复	37
1.3.2 随机化	37
1.3.3 区组	39
1.4 预备知识	44
1.4.1 矩阵、线性空间与 Hilbert 空间	44
1.4.2 正态总体及其抽样分布	48
1.4.3 统计推断	53
1.5 习题	62
第二章 因子试验设计	63
2.1 方差分析法	66
2.1.1 单因子试验	66
2.1.2 双因子试验与交互效应	75
2.1.3 三因子试验的方差分析	84

2.1.4 多重比较与对照	88
2.2 2^k 因子设计及其部分实施	93
2.2.1 2^2 设计与正交表 $L_4(2^3)$	93
2.2.2 2^3 设计与正交表 $L_8(2^7)$	95
2.2.3 2^k 设计与正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$	102
2.2.4 2^k 因子试验的部分实施	105
2.3 3^k 因子设计及其部分实施	112
2.3.1 3^2 因子设计与正交表 $L_9(3^4)$	112
2.3.2 3^k 因子设计与正交表 $L_{3^k}(3^{\frac{3^k-1}{3-1}})$	115
2.3.3 3^k 因子试验的部分实施	117
2.4 正交设计的一般讨论	118
2.4.1 正交表的基本性质	118
2.4.2 等水平试验的正交设计	121
2.4.3 不等水平试验的正交设计	128
2.5 习题	132
第三章 回归试验设计	133
3.1 数据的回归分析	135
3.1.1 线性回归模型的参数估计	136
3.1.2 线性回归模型的假设检验	139
3.1.3 病态性及其处理方法	146
3.1.4 自变量选择方法	150
3.1.5 惩罚最小二乘估计	157
3.1.6 非线性回归分析简介	160
3.1.7 含定性变量的回归模型	163
3.2 正交回归设计	168
3.2.1 正交回归设计的定义	168
3.2.2 正交回归设计的统计分析	170
3.2.3 添加中心点的重复试验	173
3.3 最优回归设计	176
3.3.1 信息矩阵	176
3.3.2 优良性准则	177
3.3.3 等价性定理	183
3.3.4 D 最优设计的迭代求解	186
3.4 响应曲面法	189

3.4.1	响应曲面法的基本步骤	189
3.4.2	中心复合设计	191
3.4.3	其它二阶模型设计	196
3.5	非参数回归简介	198
3.5.1	线性光滑器	199
3.5.2	局部回归方法	201
3.5.3	惩罚回归方法	203
3.5.4	正交函数法	206
3.5.5	核方法	207
3.6	习题	211
第四章 仿真实验设计与分析		213
4.1	引言	214
4.1.1	系统的不同试验类型	214
4.1.2	实验设计与分析在仿真中的地位	215
4.1.3	物理试验与计算机试验的区别	216
4.1.4	基于不确定性量化的试验设计	219
4.2	Gaussian Kriging 模型	222
4.2.1	Gauss 过程简介	222
4.2.2	相关函数已知的情形	224
4.2.3	相关函数包含参数的情形	226
4.3	空间填充设计	228
4.3.1	超拉丁方抽样	228
4.3.2	均匀设计	231
4.3.3	基于准则的最优设计	239
4.4	序贯设计	241
4.4.1	基于 Kriging 模型的序贯试验设计	241
4.4.2	水平集驱动的最优设计	242
4.5	习题	243
第五章 复杂系统的试验评估框架		244
5.1	试验前的建模	245
5.1.1	试验因子	245
5.1.2	指标体系与评估模型	245
5.1.3	响应函数建模	245

5.1.4 层次交互模型及其性质	245
5.1.5 多种试验方式建模	249
5.1.6 综合试验模型	249
5.2 试验设计	250
5.3 基于层次交互模型的统计分析	251
5.4 序贯设计	252
5.5 展望	253

插图

1.1 统计学的研究内容	4
1.2 解释变量、潜在变量与响应变量	6
1.3 因子、响应以及响应模型之间的关系	11
1.4 实验设计与分析流程示意	26
1.5 大陆空军不同规模下的作战结果	34
1.6 无美军介入时台湾基地运转能力对作战结果的影响	34
1.7 先进的空对空武器（超视距空空导弹）对作战结果的影响	35
1.8 台湾空军训练质量对作战结果的影响	35
1.9 美国介入的价值	36
1.10 大陆“未来力量”下美国介入的价值	36
1.11 区组设计示意图	39
1.12 区组设计示意图	40
1.13 区组设计示意图	42
2.1 因子轮换法试验点	64
2.2 3^3 全面实施的处理组合	64
2.3 利用正交表 $L_9(3^4)$ 前三列安排三因子试验	65
2.4 两因子二水平试验结果	77
2.5 交互效应示意图	79
2.6 极板材料与环境温度交互效应（一）	82
2.7 极板材料与环境温度交互效应（二）	82
2.8 极板材料与环境温度交互效应（三）	83
2.9 2^3 设计中对应于主效应和交互效应的对照的几何表示	97
2.10 转化率与三因子关系图	122
3.1 响应模型的分类	134

3.2 岭迹图	160
3.3 2 维与 3 维空间中心复合设计	192
3.4 3 因子中心复合设计	194
3.5 3 因子中心复合设计的预测方差分布图	194
3.6 3 因子 Box-Behnken 设计	197
4.1 仿真开发过程	216
4.2 序贯设计的一般流程	241
5.1 性能评估模型	244
5.2 层次交互模型	248
5.3 2 层神经网络	249

表格

1.1 大陆投入空中部队的规模与编成	31
1.2 “恐怖的海峡”中试验因子及其水平划分	32
1.3 台湾空军编成	33
1.4 台湾地对空导弹战斗序列	33
1.5 诸因子下想定样本在大陆成功夺取制空权样本中占比	34
1.6 4 阶拉丁方设计	41
1.7 平衡不完全区组设计	42
2.1 单因子试验数据表	66
2.2 单因子试验方差分析表	71
2.3 新型手枪打靶试验数据	73
2.4 双因子试验方差分析表	80
2.5 电池最大输出电压试验数据	81
2.6 电池最大输出电压试验数据方差分析表	81
2.7 某次行动损益数据表	87
2.8 某次行动损益方差分析表	88
2.9 2^2 设计对照系数符号表	94
2.10 2^3 设计计算效应对照系数符号表	98
2.11 $L_8(2^7)$ 两列的交互效应	98
2.12 $L_8(2^7)$ 正交表	99
2.13 $L_8(2^7)$ 正交表	99
2.14 梳棉机试验结果和计算	101
2.15 梳棉机试验方差分析	102
2.16 $L_{16}(2^{15})$	105
2.17 2^3 设计的部分实施	107
2.18 $L_8(2^7)$ 安排 2^k 的部分实施方案	107

2.19 正交表 $L_9(3^4)$	113
2.20 正交表 $L_9(3^4)$	113
2.21 正交表 $L_9(3^4)$	114
2.22 混合水平正交表 $L_8(4 \times 2^4)$	118
2.23 试验方案与结果	121
2.24 转化率试验的方差分析表	125
2.25 2^4 因子转化率试验方案	127
2.26 2^4 因子转化率试验方差分析表	127
2.27 剔除 B 、 AB 后的方差分析表	128
2.28 胶压板试验的方案、结果和分析	129
 3.1 国家财政收入数据	144
3.2 我国 1991-2006 年猪肉价格及其影响因素	148
3.3 1978-2007 年的部分经济数据	153
3.4 1949-1959 年法国进出口总额与相关变量的数据	158
3.5 每个季节下的 6 组酿酒数据	164
3.6 白血病数据	168
3.7 线性回归正交设计的方差分析表	172
3.8 方差分析表	173
3.9 单因子试验的几个简单设计	179
3.10 中心复合设计的特征	193
3.11 三因子试验 Box-Behnken 设计	196
 4.1 $U_6^*(6^4)$	239
4.2 $U_6^*(6^4)$ 的使用表	239

第一章 概述

本章目标:

- (1) 认同学习实验设计与分析课程的意义;
- (2) 掌握试验设计的基本概念和术语;
- (3) 熟悉试验设计三原则——重复、随机化和区组——的意义;
- (4) 理解实验是一个过程,了解实验的基本流程以及每一步中的具体任务;
- (5) 回顾矩阵运算、 t -分布、 F -分布、 χ^2 -分布、统计推断等基础知识.

国内不同领域的学者对“Design of Experiments”的翻译略有区别,统计学科内一般翻译为“试验设计”,而其它学科则有翻译为“实验设计”的.那么到底是“试验”还是“实验”呢?在《现代汉语词典》中,实验(experiment)是用来检验某种科学理论或假设而进行的操作或从事的某种活动,试验(test)是为了解某事的结果或某物的性能而进行的尝试性活动,二者在语义上有约定俗成的区别.下面列举几段来自互联网的材料,读者可从中体会它们之间的区别.

中国预计在 2020 年发射空间站核心舱,2022 年左右发射**实验舱 I 和实验舱 II**,之后把 3 个舱形成“T”字形构型,构成完整的空间站.预计空间站将从 2022 年之后开始运行,在轨 10 年以上.

自从中国空间站计划开始实施以来,“我们去空间站干什么”就一直是大众关心的问题.其实,“做**实验**”就是一项重要的任务——空间站将支撑大量科学**研究和实验**.

之前,来自 17 个国家的 9 个项目成为**中国空间站科学实验首批国际合作项目**.现在,中国空间站面向国内公开征集**空间科学实验和技术试验项目**活动已开始正式申报.

—<https://baijiahao.baidu.com/s?id=1638288552756110711&wfr=spider&for=pc>

素有“火洲”之称的新疆吐鲁番市以极热、极干的气候,近年来吸引国内外众多车企、材料制造企业及科研院所纷至沓来,使这里成为国内汽车热区**试验首**

选之地. . . .

上汽大众、通用泛亚等车企相继在吐鲁番投资建设试验项目。上汽大众投资8.5亿元在建的新疆(吐鲁番)试验中心项目，拥有高速环道、操纵稳定性道路、异响试验道路、热带地区耐久试验道路、石击试验道路、大气曝晒试验场等先进设施。项目建成后，将成为继南非、阿曼、美国专业场地之后，大众汽车集团在全球范围内又一符合夏季试车标准的专业场地。

—<https://baijiahao.baidu.com/s?id=1638204704196838171&wfr=spider&for=pc>

人民网北京2月6日电据国防部新闻局官方微博“国防部发布”消息，2018年2月5日，中国在境内进行了一次陆基中段反导拦截技术试验，试验达到了预期目的。这一试验是防御性的，不针对任何国家。

—<https://baijiahao.baidu.com/s?id=1591616431418445957&wfr=spider&for=pc>

记者：有媒体报道，国产航母已开始吊装更换位于左舷的玻璃钢救生筏，显示其服役期临近，网传国产航母将于10月正式入役。请问能否介绍一下国产航母的最新进展情况？

任国强：中国第二艘航母正在按计划开展各项试验，目前各项工作顺利推进。至于服役时间，需要根据它的建造进展和试验情况综合确定。

—<http://www.huaxia.com/thjq/jsxw/dl/2019/06/6148715.html>

从以上归纳出“试验”与“实验”的主要区别如下：

- 对象不同，“实验”的对象通常是抽象的理论或假设，而“试验”的对象则是产品等客观存在的物品；
- “实验”科学味道浓，如科学实验、实验室、临床实验等词汇；“试验”技术味道更浓，带有检验、验证的意思，如耐压试验、环境适应性试验、技术试验、风洞试验等词汇。严格区分“试验”和“实验”十分困难，有的书中统一采用“试验”一词，有的书上统一采用“实验”一词。本书的态度是：
 - 采纳文献[17]的观点，将一系列试验视作一次实验；
 - 不论是实验还是试验，都需要科学的设计和分析方法，因此不刻意区分“试验”和“实验”两词；
 - 在课程名字“实验设计与分析”中以及其它语义明显的情形（如明显为科学实验的）下，一律使用“试验”一词。

1.1 试验的意义

实验（和试验）在科技发展和人类文明进程中的历史意义都是不言而喻的。然而历史只有借鉴意义，随着大数据时代的到来，有些学者认为数据采集手段和存储技术的巨大进步，实验研究的意义已经不像以前那么重要了。本节的重点在于论证实验（和试验）在现在以及未来的意义，因此单纯列举一些历史上成功的实验（和试验）案例，以及引用一些著名学者的论断，意义不大。作者选择从因果性的角度来论证实验（和试验）的理论意义；从科学研究范式的演变来论证实验（和试验）在科学中的作用；通过回顾试验设计学科的发展历程，验证实验（和试验）的历史意义。在论证的过程中，引入响应、因子、水平、处理、试验单元、响应函数与响应模型等试验设计领域的术语。

1.1.1 试验与因果关系

统计学是一门围绕如何收集数据、分析数据、以及从数据中获取关于总体的知识（或结论）而展开研究的学科。收集数据的主要手段包括抽样(sampling)、观察(observation)和实验(experiment)，如图1.1所示。抽样通常用于研究有限总体的性质，而不希望调查总体中的每一个个体。例如，研究我国的人均寿命以及人均受教育程度，总体是全国的人口，是有限的，按照某种方式从中抽取部分个体来调查。观察研究和实验（和试验）通常用于研究两个或多个变量之间的关系，这时的总体是概念性的(conceptual population)。比如研究全球温室气体排放量与温度的关系，不存在一个具体的有限总体可供抽样。

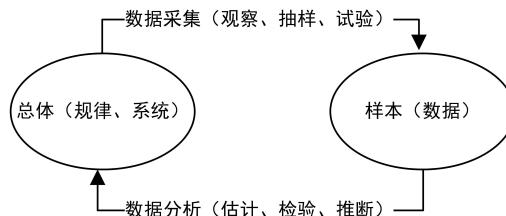


图 1.1: 统计学的研究内容

数据是统计学研究的资料，统计学家对数据进行整理和分析，从中提炼出知识并给出结论。数据按其取值可分为以下四种类型。

- (1) 计量数据，如人的身高、体重，室内外的温度、湿度，降雨量，国民生产总值(GNP)，国内生产总值(GDP)等。这些数据的取值可以是某一区间内的任意实数。
- (2) 计数数据，如某一部队的人员数量、各型装备数量，某一时间内接听电话的次数，等。这些数据在整数范围内取值，而且绝大多数还只能在非负整数范围类取值。
- (3) 属性数据，如人的性别，名族，季节，种族等。在属性数据分析中，通常用数量来表示分类，如用“1”“2”“3”“4”分别表示四个季节。这些数只是一个符号，没有大小关系，

也不能进行运算.

- (4) 有序数据, 如人的文化程度由低到高可分为文盲、小学、初中、高中、中专、大专、本科、硕士、博士等, 环境的复杂型划分为三个等级, 无人集群系统的自主性划分为十个等级. 这些等级也可以用自然数来表示, 但这些数仅有有序的关系, 而没有量的概念.

通常把计量数据和计数数据统称为**定量数据** (qualitative data), 而把属性数据和有序数据统称为**定性数据** (quantitative data).

统计学的意义体现在提供支撑决策的预测, 这使得统计学天然地与**因果关系** (causation, cause and effect) 联系在一起. 陈希儒老先生在他的统计学通俗读本《统计学漫话》中指出, 统计学具有三个基本属性:

- 通过事物的外在数量表现考察事物的规律性;
- 由部分推断总体;
- 统计推断存在错误与误差.

在《数理统计学简史》中指出: “正概率”是由原因推结果, 是概率论, “逆概率”是结果推原因, 是数理统计.

那么, 什么是因果关系呢? 我们常会问“是什么引起了癌症”“新的装备能有效提升战斗力吗”或“是什么导致了行动的失败”这类因果问题 (cause-and-effect question), 并直觉地认为因果关系很简单, 指在某种条件下某件事情 (原因) 引发了另一件事情 (结果). 哲学家们却不那么认为, 他们往往围绕一些大众认为理所当然的概念争论不休.

20世纪30年代早期, 罗素有力证明了常见的“原因与结果”观念是一种不自洽的思想. 我们无法根据同一种推理过程将原因和结果的不同例子协调在一起. 实际上, 这个世界上并不存在什么原因与结果. 原因与结果是大众的幻想, 它是一种模糊的观念, 经不起严格的理论推敲. 它包含一些互相矛盾的、不一致的思想, 在科学上几乎没有任何意义.

—摘自《女士品茶》第201页

我们不参与哲学家的思辨, 感兴趣的读者可自行查找因果性的相关资料.

称可能引起另一变量发生变化的原因为**解释变量** (explanatory variable), 称假定的效应或结果**响应变量** (response variable), 响应变量受一个或多个解释变量的影响. 尽管人们对因果关系的含义争论不休, 学界基本认同如下观点.

确定解释变量 A 引起响应变量 B 的变化的合理性时, 须下列条件同时成立:

- (1) 相关条件, 即变量 A 和变量 B 必须是关联的或是相关的;
- (2) 时序条件, 即变量 A 的变化发生在变量 B 的变化之前;
- (3) 不可替代性, 即关于变量 A 与变量 B 之间的关系, 不存在其他貌似合理的替代性解释.

变量之间的因果关系是不能通过演绎推理得到的, 只能通过数据归纳得到.

相关关系是一种统计上的数量关系，它是因果关系的必要条件，即相关不一定有因果，而有因果一定相关；忽略时序性，仅从数据出发可能造成因果倒置；归纳因果关系时必须注意**潜在变量** (lurking variable, extraneous variable) 的影响，如图1.2所示。一般来说，相关条件可直接通过数据计算来验证，时序条件也很容易验证，不可替代性是最难保证的。

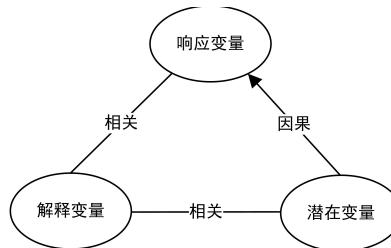


图 1.2: 解释变量、潜在变量与响应变量

例 1.1 (咖啡与心脏病). 研究发现，喝咖啡和心脏病发作之间存在相关关系：即咖啡喝得越多，心脏病发作率就越高；而咖啡喝得越少，心脏病发作率低。这是一种因果关系吗？其它研究结果表示，这并不是因果关系，实际起作用的因素是潜在变量——吸烟。相比喝咖啡少的人，喝咖啡多的人更可能吸烟，因此，是吸烟导致了心脏病而不是大量饮用咖啡导致心脏病。

例 1.2 (警察与犯罪). 经统计发现，警察数量越多的地区，犯罪事件数量也越多。仔细研究就会发现，警察增加并不是导致犯罪次数增加的原因，相反，犯罪次数多才是增加警力的原因。

例 1.3 (健康工人效应). 放射性物质对人体的健康有很大的伤害，但是铀矿工人的平均寿命却不比常人短。这是由于矿工通常都是身强力壮的人，分析放射性物质与人的寿命之间的因果关系时，不能忽略体质这个潜在变量的影响。

科学研究可分为**观察研究** (observational studies) 和**实验研究** (experimental studies) 两类。观察研究是一种被动的数据搜集方式，研究人员只观察、记录或者度量，但不进行干预，由此产生的数据称为**观测数据**或**观察数据** (observational data)。而实验研究则是一种主动产生数据的方式，研究者会把某种处理方式加诸试验对象，并观察被试对象的变化，由此产生的数据称为**实验数据** (experimental data)。有关社会经济现象的统计数据几乎都是观测数据，当今天大数据、机器学习等热门领域研究的数据基本上都是观测数据。观察数据和实验数据都是统计学研究的对象，它们之间有如下区别：

- 由于数据采集、传输和存储技术的发展，观察数据往往是海量的，因此数据分析方法无需过多考虑样本量的限制，甚至有的学者鼓吹大数据时代不是样本而是总体。而受成本的约束，实验数据始终是有限的，分析实验数据时，始终要考虑有限样本这一前提。要强调的是，由于大数据问题总是伴随着高维度出现，因此大数据并不等同于大样本，很多大数据问题依然具有小样本问题的特点。

- 虽然所有的实验研究和很多观察研究，都是为了研究一个变量会对另一个变量产生什么影响，但观察研究一般只能确立变量之间的相关关系，而实验研究由于采用了控制，可以确立变量之间的因果关系。著名统计学家 A. R. Fisher 爵士指出，只要遵守良好的试验设计原则，就可以根据特定的研究得出一般性的结论。

例 1.4. 某次射击打靶中发现，着靶点总是在靶心以下。这可能是射击者的技术问题，可能是枪支的问题，也可能是环境的问题，如气压、风速等。观察数据可以发现命中点偏下这一问题，但无法明确究竟是什么原因造成的结果。确定原因需要设计试验，控制某些因素，改变某些因素，来排除无关的因素。例如换一位射击水平高的人来确定是否是人员的问题，选择好的天气来明确是否是环境的问题，更换枪支来确定是否是枪支的问题。

那么，什么样的试验设计才能得出因果关系呢？下面从几个案例出发来回答这一问题。

例 1.5 (猪鞭虫疗法实验). 克罗恩病是一种慢性肠炎，有研究称含有猪鞭虫卵的饮料可以有效缓解克罗恩病引发的腹部疼痛、出血和腹泻等症状。为了确认猪鞭虫疗法是否有效，需要开展一项临床实验 (*clinical trial*)。令克罗恩病患者服用含有猪鞭虫卵的饮料并测量反应。如果结果表明症状确实减轻了，能否明确猪鞭虫疗法确实有效？

该实验只采用一种处理，它不能说明猪鞭虫疗法有效，因为这可能只是一种安慰剂效应 (*placebo effect*)。安慰剂是一种假的治疗方式，其效果源于患者对医生的信任和对治疗的期望的心理作用。为此，需要设计更加严谨的实验。将患者随机分为两组，一组接受猪鞭虫饮料治疗，另一组则接受安慰剂治疗。两组实验的对象都不知道自己接受的疗法是什么，负责记录患者反应的医生也不知道患者接受哪种治疗，所以他们的诊断也不会受到影响。称这种患者和负责记录症状的医生都不知道详情的实验为双盲实验 (*double-blind experiment*)，它能够保证因果关系成立的三个条件。

随机比较实验 (*randomized comparative trial*) 是临床实验中的重要概念，它能够帮助我们归纳出明确的因果关系，它的基本逻辑是：

- 用随机抽样的方法对实验对象进行分组；
- 用比较环节来确保除了给不同组施加的处理不同外，不存在其它潜在变量的影响；
- 不同组之间响应变量的差异是处理的效应所致。

双盲实验是随机比较实验的一种。用随机抽样的方法分组，是为了避免未被意识到的潜在变量带来系统性偏差。但随机抽样服从“机会法则” (*law of chance*)，即存在两组之间差异很大的极端情况。当实验对象较多，组间的机会变异性 (*chance variation*) 就比较小。

例 1.6 (Yule-Simpson 悖论). 研究某一疾病的某种处理方式是否有效，采集实验数据如下

		存活人数	死亡人数	存活率
总体	处理组	200	200	50%
	对照组	160	240	40%
男性	处理组	180	120	60%
	对照组	70	30	70%
女性	处理组	20	80	20%
	对照组	90	210	30%

从表中可以看出，施加该处理后：

- 总体的存活率由 40% 提高到 50%，有一定的效果；
- 男性的存活率由 70% 降至 60%，无效；
- 女性的存活率由 30% 降至 20%，也无效。

那么该处理究竟有没有效？你认为上述实验有什么不当之处吗？

当然，本例中以频率代替概率，本身就有一定的误差。Yule-Simpson 悖论在生活中也常常出现，例如某个学校男生和女生的及格率都比另一个学校高，而总及格率却可能比另一个学校低。从数学上看，Yule-Simpson 悖论的本质是存在整数 $a, b, c, d, a', b', c', d'$ ，使得

$$\frac{a}{b} < \frac{c}{d}, \quad \frac{a'}{b'} < \frac{c'}{d'}$$

与

$$\frac{a+a'}{b+b'} \geq \frac{c+c'}{c+d'}$$

同时成立，这并没有什么新奇之处。我们知道， $a < c$ 且 $a' < c'$ 可以推出 $a + a' < c + c'$ 。因此如果在试验设计时要求处理组与对照组人数相同或大致相当，即 $b \approx d$ 且 $b' \approx d'$ ，就可以避免 Yule-Simpson 悖论了。上例中， $b = 300, d = 100, b' = 100, d' = 300$ ，相差比较大。

例 1.7 (香烟与癌症¹)。 20 世纪以前，肺癌是一种很罕见的疾病。直到 1900 年，肺癌公开的医学记录总共才 140 份。可是第一次世界大战结束后，患肺癌的人突然变多了：

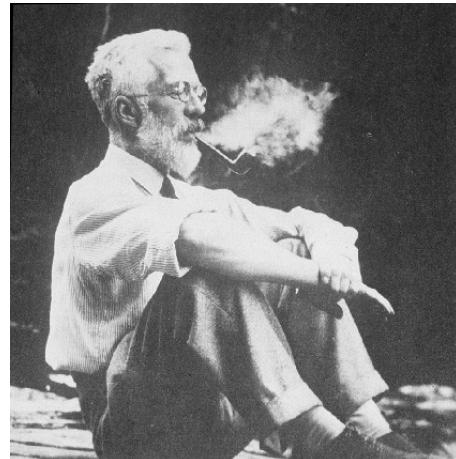
- 1878 年，在德国德累斯顿大学 (*Technische Universität Dresden*) 病理系的穿刺样本中，肺癌只占 1%。
- 1883 年，美国的邦萨克改进了卷烟机，生产效率提高了 40-50 倍，香烟产量大幅提升。
- 1914 年，第一次世界大战爆发，由于战争漫长而残酷，香烟成为士兵的刚需。1915 年，仅英国陆军和海军就消耗掉 1000 吨香烟和 700 吨烟丝。
- 1918 年，在德国德累斯顿大学病理系的穿刺样本中，肺癌占 10%。
- 1920 年，女权主义兴起，香烟被当做女性独立自主的象征，大量女性开始吸烟。
- 1927 年，在德国德累斯顿大学病理系的穿刺样本中，肺癌占 14%。

¹<https://zhuanlan.zhihu.com/p/55592777>

显然，吸烟与肺癌成正相关，那么吸烟是造成肺癌的原因吗？为了回答这一问题，科学家们开展了大量的观察研究：

- 1939 年，德国医生穆勒发表了一个对照研究。他找来 86 名肺癌患者，又找来几十个没有肺癌的人。结果发现，肺癌组吸烟的比率更高。由此他得出一个结论：肺癌和吸烟有很大关系。
- 从 1948 年开始，英国科学家多尔和希尔，开展了一场规模可观的回顾性研究，肺癌组和对照组各有 709 人。他们询问调查对象是否吸烟以及烟瘾有多重，结果发现了剂量反应，即肺癌病人的烟瘾更重。这项研究只证明了吸烟和肺癌的相关性，未能证明吸烟和肺癌的因果性，所以研究的成果也未能被业界普遍接受。
- 从 1951 年开始，多尔和希尔开展了一场规模更大、时间更长的前瞻性研究。这一次，多尔和希尔调查的是英国的医生们。因为当时没有电子档案，医生的资料比较容易获取。这个调查覆盖了 40000 名医生，到 1956 年时，已经有 1714 位医生因病去世。数据表明，吸烟组得肺癌的多，1714 位去世的医生中吸烟组因肺癌而死的人也多，吸烟会导致死于肺癌的几率增加约 40 倍。在排除了各种干扰因素之后，多尔和希尔证明了吸烟是引发肺癌是统计显著 (*statistical significance*) 的，其 p 值小于 0.01！

尽管如此，*Fisher* 终其一生都不同意这一观点，这可能是他自己烟瘾较大的原因。他提出一种解释：假设某种基因能够导致人们吸烟或不吸烟，而这种基因又与肺癌有关，那么吸烟与肺癌仅仅是相关关系，不是因果关系。*Fisher* 认为，为了确定吸烟与肺癌之间的因果关系，必须开展严格的随机比较实验研究：挑选一定数量的双胞胎，从中随机挑选一个接受吸烟这一处理，另一个作为对照组，通过比较这两组中罹患肺癌的病人比例来确定吸烟与肺癌之间的因果关系。但这一方面需要大量时间，另一方面显然不符合研究伦理。*Fisher* 殁于 1962 年 7 月 29 日，他的死因不是肺癌。



Fisher 殁于 1962 年 7 月 29 日，他的死因不是肺癌。

上述案例中提到统计显著和 p 值概念。在假设检验问题中，称结果在原假设成立的条件下的条件概率为原假设的 p 值 (p -value)，如果 p 值小于某给定的阈值 α ，就称此结果具有统计显著性。 α 称为显著性水平 (significance level)，通常采纳 *Fisher* 的建议取 0.05。临床实验中的原假设通常都是新的治疗方式没有效果，如果效果好到一定程度，在没有效果的假设下该结果出现的概率小于 α ，那么就是统计显著的，应该拒绝原假设。

在继续论述之前，让我们明确试验设计领域的几个核心概念。称衡量试验结果的量（即响应变量）为响应或指标 (response)。根据响应变量的取值，可以将响应分为以下三类。

- 定性响应，通常划分为几种情况或几个等级来表示，这些情况或等级之间可能有序的关系但没有量的关系，如治疗效果；
- 定量响应，可以用实数或自然数来表示，如产量、合格率、精度、强度等；
- 函数型响应，例如导弹的飞行弹道，本书不讨论函数型响应问题.

根据响应的数目，可把试验分为**单响应试验**和**多响应试验** (multi-response experiments). 选择响应变量有一定的技巧，

- 如果把治疗效果当作响应，那么例1.5中的实验是单响应的. 治疗效果是定性的，包括治愈和没治愈两个取值，可以借助数字“0”和“1”来表示.
- 如果以各项症状或生理指标为响应，那么例1.5中的实验就是多响应的. 很多指标都有现代医疗设备可测量其精确取值，如血糖、血脂等指标，医生能够融合多种症状和指标诊断得到治疗效果，这就把多响应实验转化为单响应实验了.

由于多响应试验可以转化为单响应试验来处理，我们只考虑单响应试验. 称响应的测量值与真值之间的偏差为**误差** (error). 造成误差的原因有很多，使得误差不可避免，它或大或小，或正或负，以不可预测的方式出现，呈现随机性. 随机误差就是前面提到的机会变异性. 根据中心极限定理，只要每个干扰因子都在一定的范围内，无特殊波动出现，误差总可以认为是服从均值为 0、方差为 σ^2 的正态分布 $N(0, \sigma^2)$ 的随机变量.

凡对响应可能产生影响的原因都称为**因子**或**因素** (factor). 可从不同的角度对因子进行分类：

- 从表现形式上分为**定性因子** (quantitative factor)、**定量因子** (qualitative factor) 以及**动态因子** (dynamic factor);
- 从可控的角度分为**可控因子** (controllable factor) 和**不可控因子** (uncontrollable factor)，或称非随机因子和随机因子；
- 从研究目的出发，人为地把因子分为**试验因子** (experimental factor) 和**噪声因子** (noise factor). 试验因子是指研究者感兴趣的因子，通常是可控的；噪声因子则指未被选中的所有因子，包括研究人员没有意识到的因子.

解释变量和潜在变量都是因子，解释变量属于试验因子，而潜在变量属于噪声因子. 只考虑一个试验因子的试验称为**单因子试验**，存在多个试验因子的试验称为**多因子试验**. 前面介绍的几个临床实验都是单因子试验，而本书主要考虑多因子试验. 试验因子在试验中所处的各种状态或所取的不同值，称为**水平** (level). 定量因子的水平可以取具体值，而定性因子的水平则只能取某一等级或某个模糊概念. 称试验因子的水平组合为**处理组合** (treatment combinations)，简称**处理** (treatment). 例1.5只有一个定性的试验因子，即治疗方式，它可取两个水平：猪鞭虫饮料治疗和安慰剂治疗，单因子试验中因子的一个水平就是一个处理.

试验单元 (experiments unit) 是试验载体的通用术语，是一个比较抽象的概念，泛指一次试验中诸如试验对象、实验员、工具以及试验时间等基本单元. 在试验中，不同的处理可能施加在不同的试验单元上，试验单元之间的差异可能是造成响应波动的潜在变量之一. 因

此，在试验设计时需要考虑试验单元之间可能存在的差异。

试验单元、因子和响应共同构成试验的三要素，如图1.3所示。有了因子与响应的概念，

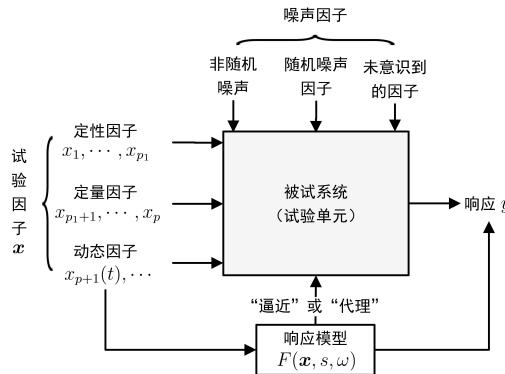


图 1.3: 因子、响应以及响应模型之间的关系

便可利用它们之间的变化规律来定量地描述因果关系：称因子与响应之间的函数关系¹为**响应函数** (response function)。我们假定存在一个真实但未知的响应函数 (the true state of nature)。称响应函数的数学模型为**响应模型** (response model)。直接由物理原理得到的响应模型为**机理模型** (mechanistic model)，如万有引力公式 $F = Gm_1m_2r^{-2}$ ；而大多数问题都要求对系统的运行进行观测或试验，得到**经验模型** (empirical model)。本书讨论的模型大多为经验模型。著名统计学家 Box 认为，“All models are wrong, but some are useful.” 可从“逼近 (approximate)” 或“代理 (surrogate)” 的角度去理解响应模型与响应函数之间的关系，即响应模型只是在输入输出的行为上与响应函数相近。

可以说，试验的终极目的就是为了探究响应函数，因此试验的基本逻辑是：明确响应变量 y 和试验因子 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_p)^T$ ，消除或降低噪声因子的影响，以全部处理或挑选部分处理 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 作为试验点，实施实验并采集实验数据 $\{(x_i, y_i)\}$ ，归纳因果关系 $y = F(\mathbf{x}, \hat{s}, \omega)$ 并作出推断或决策。

例 1.8 (提高产品产量试验). 反应温度 A 、反应时间 B 和催化剂占比 C 会影响某产品的产量，各因子的取值范围如下： $A : 80^\circ\text{C} \sim 90^\circ\text{C}$, $B : 90\text{min} \sim 150\text{min}$, $C : 5\% \sim 7\%$. 现要求设计试验找到产量高的处理组合。

本例中，响应 y 为产量。试验的目的是使得响应 y 越大越好，称这一类问题为**望大** (*larger-the-better*) 特征问题；称响应 y 越小越好的问题为**望小** (*smaller-the-better*) 特征问题；称希望响应 y 稳定在某一值的问题为**望目** (*nominal-the-better*) 特征问题。温度、时间和催化剂占比都是定量因子。每个因子各选 3 个水平，组成如下的因子水平表：

¹这里暗含了因子与响应之间存在函数关系的假定。

因子	1	2	3
A	80°C	85°C	90°C
B	90min	120min	150min
C	5%	6%	7%

一共有 $3^3 = 9$ 个处理，把所有处理都作为试验点的实验称为**全面实施** (*overall experiment*)，从全部处理中选择一部分处理进行实验称为**部分实施** (*fractional design*). 得到试验数据后，可以采用方差分析模型或回归分析模型来刻画响应函数，进而找到最佳处理.

1.1.2 科学研究的范式

2007 年 1 月 11 日，图灵奖得主吉姆·格雷 (Jim Gray) 在加州山景城召开的 NRC-CSTB(National Research Council - Computer Science and Telecommunications Board) 大会上发表了题为“科学方法的革命”的演讲，提出将科学研究分为四类范式：**经验归纳**，**理论推演**，**仿真模拟**和**数据密集型科学发现**. 其中，“**数据密集型科学发现**”就是“**科学大数据**”.

Science Paradigms

- Thousand years ago:
science was **empirical**
describing natural phenomena
- Last few hundred years:
theoretical branch
using models, generalizations
- Last few decades:
a computational branch
simulating complex phenomena
- Today: **data exploration** (eScience)
unity theory, experiment, and simulation
 - Data captured by instruments
or generated by simulator
 - Processed by software
 - Information/knowledge stored in computer
 - Scientist analyzes database/files
using data management and statistics



几千年前，人类的科学研究主要以记录和描述自然现象为主，即以观察研究为主，称为**经验科学**. 从原始的钻木取火，发展到后来以伽利略为代表的文艺复兴时期的科学发展初级阶段，开启了现代科学之门. 但受当时实验条件的限制，单纯的观察研究显然难以完成对自然现象更精确的理解.

几百年前，科学家们开始尝试尽量简化模型，只留下关键因素（如物理学中的“足够光滑”、“足够长的时间”、“空气足够稀薄”等令人条件），然后通过演绎推理得到理论，再设计实验证理论，这就是第二范式. 这种研究范式一直持续到 19 世纪末，都堪称完美，牛顿三大定律成功解释了经典力学，麦克斯韦理论成功解释了电磁学. 但之后量子力学和相对论的出现，验证理论的难度和经济投入越来越高，理论推演模式开始显得力不从心.

20 世纪中叶，冯·诺依曼提出了现代电子计算机架构，利用电子计算机对复杂系统进行模拟仿真的模式得到迅速普及. 通过对复杂过程的模拟仿真，人们推演出越来越多的复杂现象，如模拟核试验、天气预报等. 随着计算机仿真越来越多地取代实验，逐渐成为科学的研究的常规方法，即第三范式.

随着数据的爆炸性增长，计算机将不仅仅能做模拟仿真，还能利用数据中呈现的相关性给出相当可靠的预测. 数据密集范式理应从第三范式中分离出来，成为一个独特的科学的研究

范式，即第四范式。前三范式都是先提出可能的理论，然后收集数据来验证，是以人为主角的。而第四范式则是先有了大量的数据，再从数据中总结规律，是以电脑为主角的。第四范式能够成功的根本原因在于，没有因果关系而只有相关关系，并不妨碍人们利用这种关系来进行推断和决策。例如，虽然公鸡打鸣不是太阳升起的原因，但可以利用公鸡打鸣来预报太阳升起。在商业中仅利用相关关系进行预测并获得商业利益的案例更多，如各种推荐系统。

正是由于数据密集型发现应用的广泛性，业界甚至学术界，产生了一些极端的声音。维克托·迈尔和舍恩伯格撰写的《大数据时代》（中文版译名）中指出，**大数据时代最大的转变，就是放弃对因果关系的渴求，取而代之关注相关关系。也就是说，只要知道“是什么”，而不需要知道“为什么”。**这就颠覆了千百年来人类的思维惯例，据称是对人类的认知和与世界交流的方式提出了全新的挑战。因为人类总是会思考事物之间的因果联系，而对基于数据的相关性并不那么敏感；相反，电脑则几乎无法自己理解因果，而对相关性分析极为擅长。

总的来看，经验归纳中的“经验”来自于观察和试验，理论推演的结论需要实验验证，仿真模拟属于一种新的试验方式。也就是说，前三种范式都离不开试验，关键是第四种范式。试验的主要目的和优势就是发掘因果关系，如果大数据时代真的只要知道“是什么”而不需要知道“为什么”，试验的意义似乎已经丧失了。以下案例，足以用来批驳这种极端的观点。

例 1.9（童便疗法）。中医中有服用“童便”治疗顽固性腹泻的方法，临床观察很有效。这究竟是什么原因，让人很难理解。研究表明，顽固性腹泻破坏了肠道的正常菌群，服用“童便”可补充“双歧杆菌”这一类肠道益菌群，从而治愈顽固性腹泻。制成补充双歧杆菌的制剂，就不会有人去服用“童便”了。

无论什么时代，能得到因果关系当然比简单的相关关系要好。科学研究止步于相关关系是一种不负责任的态度，是严谨的学者所不能容忍的，必须对发现的现象进行因果解读。任何一项新技术、新算法以及新产品，不经过试验鉴定，如何确保它达到了各项设计指标？人们绝不允许把自己的生命曝露在未经验证的技术和产品前。大数据时代带来了很多新的问题，如算法的试验评估、无人系统的试验评估等，实质上是给实验设计与分析带来新的挑战。

1.1.3 试验设计的发展历程

试验设计是使用频率最高的统计方法之一，统计学家 G. P. Box 说过，假如有 10% 的工程师使用试验设计方法，产品的质量和数量都会得到很大提高。质量工程创始人田口玄一 (Genichi Taguchi) 博士说过，不懂试验设计的工程师只能算半个工程师。可见试验设计这一学科的重要性。采用文献 [17] 中的划分，将试验设计的发展历程分为四个阶段¹：

¹<https://newonlinecourses.science.psu.edu/stat503/node/6/>

起源阶段: 1918 – 1940s 的农业实验

试验设计起源于世纪 20-30 年代 R. A. Fisher 爵士在 Rothamsted 农业实验站的工作。农业试验的特点是周期长，干扰因素多。Fisher 意识到生成数据的试验过程的缺陷会影响数据的分析。通过与许多领域的科学家和研究者交流讨论，他提出了试验设计的三大原则：重复、区组和随机化。他与他的同事 Frank Yates 提出正交设计、拉丁方、因子设计以及方差分析等概念，建立了试验设计的理论基础。

第二次世界大战也对统计学的发展产生了重要影响，著名的序贯分析法就起源于统计学家 Wald 分析短程火炮射击精度的工作。

第一个工业时期: 1951 – 1970s 的后期.

这一时期是由 (Box & Wilson, 1951) 提出响应曲面法 (response surface method) 催生的。他们认识到工业试验与农业实验有两点根本不同：响应变量几乎可以被立即观测到；试验者可以很快从一小组试验中得到用于规划下个试验的重要信息。这被 Box 称为工业试验的及时性和序贯性。在接下来的 30 年中，响应曲面法和其它设计技术在化工领域和流程工业 (process industries) 中得到广泛的应用。响应曲面法利用简单的一次或二次曲面对响应与试验因子之间的关系建模，通过试验设计来寻找因子的最佳组合，即响应函数的极值点。有趣的是，G. Box 是 Fisher 的女婿，已于 2013 年，他早期有化工产业的工作经历，后供职于美国威斯康辛大学 (University of Wisconsin)。

在此期间，Kiefer(1959, 1961) 和 Kiefer and Wolfowitz(1959) 从提高参数估计精度的角度，建立了最优回归设计的理论。当然，由于受计算手段的限制，最优回归设计在当时没有得到广泛的应用。随机算法和计算能力的发展，最优回归设计的应用逐渐广泛起来。本书的第三章将介绍最优回归设计和响应曲面法。

第二个工业时期: 1970s 的后期 – 1990

这一时期由一些企业的质量改进计划推进。二战后，日本的工业产品廉价但质量极差，美国工程师、统计学家 W. Edward Deming 于上世纪五十年代将统计质量控制 (statistical quality control) 引入日本，开启了试验设计的第二个工业时期，或称统计质量革命时期。日本汽车工业率先采用统计质量控制过程并开展试验，由统计质量控制与试验设计产生了管理技术持续质量改进 (continuous quality improvement, CQI) 和全面质量管理 (total quality management, TQM) 技术，成为企业管理的重要理念，日本工业产品质量开始得到全面提升。

日本工程师田口玄一博士利用正交阵列 (orthogonal arrays) 独立提出了一系列部分因子设计的技术，还提出了鲁棒参数设计和过程鲁棒性的概念，今天被称为稳健参数设计。

现代时期：始于 1990 年前后

1990 前后，全球化带来的经济竞争加剧驱动，由当时在摩托罗拉任职的工程师比尔·史密斯 (Bill Smith) 提出的一种新的持续质量改进方法六西格玛法 (Six Sigma) 逐渐开始流行。六西格玛已成为一家著名公司，该公司利用现有试验设计和统计方法，提供一整套全面质量管理和持续质量改进的流程和组织架构。随着计算机仿真技术的不断发展，计算机试验设计逐渐成为问题，(Santer, 1985) 首次提出计算机试验设计的概念。

文献 [17] 的划分忽略了临床实验的发展，临床实验中的随机双盲实验对整个试验设计领域的发展有很大的影响。

我国在试验设计领域起步较晚，著名数学家华罗庚教授于 20 世纪 70 年代初，面向全国大力推广优选法。1978 年，为解决飞航导弹研制中的实际问题，由方开泰和王元创立了均匀设计。总之，试验设计是一门由应用推动的统计学科。在其发展过程中，产生了因子设计、稳健参数设计、回归设计、混料设计和计算机试验设计等众多有特色的分支。受时间和篇幅限制，本书选择因子设计、回归设计和计算机试验设计为例，叙述试验设计的基本思想和方法。

1.1.4 实验设计与分析的软件

可用于试验设计和数据分析的商业软件包括 SAS, JMP, SPAA, MATLAB, S-PLUS, Minitab, Design-Expert 等。这些软件中，除了 Design-Expert 外，其余都是著名的统计分析软件。关于这些软件的优缺点，读者可在网上查到，或通过使用自己感受，这里不做评述。

本书推荐使用 R（可访问网址 <https://www.r-project.org> 获得）及其交互式开发环境 (IDE) RStudio（可访问网址 <https://rstudio.com> 获得）。R 至少具有以下优势：

- 免费、开源、跨平台；
- 对数据分析根深蒂固地支持，包括缺失值、数据框和子集选取等许多特性；
- 大量可以用于数据导入与操作、统计建模、机器学习的添加包 (package) 可供使用，本书中几乎所有的试验设计和数据分析方法，都可以找到相应的包来实现；
- 简单易学，读者可轻松找到大量学习资料，也可借助添加包 `swirl`，还可方便地在网站
 - <https://stat.ethz.ch/mailman/listinfo/r-help>
 - <https://groups.google.com/forum/#!forum/ggplot2>
 - <https://stat.ethz.ch.cn1/mailman/listinfo/r-sig-mixed-models>中得到专家的帮助；
- 便于学术交流，统计学和机器学习领域的研究者在发表论文时，经常会同时发布一个相应的 R 添加包，使得我们马上可以获得最新的统计分析方法；此外，R 添加包能够绘制很漂亮的统计图形，这对于展示自己的工作非常有益；
- 强大的函数式编程和元编程工具，可与高性能编程语言 (C、Fortran 和 C++) 连接。

2019 年 7 月 31 日举办的国际统计学年会上，考普斯总统奖 (The Committee of Presidents

of Statistical Societies Awards, COPSS) 颁给了 RStudio 首席科学家 Hadley Wickham. Wickham 的主要贡献是开发了包括图形可视化添加包 `ggplot2` 在内的诸多 R 添加包, 其开发的添加包下载量在近一年内突破了 1.3 亿次, 近两年内超过 2 亿次. COPSS 总统奖设立于 1976 年, 每年授予一位 40 岁以下的统计学最杰出的学者, 有着统计学“诺贝尔”奖的美誉, 是统计学领域的最高奖项. 该奖由美国统计协会 (American Statistical Association, ASA)、加拿大统计学会 (Statistical Society of Canada, SSC)、国际数理统计学会 (Institute of Mathematical Statistics, IMS) 等权威机构核定授予, 这是该奖第一次颁发给统计软件开发者, 由此可见 R 在当今统计学界中的重要地位.

当然, R 也不是完美的, 它更注重结果而非过程, 它的大多数用户都不是程序员, 这导致其效率往往不高. 为了方便后续课程的学习, 本节的剩余部分对 R 的常用数据结构、编程风格以及函数进行简单介绍, 强烈推荐读者通过 `swirl` 包来学习 R 语言.

常用数据结构

根据数据的维度和它们是同质 (由相同类型的数据组成) 还是异质 (可由不同类型的数据组成), 可对 R 的基础数据结构分类:

	同质	异质
1 维	原子向量 (atomic vector)	列表 (list)
2 维	矩阵 (matrix)	数据框 (data frame)
n 维	数组 (array)	

所有其它对象都是在这些基础上构建的. 需要注意的是, R 中没有标量类型, 即单个数字或者字符串也是当作长度为 1 的向量处理的. 如果想知道一个对象是由什么数据结构构成的, 可以使用函数 `str()`, 它是 `structure` 的缩写.

常见的原子向量有 4 种, 逻辑型 (logical)、整型 (integer)、双精度型 (double) 和字符型 (character). 通常用函数 `c()` 来构造原子向量, 它是 `combine` 的缩写. 原子向量可以被展开, 即函数 `c()` 可以嵌套使用. 如:

```

1 dbl_var <- c(1, 1.1, 2.0)
2 int_var <- c(1L, 2L, 3L)
3 log_var <- c(TRUE, FALSE, T, F)
4 chr_var <- c("Hello", "world")
5 dbl_var2 <- c(1, c(2, 3, 4))

```

给定一个向量, 可以使用 `typeof()` 来确定它的类型, 也可以用“`is`”函数来判断它是否为指定的类型: `is.character()`, `is.double()`, `is.integer()`, `is.logical()`, `is.numerical()`.

```

1 int_var <- c(1L, 2L, 3L)
2 typeof(int_var)
3 #> [1] "integer"
4 is.integer(int_var)
5 #> [1] TRUE

```

```

6 | is.atomic(int_var)
7 | #> [1] TRUE

```

在 R 中, 符号 “#” 表示注释, 我们将输出作为注释列在代码清单中.

原子向量的所有元素必须具有相同的类型, 所以当把不同的类型的数据结合成一个向量时, 它们会被强制转换成最具灵活性的数据类型. 数据类型的灵活性由低到高的排序为: 逻辑型、整型、双精度型和字符型. 例如, 把一个字符型原子向量和一个整型原子向量结合在一起时会产生一个字符型原子向量. 当一个逻辑型向量被强制转化为整型或双精度型时, TRUE 会变成 1, FALSE 会变成 0, 于是可以方便地使用函数 `sum()` 和 `mean()`.

```

1 | x <- c(FALSE, TRUE, TRUE)
2 | as.numeric(x)
3 | #> [1] 0 1 1
4 | sum(x)
5 | #> [1] 2
6 | mean(x)
7 | #> [1] 0.6666

```

其中, 函数 `as.numeric()` 将 `x` 强制转换为双精度型, 也可以使用函数 `as.double()`. 强制转换通常是自动进行的, 大多数数学函数, 如 `+`、`log()`、`abs()` 等, 会将数据转换为双精度型或整型. 大多数逻辑运算符 (`&`、`|`、`any` 等) 会将数据转换为逻辑型. 如果强制转换会造成数据丢失, R 会发出警告信息. 如果可能产生混淆, 可以使用函数 `as.character()`、`as.double()`、`as.integer()` 或 `as.logical()` 进行显式强制转换.

与原子向量不同, 列表中的元素可以是任意类型, 甚至包括列表, 因此列表也成为递归 (recursive) 向量. 使用函数 `list()` 来构建列表.

```

1 | x1 <- list(1:3, "a", c(TRUE, FALSE, TRUE), c(2.1, 5.9))
2 | str(x1)
3 | #> List of 4
4 | #> $ : int [1:3] 1 2 3
5 | #> $ : chr "a"
6 | #> $ : logi [1:3] TRUE FALSE TRUE
7 | #> $ : num [1:2] 2.1 5.9
8 | x2 <- list(list(list(list())))
9 | str(x2)
10 | #> List of 1
11 | #> $ :List of 1
12 | #> ..$ :List of 1
13 | #> ...$ : list()
14 | is.recursive(x2)
15 | #> [1] TRUE

```

函数 `c()` 可以将多个列表结合成一个列表. 如果将原子向量与列表结合在一起, `c()` 会强制将原子向量转换成列表.

```

1 | x <- list(list(1, 2), c(3, 4))
2 | y <- c(list(1, 2), c(3, 4))
3 | str(x)
4 | #> List of 2
5 | #> $ :List of 2
6 | #> ..$ : num 1
7 | #> ..$ : num 2
8 | #> $ : num [1:2] 3 4

```

```

9 | str(y)
10| #> List of 4
11| #> $ : num 1
12| #> $ : num 2
13| #> $ : num 3
14| #> $ : num 4

```

R 中经常用列表来构造一些复杂的数据结构, 例如数据框和很多函数的返回对象都是列表.

所有对象都可以通过附加的属性来存储它的元数据, 对象的所有属性可当作一个命名列表, 每个名字都是独一无二的. 可通过函数 `attr()` 来单独访问对象的每一个属性, 也可以使用函数 `attributes()` 同时访问对象的所有属性.

```

1 y <- 1:10
2 attr(y, "my_attribute") <- "This is a vector"
3 attr(y, "my_attribute")
4 #> [1] "This is a vector"
5 str(attributes(y))
6 #> List of 1
7 #> $ my_attribute: chr "This is a vector"

```

名字 (name)、**维度** (dimension) 和**类** (class) 是对象的最终要的 3 个属性, 它们可以使用特定的存储函数 (accessor function) 来获取和设置: `names(x)`, `dim(x)`, `class(x)`, 而不是 `attr(x, "name")`, `attr(x, "dim")`, `attr(x, "class")`. 可用以下三种方式给向量的每个元素一个名字.

```

1 x <- c(a = 1, b = 2, c = 3)
2 y <- 1:3; names(y) <- c("a", "b", "c")
3 z <- setNames(1:3, c("a", "b", "c"))

```

并不是向量的每一个元素都需要名字, 如果有些元素没有名字, `names()` 就为这些元素返回空字符串. 如果所有元素都没有名字, `names()` 就返回 `NULL`.

```

1 y <- c(a = 1, 2, 3)
2 names(y)
3 #> [1] "a"   ""   ""
4 z <- c(1, 2, 3)
5 names(z)
6 #> NULL

```

可以使用 `names(x) <- NULL` 来去掉向量中的名字. 名字非常重要, 可通过名字直接取到对应的数据.

因子是只能包含预先定义值的向量, 经常用于存储定性数据. 因子建立在整型向量的基础之上, 具有两个属性: `class()` 和 `levels()`. `class()` 使得因子与通常的整型向量有不同的行为, 而 `levels()` 定义因子中所有可能的取值.

```

1 x <- factor(c("a", "b", "b", "a"))
2 x
3 #> [1] a b b a
4 #> Levels: a b
5 class(x)
6 #> [1] "factor"
7 levels(x)
8 #> [1] "a" "b"

```

不能给因子的元素赋予水平以外的值:

```

1 x <- factor(c("a", "b", "b", "a"))
2 x[2] <- "c"
3 #> Warning: invalid factor level, NA generated
4 x
5 #> [1] a <NA> b a
6 #> Levels: a b

```

不能利用函数 `c()` 将两个因子向量组合在一起:

```

1 c(factor("a"), factor("b"))
2 #> [1] 1 1

```

因子向量对于存储定性数据是非常方便的:

```

1 sex_char <- c("m", "m", "m")
2 sex_factor <- factor(sex_char, levels = c("m", "f"))
3 table(sex_char)
4 #> sex_char
5 #> m
6 #> 3
7 table(sex_factor)
8 #> sex_factor
9 #> m f
10 #> 3 0

```

给一个原子向量添加 `dim()` 属性后, 它的行为就像多维数组了. 数组的一个特例就是矩阵, 它是二维的.

```

1 a <- matrix(1:6, ncol = 3, nrow = 2)
2 b <- array(1:12, c(2,3,2))
3 b
4 , , 1
5 [,1] [,2] [,3]
6 [1,] 1 3 5
7 [2,] 2 4 6
8 , , 2
9 [,1] [,2] [,3]
10 [1,] 7 9 11
11 [2,] 8 10 12
12 c <- 1:6
13 dim(c) <- c(3, 2)
14 c
15 [,1] [,2]
16 [1,] 1 4
17 [2,] 2 5
18 [3,] 3 6
19 dim(c) <- c(2, 3)
20 c
21 [,1] [,2] [,3]
22 [1,] 1 3 5
23 [2,] 2 4 6

```

在矩阵中, 与 `c()` 对应的函数是 `cbind()` 和 `rbind()`; 在数组中与 `c()` 对应的函数是添加包 `abind` 提供的函数 `abind()`. 可用函数 `t()` 对矩阵进行转置. 可用函数 `is.matrix()` 和 `is.array()` 来判断一个对象是矩阵还是数组, 可以使用函数 `as.matrix()` 和 `as.array()` 将一个向量转换为矩阵或数组.

数据框是 R 中存储数据使用最多的数据结构, 系统地使用它 (<http://vita.had.co.nz/papers/tidy-data.pdf>) 可使得数据分析变得更加容易. 数据框本质上是由相同长度的向量组成的列表, 同时具有矩阵的性质和列表的性质. 因此可以对数据框使用函数 `names()`, `colnames()` 和 `rownames()`, 其中 `names()` 和 `colnames()` 的返回值相同. 对数据框使用 `length()` 和 `ncol()` 都返回列数, 而使用 `nrow()` 返回行数.

使用 `data.frame()` 来构建数据框, 它的输入是已经命名的向量.

```
1 dafr <- data.frame(x = 1:3, y = c("a", "b", "c"))
2 str(dafr)
3 #> 'data.frame': 3 obs. of 2 variables:
4 #> $ x: int 1 2 3
5 #> $ y: Factor w/ 3 levels "a","b","c": 1 2 3
```

`data.frame()` 的默认行为是把字符串转换称因子, 使用参数 `stringsAsFactors = FALSE` 来禁止这种转换.

```
1 dafr <- data.frame(x = 1:3, y = c("a", "b", "c"), stringsAsFactors = FALSE)
2 str(dafr)
3 #> 'data.frame': 3 obs. of 2 variables:
4 #> $ x: int 1 2 3
5 #> $ y: chr "a" "b" "c"
```

判断一个类型是否为数据框, 可使用函数 `class()` 和 `is.data.frame()`. 可以使用 `as.data.frame()` 将对象强制转换成数据框:

- 向量将转换为一列的数据框;
- 列表将为每个元素创建一列, 如果列表元素的长度不一致, 就会报错;
- 矩阵将转换为具有相同行数和列数的数据框.

可以使用 `cbind()` 和 `rbind()` 对数据框进行合并:

```
1 cbind(dafr, data.frame(z=3:1))
2 #>   x y z
3 #> 1 1 a 3
4 #> 2 2 b 2
5 #> 3 3 c 1
6 rbind(dafr, data.frame(x=10, y= "z"))
7 #>   x y
8 #> 1 1 a
9 #> 2 2 b
10 #> 3 3 c
11 #> 4 10 z
```

当使用 `cbind()` 时, 两个数据框的行数必须保持一致, 而当使用 `rbind()` 时, 两个数据框的列名和列数都必须保持一致. 要注意 `cbind()` 将两个向量合并为矩阵, 而并不是数据框.

子集选取

R 有强大而快速的子集选取运算符, 掌握子集选取技术可以利用非常简明的语句来对数据进行复杂的操作, 这是其它编程语言所无法比拟的.

利用子集选取运算符 [，可以有五种方法来为一个向量选取子集。以原子向量 $x <- c(2.1, 0.2, 2.3, 1.4)$ 为例。

- 正整数返回指定位置上的元素：

```

1 x[c(3,1)]
2 #> [1] 2.3 2.1
3 #可重复选取同一位置的元素
4 x[c(1,1)]
5 #> [1] 2.1 2.1
6 #实数索引会默认截断为整数
7 x[c(3.2, 3.4)]
8 #> [1] 2.3 2.3

```

- 负整数返回不包含指定位置上的元素：

```

1 x[-c(1,3)]
2 #> [1] 0.2 1.4

```

注意，不能同时使用正数和负数。

- 逻辑向量只选择对应位置为 TRUE 的元素，如果逻辑向量比要从中选取子集的向量短，那么逻辑向量将会被循环使用直到与对应向量有相同的长度。

```

1 x[c(TRUE, TRUE, FALSE, TRUE)]
2 #> [1] 2.1 0.2 1.4
3 x[c(TRUE, FALSE)]
4 #> [1] 2.1 2.3

```

- 空索引返回原始向量：

```

1 x[]
2 #> [1] 2.1 0.2 2.3 1.4

```

- 0 索引返回长度为 0 的向量：

```

1 x[0]
2 #> numeric(0)

```

- 字符串型向量返回与索引中名字相匹配的元素：

```

1 (y <- setNames(x, letters[1:4]))
2 #> a b c d
3 #> 2.1 0.2 2.3 1.4
4 y[c("c", "d", "a", "f")]
5 #> c d a <NA>
6 #> 2.3 1.4 2.1 NA

```

列表的子集选取符号 [与原子向量使用方式相同，它返回一个列表，这里就不叙述了。

对矩阵和数组进行子集选取的最常用的办法是对一维子集选取方法进行泛化：为每一维数据给出一个一维索引，中间用逗号隔开。如果某一维索引为空，则保留这一维的所有数据。

```

1 a <- matrix(1:9, nrow = 3)
2 colnames(a) <- c("A", "B", "C")
3 a[1:2,]
4 #> A B C
5 #> [1,] 1 4 7
6 #> [2,] 2 5 8

```

```

7 | a[c(T, F, T), c("B", "A")]
8 | #>     B A
9 | #> [1,] 4 1
10 | #> [2,] 6 3
11 | a[0, -2]
12 | #>     A C

```

数据框兼具列表和矩阵的特点：如果仅仅用一个单一的向量来选取数据框的子集，则数据框的行为就像列表；如果使用两个向量来对数据框选取子集，则数据框的行为就像矩阵。

```

1 | df <- data.frame(x = 1:3, y = 3:1, z = letters[1:3])
2 | df[df$x == 2, ]
3 | #>   x y z
4 | #> 2 2 2 b
5 | df[c(1,3),]
6 | #>   x y z
7 | #> 1 1 3 a
8 | #> 3 3 1 c
9 | df[c("x", "z")]
10 | #>  x z
11 | #> 1 1 a
12 | #> 2 2 b
13 | #> 3 3 c
14 | df[, c("x", "z")]
15 | #>  x z
16 | #> 1 1 a
17 | #> 2 2 b
18 | #> 3 3 c
19 | str(df["x"])
20 | #> 'data.frame': 3 obs. of 1 variable:
21 | #> $ x: int 1 2 3
22 | str(df[, "x"])
23 | #> int [1:3] 1 2 3

```

还有两个子集选取运算符：[[和 \$. [[和 [类似，但它只能返回一个值。当处理列表时应当使用 [[，因为它能够返回列表的内容，而 [总时返回一个列表。\$ 运算符与选定的字符串一起就成了 [[的简写。

```

1 | a <- list(a = 1, b = 2)
2 | a["a"]
3 | #> $a
4 | #> [1] 1
5 | a[["a"]]
6 | #> [1] 1
7 | a$a
8 | #> [1] 1
9 | typeof(a["a"])
10 | #> [1] "list"
11 | typeof(a[["a"]])
12 | #> [1] "double"

```

所有子集选取运算符都可以与赋值结合在一起使用，从而修改输入对象的选定的值。

```

1 | x <- 1:5
2 | x[c(1,2)] <- 2:3
3 |
4 | #> [1] 2 3 3 4 5

```

函数与编程风格

在 R 中, 函数本身也是对象, 它由三个部分组成:

- `body()`, 函数的内部代码;
- `formals()`, 控制如何调用函数的参数列表;
- `environment()`, 函数变量位置的“地图”, 如果没有显示环境, 则表明该函数是在全局环境下构建的.

我们可以象处理其他对象那样处理函数.

```

1 f <- function(x) x^2
2 f
3 #> function(x) x^2
4 formals(f)
5 #> $x
6 body(f)
7 #> x^2
8 environment(f)
9 #> <environment: R_GlobalEnv>

```

原则上所有函数都应包含上述三部分, 但也有例外: 原函数. 原函数直接调用 C 代码且不包含 R 代码, 因此它的 `formals()`、`body()` 和 `environment()` 都是 `NULL`. 原函数只存在于 R 的基础包中, 由于它们在低层运算, 因而更高效, 参数匹配也有不一样的规则. 原函数的行为于 R 中其它函数不同, 因此 R 的核心团队通常避免创建这样的函数, 除非万不得已.

在调用函数时设置参数的方法包括: 指定参数位置、输入参数全名或部分名字. 将实参映射到形参的优先级是: 首先将名字完全匹配的参数进行映射; 再将前缀匹配的参数进行映射; 最后将位置匹配的参数进行映射.

```

1 f <- function(abcdef, bcde1, bcde2){
2   list(a = abcdef, b1 = bcde1, b2 = bcde2)
3 }
4 str(f(1,2,3))
5 #> List of 3
6 #> $ a : num 1
7 #> $ b1: num 2
8 #> $ b2: num 3
9 str(f(2, 3, abcdef = 1))
10 #> List of 3
11 #> $ a : num 1
12 #> $ b1: num 2
13 #> $ b2: num 3
14 str(f(2, 3, a = 1))
15 #> List of 3
16 #> $ a : num 1
17 #> $ b1: num 2
18 #> $ b2: num 3
19 str(f(1, 3, b = 1))
20 #> Error in f(1, 3, b = 1) : argument 3 matches multiple formal arguments

```

R 提供了大量的函数可供使用, 例如

- 基础数学函数: `abs`, `sign`, `acos`, `asin`, `atan`, `atan2`, `sin`, `cos`, `tan`, `ceiling`, `floor`, `round`, `trunc`, `signif`, `exp`, `log`, `log10`, `log2`, `sqrt`, `max`, `min`, `prod`, `sum`, `cummax`,

- cummin, cumprod, cunsum, diff, pmax, pmin, range, ...;
- 向量与矩阵相关函数: c, matrix, length, dim, ncol, nrow, cbind, rbind, names, colnames, rownames, t, diag, sweep, rep, sample, ...;
 - 统计分析相关函数: duplicated, unique, merge, order, rank, quantile, sort, qbeta, rnorm, ...; 文件处理相关函数: count.files, read.csv, write.csv, read.delim, write.delim, readLines, writeLines, file.path, file.choose, ...

不需要了解这些函数的细节, 知道它们的存在即可. 如果需要用到它们, 使用 R 的帮助文档. 例如, 想了解函数 `merge()` 的用法, 可以利用代码

```
1 > help("merge")
```

或

```
1 > ?merge
```

获得如下帮助文档:

R: Merge Two Data Frames

merge {base}

R Documentation

Merge Two Data Frames

Description

Merge two data frames by common columns or row names, or do other versions of database *join* operations.

Usage

```
merge(x, y, ...)
## Default S3 method:
merge(x, y, ...)

## S3 method for class 'data.frame'
merge(x, y, by = intersect(names(x), names(y)),
      by.x = by, by.y = by, all = FALSE, all.x = all, all.y = all,
      sort = TRUE, suffixes = c(".x", ".y"), no.dups = TRUE,
      incomparables = NULL, ...)
```

Arguments

<code>x, y</code>	data frames, or objects to be coerced to one.
<code>by, by.x,</code>	specifications of the columns used for merging. See 'Details'.
<code>by.y</code>	
<code>all</code>	logical; <code>all = L</code> is shorthand for <code>all.x = L</code> and <code>all.y = L</code> , where <code>L</code> is either <code>TRUE</code> or <code>FALSE</code> .
<code>all.x</code>	logical; if <code>TRUE</code> , then extra rows will be added to the output, one for each row in <code>x</code> that has no matching row in <code>y</code> . These rows will have <code>NAs</code> in those columns that are usually filled with values from <code>y</code> . The default is <code>FALSE</code> , so that only rows with data from both <code>x</code> and <code>y</code> are included in the output.
<code>all.y</code>	logical; analogous to <code>all.x</code> .
<code>sort</code>	logical. Should the result be sorted on the <code>by</code> columns?
<code>suffixes</code>	a character vector of length 2 specifying the suffixes to be used for making unique the names of columns in the result which are not used for merging (appearing in <code>by</code> etc).
<code>no.dups</code>	logical indicating that <code>suffixes</code> are appended in more cases to avoid duplicated column names in the result. This was implicitly false before R version 3.5.0.
<code>incomparables</code>	values which cannot be matched. See <code>match</code> . This is intended to be used for merging on one column, so these are incomparable values of that column.
<code>...</code>	arguments to be passed to or from methods.

该文档详细列出了函数 `merge()` 的使用方法.

好的编程风格就像正确使用标点符号, 没有它也可以, 但是有它能够让你编写的程序更容易读懂. 使用 R 时, 应当保持以下编程风格:

- 变量和函数名都采用小写字母，使用下划线将名字中的单词隔开，变量名用名词，函数名用动词，追求简洁而有意义的名字，并避免使用现有的函数和变量名字.
- 合理使用空格和缩进，使得代码整齐干净. 例如，所有中缀运算符 ($=$, $+$, $-$, $<-$) 的两边使用空格，但 $:$ 、 $::$ 和 $:::$ 两侧不需要空格.
- 大括号的左边不应独占一行，它的后边应该新起一行. 大括号右边独占一行，除非它的后边是 `else`. 对大括号内的代码要进行缩进.

```

1 if(y == 0){
2   log(x)
3 } else {
4   y^x
5 }
```

- 控制行的长度，如果某一行太长，应当将某些功能打包为函数;
- 赋值时使用 $<-$ 而不是 $=$.
- 合理使用注释，并使用 $-$ 或 $=$ 构成的注释行将文件分成易于理解的段落.

添加包的使用

使用 R 添加包需要先安装. 可在联网状态下使用如下语句

```
1 install.packages("stats")
```

安装添加包 `stats`, 也可利用 RStudio 的工具栏 Tools -> Install Packages 选项安装. 安装完后使用

```
1 library(stats)
```

即可使用包 `stats` 中的函数和数据了.

本书中用的的 R 添加包包括: `agricolae`, `daewr`, `stats`, `gplots`, `HH`, `AlgDesign`, `MASS`, `rms`, `Vdgraph`, `multcomp`, `BsMD`, `FrF2`, `DoE.base`, `lme4`, `effects`, 网址 <http://cran.r-project.org/web/views/ExperimentalDesign.html> 提供了许多有用的实验设计与分析添加包.

1.2 试验的基本流程

试验就是尝试，是一个主动学习的迭代过程。完成一项复杂试验任务的流程大致可划分为试验前的建模 (plan)、试验设计 (design)、试验实施 (implement) 和试验数据分析 (analysis) 四个阶段，如图1.4所示。为使试验任务完满完成，几乎每一步中都需要统计学家和相应领域的工程师密切合作。图1.4给出的是一个数学物理方法相结合的试验流程，如果物理信息缺乏，则需要通过因子筛选试验来明确主要的试验因子。本书重点考虑图1.4中的试验方案设计和试验数据分析，本节对试验前的建模略作介绍。

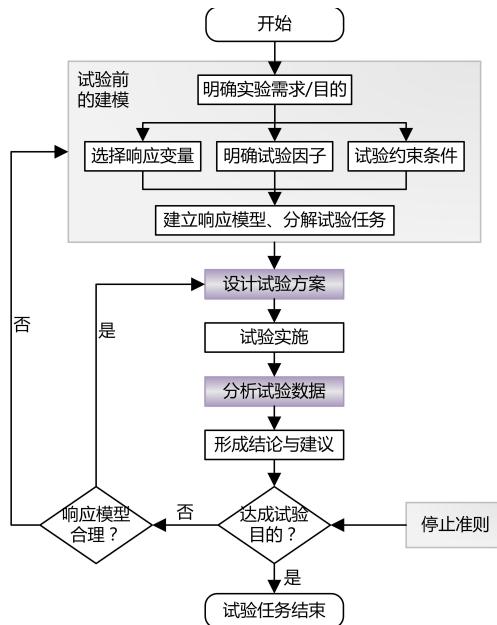


图 1.4: 实验设计与分析流程示意

试验的流程属于试验规划的内容，文献 [10, 5, 12, 31] 中对此作了详细分析，并结合各自的实践经验给出了详细步骤。考虑到实践经验的缺乏，图1.4给出的是一个简化版本。还需指出的是，在实际问题中，试验条件的构设也是重要环节之一。

1.2.1 试验前的建模

完成一项复杂的试验任务，首先需要明确试验需求和目的。一般来说，试验的目的可能是以下一个或几个。

- 处理比较：比较不同处理组合下响应的值；
- 因子筛选与敏感性分析：确定引起响应变化的主要因子；
- 找到使响应达到某特定值的处理组合，如最大、最小以及达标；

- 找到使响应达到目标值且受噪声因子影响最小的处理组合;
- 获得响应与因子之间的数学模型, 以预测响应.

例如, 明确了影响产品质量的因子后, 进一步期望优化因子组合以提高产品质量; 作战试验除了检验战斗力, 还希望明确战斗力生成的主要因子, 即所谓“一次试验、多方收益”.

根据试验目的, 需要选择响应变量和试验因子. 响应变量通常由试验目的决定, 同时希望它是可测量的. 这在有些试验任务中可以做到, 比如例1.8中的产量就是是可测量的. 很多情况下响应变量不可测量, 需要采用评估的方法才能得到. 例如, 某种食品的口感、产品的用户体验等. 再如, 毁伤试验中的毁伤效果, 作战试验中的作战效能、体系适用性等指标, 它们作为响应都是不可直接测量的. 对于复杂系统而言, 响应变量往往意味着一整套指标体系.

其次需要找到影响响应变量的因子, 并结合试验需求将因子划分为试验因子和噪声因子. 试验中相关的可控因子通常是很的, 试验因子选得太多可能会造成主次不分, 选得太少可能会因遗漏重要因子而归纳出错误的结论, 应当请有经验的专家根据试验目的共同讨论确定. 我们把噪声因子分为随机噪声因子、非随机噪声因子和研究者未意识到的噪声因子, 其中随机噪声因子采用重复的手段来降低其影响, 非随机噪声因子采用区组技术来处理, 而未意识到的噪声因子则采用随机化的技术处理, 1.3节中将详细介绍. 试验因子作为试验安排的对象, 以 \mathbf{x} 记之. 直观来看, 对响应影响规律复杂的试验因子要多选一些水平, 而影响规律简单的试验因子可少选一些水平. 实际操作中, 水平的确定还与控制精度有关. 例如, 若某试验中温度的控制只能作到 $\pm 3^\circ\text{C}$, 则控制在 85°C 时的实际温度将会在 $85^\circ\text{C} \pm 3^\circ\text{C}$ 波动, 3 个水平 ($80^\circ\text{C}, 85^\circ\text{C}, 90^\circ\text{C}$) 之间太近了, 应当加大, 例如 ($80^\circ\text{C}, 90^\circ\text{C}, 100^\circ\text{C}$). 对于连续变化的因子, 有时不直接划分水平, 而是通过定义某种准则, 采用优化的手段确定具体的水平值.

如果试验中包含定性因子, 可通过引入**伪变量** (pseudo-variable) 或**哑变量** (dummy variable) 将其数量化, 具体作法如下. 设定性因子 A 的取 q 个水平 A_1, \dots, A_q , 将 A 数量化需要引入 $q - 1$ 个伪变量 z_1, \dots, z_{q-1} , 其中

$$z_i = \begin{cases} 1, & \text{若 } A \text{ 取水平 } A_i, \\ 0, & \text{其余.} \end{cases}$$

这种方法在第三章和第四章中还会具体用到.

试验约束包括试验资源的约束和试验条件的约束. 试验资源主要指经济、时间等成本约束, 它限制了试验的次数. 试验条件约束则是对试验因子的控制能力, 例如导引头的挂飞试验, 其飞行速度往往达不到导弹的真实飞行速度. 试验条件约束限制了 \mathbf{x} 的取值范围, 一般表现为 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, 我们称 \mathcal{X} 为**试验范围**或**试验区域**. 一项试验任务中, 试验因子即可能是离散的, 也可能是连续的. 只要存在连续的试验因子, \mathcal{X} 就是无限集. 为了简单起见, 如果存在离散试验因子, 就将所有的因子都离散化, 即都划分为几个不同的水平. 如此一来, 我们只需考虑两种情况: 试验区域 \mathcal{X} 为由有限个处理组合组成有限集, 或为 \mathbb{R}^p 的连通子集.

响应建模是指根据领域知识、历史数据和专家经验建立因子与响应之间的响应模型的过程。它涉及到专门的领域知识，不在本书考虑的范围。从建模的角度，我们把领域知识划分三大类。

- **结构信息** (structure information): 包括指标体系的结构和被试系统的结构（或被试过程的工作流程），它的意义在于，响应函数的真实维数并不完全等于试验因子的个数，即部分试验因子只影响系统的部分指标。第五章将会详细介绍这类信息的应用。
- **机理信息** (mechanism information): 试验因子是如何影响指标的，因子之间是否有交互作用等等。有时，机理分析只能给出一些定性的结论，如某因子与某指标正相关，需要采用数学建模技术将这些定性结论定量化。
- **参数信息** (parameter information): 理想的情况下，利用结构信息和机理信息能够给出响应模型的参数化形式，这是历史数据和专家经验等其它领域知识可转化为模型中参数的信息，如参数的大致范围等等。

一般地，响应模型可抽象地记为：

$$y = F(\mathbf{x}, s, \omega), \quad (1.1)$$

其中， $s \in \mathcal{S}$ 表示抽象的未知参数， $\omega \in (\Omega, \mathcal{A}, \mu_s)$ 表示随机因子， μ_s 表示 ω 的概率分布仅与参数 s 有关； $F : \mathcal{X} \times \mathcal{S} \times \Omega \mapsto \mathcal{Y}$ 表示已知映射，且当 \mathbf{x} 和 s 给定时， $F(\mathbf{x}, s, \cdot) : \Omega \mapsto \mathcal{Y}$ 为可测映射。 F 中包含了系统的结构信息和机理信息。从不确定性的角度来看，

- s 体现了响应模型的认知不确定性，参数空间 \mathcal{S} 越“大”，认知不确定性就越大；
- ω 体现了响应模型的随机不确定性，它可以用分布 μ_s 来刻画。

认知不确定性可以通过试验不断约减，而随机不确定性则无法约减。利用响应函数的一般形式，可以把试验目标以数学语言表述为：

- (1) 比较诸处理 \mathbf{x}_i 之间的差异与优劣，即比较随机变量 $F(\mathbf{x}_i, s, \omega)$ 之间的大小，由于随机性的存在，根据假设检验的理论，需要重复试验才能得到可靠的结果；
- (2) 比较各因子的重要性以挑选出显著因子，这需要将响应的变动进行合适的分解，依此比较诸试验因子的主效应及其交互效应之间的显著性；
- (3) 获得响应在试验区域 \mathcal{X} （或其子集）上的均值 $\int_{\mathcal{X}} F(\mathbf{x}, s, \omega) d\mathbf{x}$ 、极值 $\sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} F(\mathbf{x}, s, \omega)$ 或 $\inf_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} F(\mathbf{x}, s, \omega)$ 的估计；
- (4) 获得响应函数的水平集 $\Gamma_{y_0} := \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} : F(\mathbf{x}, s, \omega) \geq y_0\}$ 的估计；
- (5) 找到某一处理 \mathbf{x}_0 ，使得该处理下的响应值 $F(\mathbf{x}_0, s, \omega)$ 即能达到要求，而且波动很小，这在工业工程中常常会用到；
- (6) 获得响应函数中参数 s 的估计。

军改后，我军建立的新的装备试验鉴定体系，军委层面在装备发展部设立有试验鉴定局，各军兵种均设立有相应的主管部门、研究机构和试验训练基地。习主席非常重视装备试验鉴定工作，多次针对试验鉴定作出重要指示，语气严厉，期望殷切，提出试验鉴定工作要摸清装

备底数的要求。“摸边探底”已成为装备试验鉴定领域的重要概念。然而，什么是“边”，什么是“底”，在实践中却产生了较大的争议，基地、部队和院校对其认识很难统一。造成这种争议的关键在于装备类型及其性能指标的多样性：从试验设计的角度来看，有些性能指标是通过响应刻画的，如命中概率；而有些性能指标是通过因子来刻画的，如潜艇的下潜深度。这种多样性使得从数学上无法统一刻画“边”和“底”。作者理解，“摸边”是指摸环境条件的边，即在什么条件下装备能够正常使用，在什么条件下装备无法使用或失效，对应上述第(4)条；“探底”则是探装备性能或效能的底，即在什么条件下装备能够发挥最优性能，对应上述第(3)条。实践中还分技术底数和使用底数，技术底数是指装备性能的全局最优，而使用底数则是在具体使用场景中装备所能达到的最优性能。而要想真正实现“摸边探底”的试验目标，则需要对响应关系有全局的认识。

1.2.2 试验设计

明确了响应变量、试验因子及其取值范围、建立了响应模型后，试验任务就从一项实际工作翻译成统计问题了。试验设计一词既可作动词理解，也可做名词理解。

作为动词的试验设计本质上是一个优化过程，即依据某一准则，从试验区域 \mathcal{X} 中挑选出部分试验点组成试验方案。一般地，包含如下三部分类容。

- (1) 依据试验资源约束确定试验样本量 (sample size determination). 试验样本量与所获信息构成一对**均衡关系** (trade-off)，统计学家们处理均衡关系通常采用如下三种思路：
 - 控制试验资源，使所获信息尽可能多；
 - 控制所获信息，使试验资源消耗尽可能少；
 - 定义损失函数，使损失函数尽可能小。损失函数实质上是一种价值观，例如“1 单位信息 = 1000 单位资源”。

有关样本量确定的问题，可参考 [4, 11, 16, 19, 23, 24, 36] 等文献。

- (2) 选择试验设计的准则，并依据该准则从 \mathcal{X} 中选取试验点集 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 。
- (3) 控制误差，排除干扰因子的影响，这将在 1.3 节中详细介绍。

这三部分类容实质上都是优化，它们一般可以分步实施。但如果不同的试验点处开展试验所消耗的资源不同，所得数据的精度也不同，则上述 (1) 和 (2) 不能拆开，只能通过求解一个大的优化问题来解决。

作为名词的试验设计指试验方案，是一个由试验点组成的集合 $\xi_n := \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 。可以用一个矩阵

$$\mathbf{D}_{\xi_n} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}$$

表示一个设计，也可以用一个离散概率分布

$$\xi_k = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_k \\ \frac{n_1}{n} & \frac{n_2}{n} & \cdots & \frac{n_k}{n} \end{pmatrix}$$

表示一个设计，其中 n_i 表示在点 \mathbf{x}_i 处的重复次数， $n_1 + n_2 + \cdots + n_k = n$. 进一步，可以用 \mathcal{X} 上任意一个分布来表示一个设计，待样本量 n 给定后，从该分布中抽取 n 个点作为试验点，从而避开样本量的问题。为了区分，称可以矩阵 \mathbf{D}_{ξ_n} 来表示的设计为一个**精确设计** (exact design); 称只能用 \mathcal{X} 上的离散概率分布来表示的设计为**离散设计** (discrete design); 称只能用空间 \mathcal{X} 上的连续概率分布来表示的设计为**逼近设计** (approximate design)。当然，离散与连续的刻画还取决于空间 \mathcal{X} 的结构。

1.2.3 试验数据分析

试验数据分析是指获得试验数据 $\{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, \dots, n\}$ 后从中提取有效信息的过程。数据分析方法主要包括方差分析法和回归分析法，第二章将详细介绍方差分析法，第三章将详细介绍回归分析法。

工程技术人员关心的另一个问题是如何评价一个试验方案，他们常问所给的设计是否具有代表性，或者覆盖性。然而，代表性和覆盖性只是工程技术人员的直观概念，没有严格数学定义，使得定量评价试验方案比较困难。这里提供两条思路。

- 一是从“质”的角度来衡量，即在相同的试验消耗下，该设计是否具有最优性。这就需要定义设计的最优性准则，这是试验设计的重要课题之一。
- 二是从“量”的角度角度来衡量。当前的试验方案是否充分，看追加试验的边际效益，即追加试验能提供多大的信息，或降低多少不确定性。如果追加试验的边际效益不大，则认为当前方案是充分的。

后续章节中将会陆续介绍设计的一些最优性准则以及度量信息量的方法。

容易理解，获取信息量的多少与试验方案有关，也与数据分析方法有关，还与试验前的建模有关。试验前的建模、试验设计和试验数据分析三者密不可分。不同的响应模型、不同的数据分析方法将导致不同的试验设计方法。实际问题中，试验设计于分析是一个复杂的优化问题，需要在统筹考虑各种约束的前提下给出较优的方案。

1.2.4 作战实验：恐怖的海峡

试验在军事领域也有着广泛的应用。一是试验是考核检验装备的唯一途径，任何一型新的装备都必须经过严格的试验鉴定才能生产定型和列装部队；二是试验是检验作战思想、部队编成和战略战术的有效途径。美国国防部非常重视试验的作用，认为这一过程将决定美军通过优化联合部队实现未来目标的基础，并把试验战略作为美国军事转型战略的基础。

作战试验通常是指有实装参与的试验，其样本量一般很少。而作战实验是指在计算机上进行仿真推演的实验，样本量可以很大。本节介绍一个典型的依托计算机仿真的作战实验案例：恐怖的海峡，内容主要来自知乎答主 Fisher 的回答¹。

美国兰德 (Rand) 公司以大陆和台湾之间的军事对抗为背景，于 2000 年发表了一份以“Dire Strait? Military Aspects of the China-Taiwan Confrontation and Options for U.S. Policy”为题的研究报告。该报告确定了帮助台湾保持足够的防御态势以对抗大陆的关键因素，提出了美国协助台湾解决这些问题的一系列行动建议。该报告的想定背景为：2005 年，大陆采用空中进攻和两栖登陆作战的作战方案对台发动进攻，具体作战过程分为 4 阶段：

- (1) 纠正制空权。除空对空作战外，还包括大陆对台湾的空军基地、地空导弹阵地、早期预警雷达和指挥与控制设施实施导弹攻击和空中打击。
- (2) 纠正制海权。包括空中力量、水面舰艇部队、潜艇部队和岸基反舰导弹部队等参战部队和反航空兵作战、反水面舰艇作战和反潜作战等样式，可与第一阶段同时进行。
- (3) 大陆夺取制空权后，通过空中打击集中摧毁沿岸据点、台军炮兵和装甲集群，全面“软化”岛上防御体系。
- (4) 在台湾沿海实施登陆作战。包括两栖登陆、伞降突击和直升机攻击，其目的是在岛上建立坚固的立足点，打垮台军的抵抗。

兰德公司通过定性分析认为，纠正制空权是重中之重，并基于其“联合一体化应急作战模型 (Joint Integrated Contingency Model)”对纠正空中优势进行了详细的定量分析。

一、实验前的建模

表 1.1: 大陆投入空中部队的规模与编成

机型	基本力量	大规模力量	未来力量
苏 -27	72	72	144
强 -5	120	216	0
歼轰 -7	48	48	72
歼 -7	168	288	144
歼 -8	144	288	144
歼 -10	24	24	48
苏 -30	0	0	24
轰 -6	48	48	48
预警机载指挥系统	6	6	6
辅助飞机	49	49	49
总计	679	1039	679

¹链接: <https://www.zhihu.com/question/57568661/answer/153525523>.

响应变量为推演结果 $y \in \{0, 1\}$, 包含“胜”“负”两个取值, 为定性响应. 影响空战结果的因子有很多, 兰德公司从中挑选出 7 个关键因子作为试验因子, 并给它们划分了水平.

- (1) 大陆投入攻击的空中部队的规模与编成. 分为基本力量、大规模力量和未来力量 3 个水平, 如表1.1所示. “基本力量”是根据大陆当时的武器装备估计最可能出动的飞机数量; “大规模力量”比“基本力量”规模大二分之一; “未来力量”包含了对大陆空军现代化速度的考虑, 规模与基本力量一样, 但先进战斗机数量更多.
- (2) 双方拥有超视距中程空空导弹的情况. 大陆可购买俄罗斯的 AA-12/R-77 “蝰蛇”式空空导弹, 而台湾则可购买美国的 AIM-120 中程空空导弹. 基于上述考虑, 将该因子划分为 4 个水平: 双方均无; 大陆无, 台湾有; 大陆有, 台湾无; 双方均有. 同时假设只要有, 则数量充足, 可满足 4 天高强度战斗的需要.
- (3) 大陆使用的中、近程弹道导弹的数量和质量, 划分为基本情况 (20 枚 DF-3, 80 枚 DF-21, 50 枚 DF-11, 80 枚 DF-15, 80 枚带 GPS 制导的 DF-15, 共 310 枚) 和大规模情况 (总数翻倍, 为 620 枚) 两个水平.
- (4) 大陆拥有的先进空射精确制导弹药的数量, 划分为基本情况 (300 枚) 和大规模情况 (3000 枚) 两个水平.
- (5) 台湾空军出动战斗架次的能力, 划分为基准架次的 100%、75% 以及 50% 三个水平.
- (6) 台湾空军机组人员的素质, 划分为达到美空军飞行员水平的 80% 和 60% 两个水平.
- (7) 美国陆基和海基空中力量参与台湾防御的程度. 划分为 6 个水平: 没有美国部队参战; 1 个舰载机联队在台湾以东海域作战; 驻扎在日本冲绳嘉手纳空军基地的 1 个美国空军战斗机联队参战, 有 72 架 F-15C 战斗机; 1 个舰载机联队和 1 个 F-15 战斗机联队参战; 2 个舰载机联队参战; 2 个舰载机联队和 1 个 F-15 战斗机联队参战.

试验因子及其水平划分总结在表1.2中.

表 1.2: “恐怖的海峡”中试验因子及其水平划分

因子	水平
大陆空军部队的规模与编成	基本力量、大规模力量、未来力量
先进超视距空空导弹能力	都没有、仅台湾有、仅中国有、双方都有
大陆中、近程弹道导弹力量	310 枚、620 枚
大陆空射精确制导弹药数量	300 件、3000 件
大陆空军出动战斗架次能力	100%、75%、50%
台湾空军机组人员的素质	80%、60%
美国介入的程度	不介入、1 个战斗机联队、1 个舰载机联队、1 个战斗机联队 1 个舰载机联队、2 个舰载机联队、2 个舰载机联队和 1 个战斗机联队

除了上述 7 个试验因子外, 其余的因子都作为噪声因子. 由于计算机仿真中, 所有因子

都是可控的, 兰德公司把噪声因子固定在设定的水平上. 如报告中假设大陆飞行员素质只达到美国空军飞行员水平的 50%, 台湾的兵力情况设定如表1.3和表1.4所示.

表 1.3: 台湾空军编成

机型	数量
F-16A/B	162
“幻影” 2000	54
“经国” 号 (IDF)	126
E-2T 机载预警与控制系统	8
其它各型飞机	44
总计	394

表 1.4: 台湾地对空导弹战斗序列

导弹类型	导弹连数量
“爱国者” PAC-2 型导弹	9 (每连 6 部 4 管发射架)
改进型 “霍克” 型导弹	36 (每连 18 部 3 管发射架)
“天弓” 型导弹	6 (每连 6 部 4 管发射架)

二、实验设计

采用全面实施的实验方案, 共得到 $3 \times 4 \times 2 \times 2 \times 3 \times 2 \times 6 = 1728$ 个实验点. 在作战实验中, 称一个实验点为一个作战想定样本, 一共 1728 个作战想定样本. 选定实验方案后, 便可在联合一体化应急作战模型中进行仿真推演实验了.

三、实验结果分析

由于所选的七个因子中大部分都是定性的, 因此无法建立连续的响应关系模型, 只能采用比较试验模型:

$$y_i = \mu_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, 1728.$$

每一个 i 表示一个作战想定样本. 由于计算机仿真没有随机干扰因子, 因而 $\varepsilon_i \equiv 0$, 故不需要重复试验. 在此基础上, 兰德公司对诸因子的各种水平下推演结果的占比做了统计分析. 得到总体结论是: 大陆近期内攻占台湾的任何企图都会是一场失败概率相当高的血腥战争.

图1.5中蓝色表示台湾军队几乎肯定能阻止大陆的进攻; 红褐色表示台湾至少能够稳住阵脚, 并且可能阻止或挫败大陆的登陆企图; 绿色表示大陆很可能对台湾实现了登岛进攻. 同时还分析了其它 6 个因子在图1.5中绿色的结果中的取值情况, 如表1.5所示. 以第一个 80% 为例, 表中数字表示大陆空军出动“基本力量”同时拥有超视距武器优势的样本量 ($1728 \times 1/3 \times 1/4 = 144$) 与大陆空军出动“基本力量”且获胜 (结果为红褐色) 的样本量的比值.

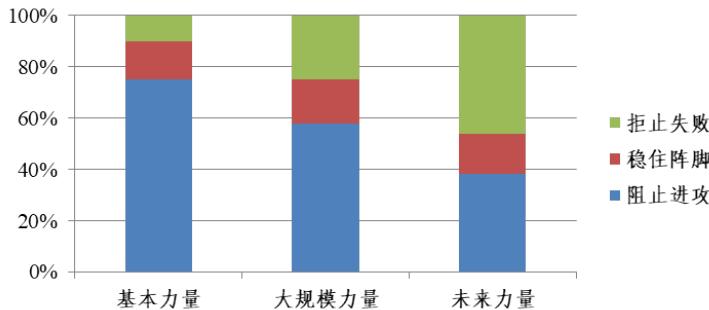


图 1.5: 大陆空军不同规模下的作战结果

表 1.5: 诸因子下想定样本在大陆成功夺取制空权样本中占比

因子	“基本力量”判例	“大规模力量”判例	“未来力量”判例
美国的有限介入	100%	81%	62%
大陆拥有超视距武器优势	80%	71%	51%
台湾出动飞机架次的能力受到压制	80%	75%	64%
台湾训练质量低劣	67%	65%	54%
大陆拥有更多战术导弹	56%	54%	51%
大陆拥有更多精确制导弹药	56%	54%	48%

图1.6展示的结果表明，台湾的空军基地必须始终保持作战能力才能与占数量优势的大陆空军持续作战. 为此，兰德公司建议台湾应关注机场的被动防御和快速修复措施.

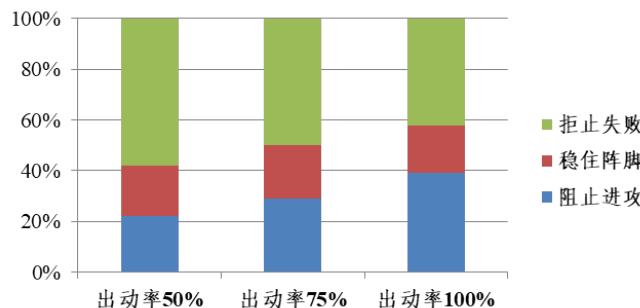


图 1.6: 无美军介入时台湾基地运转能力对作战结果的影响

图1.7表明，台湾在先进空对空武器方面至少要与大陆保持均势. 兰德公司建议一旦大陆从俄罗斯获得超视距空空导弹，美国应马上向台湾移交 AIM-120 超视距空空导弹.

图1.8的中间一列表示台湾空军训练质量达到美军训练水平的 80% 的条件下，给台湾空军增加 24 架 F-16 时的作战结果. 基于该图结果，兰德公司给出指出，在短时间内，提高台湾空军的训练质量比单纯提供更多的 F-16 更有利于台湾夺取空中优势.

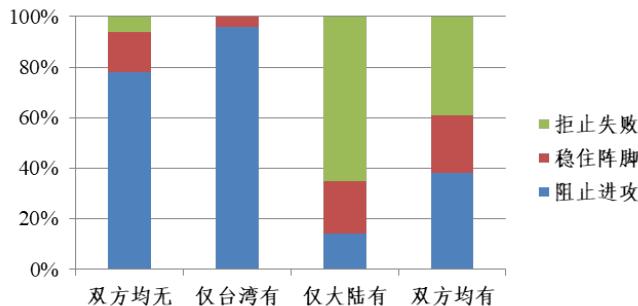


图 1.7: 先进的空对空武器（超视距空空导弹）对作战结果的影响

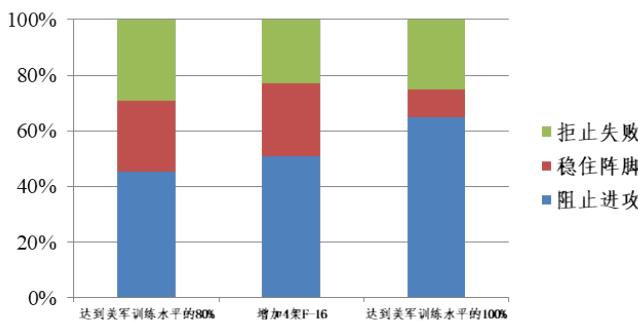


图 1.8: 台湾空军训练质量对作战结果的影响

图1.9表示美国不同程度的介入对作战结果的影响. 该图表明, 美国只需介入少许力量就能大幅提高台湾抵御大陆进攻的成功率. 图1.10展示了当大陆出动“未来力量”时美军不同程度的介入对作战结果的影响, 美军需要投入2个舰载机联队和1个战斗机联队才能取得较好的结果. 兰德公司的结论是, 美国干预的作用在当前就至关重要, 而且会越来越关键. 且在近期内支持台湾所需要的兵力大大低于五角大楼通常认为实施一场大规模战区战争所需要的兵力规模(在“沙漠风暴”期间, 美军出动了10个战斗机联队和6个航母作战大队).

兰德公司发布该报告后, 在两岸的学术界产生了巨大的影响. 从实验设计与分析的角度来看, 该报告对我们的启示主要有以下两点:

- 实际问题中影响因子非常多, 且很多因子都难以定量描述, 如果能够通过定性分析选择一些主要因子, 并取定水平, 将大大降低实验设计与分析的难度;
- 实验设计与分析只是一个工具, 实际问题的解决很大程度上依赖于专门知识, 如“恐怖的海峡”就严重依赖于兰德公司的“联合一体化应急作战模型”.

最后, 通过课程学习, 希望大家能够认识到以下几点:

- 实验设计与分析不应局限在使用何种设计方法来选择因子及其组合, 而应思考试验设计在整个试验中的作用, 把试验规划、试验设计与数据分析有机地结合起来;
- 科学研究是一个迭代的过程, 实验设计与分析也是一个迭代的过程;

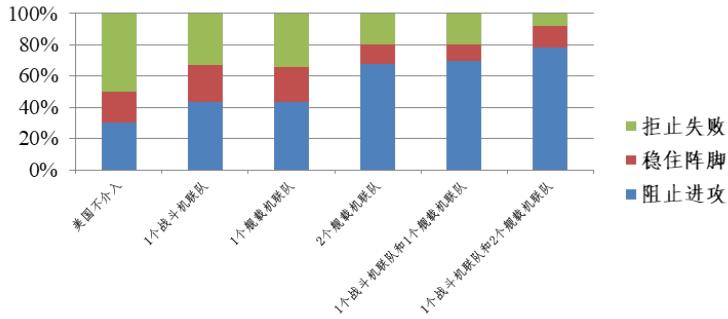


图 1.9: 美国介入的价值

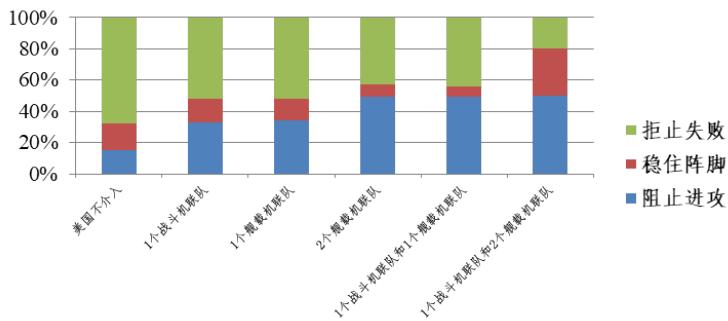


图 1.10: 大陆“未来力量”下美国介入的价值

- 实验设计与分析只是一个通用的工具，解决实际问题时必须结合专门的领域知识，我们应将本门课程当作通识课程来学习。

1.3 试验设计的基本原则

本节介绍试验设计奠基者 Fisher 提出田间试验设计三项基本原则：重复、随机化、区组。它们是处理噪声因子（或误差控制，error control）的基本技术：非随机噪声因子或者控制在某一固定水平上，或者采用区组的方法实现某种均衡；随机噪声因子通过重复来降低其影响；未意识到的噪声因子则采用随机化的办法来避免产生系统性偏差。

1.3.1 重复

重复 (replication)，即一个处理下重复试验若干次。若重复试验 m 次，其试验结果分别为 y_1, y_2, \dots, y_m 。假定

$$y_i = \mu + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2), \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

这里 μ 表示该处理下响应的真值。重复有两个作用：

(1) 提供方差 σ^2 的估计：

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \bar{y})^2,$$

其中 $\bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m y_i$ 表示样本均值。

(2) 提供 μ 的更为精确的估计： $\hat{\mu} = \bar{y} \sim N(\mu, \sigma^2/m)$ ，样本均值 \bar{y} 的方差是原来方差的 $1/m$ 。因而重复次数愈多，所得结论愈可信。

当不同处理的效应之间的差异超过随机噪声因子带来的波动时，才能对不同处理做出比较和选择。而随机噪声因子带来的波动随着重复的次数增加而降低，因此在比较不同的处理时，每一处理均需要有一定的重复次数。

注 1.1. $\bar{y} \sim N(\mu, \sigma^2/m)$ 是样本量确定的最基本依据。复杂样本量确定问题无外乎在此基础上还考虑先验信息、考虑均值 μ 与因子 x 有关、以及考虑不同点处试验的代价不同。

1.3.2 随机化

随机化 (randomization)，即试验单元的分配和处理的试验次序都要随机确定。随机化的意义包括：

- 使各次试验结果互相独立，便于采用各种统计方法分析试验数据；
- 避免未意识到的噪声因子带来系统性偏差，提高对试验误差估计的准确度。

借助 R 的基础包，可以很方便地实现试验次序和试验单元的随机化。设考察某个 3 水平试验因子，每个水平重复 4 次，可以利用如下代码得到试验计划。

```

1 set.seed(7638)
2 f <- factor(rep(c("a", "b", "c"), each = 4))
3 fac <- sample(f, 12)

```

```

4 eu <- 1:12
5 plan <- data.frame( runs = eu, levels = fac)
6 write.csv(plan, file = "Plan.csv", row.names = FALSE)

```

其中, 用到了 R 的原子向量、因子以及数据框等数据类型, 可参考1.1.4节. 函数 `sample()` 的使用方式为

```

1 sample(x, size, replace = FALSE, prob = NULL)

```

它默认是无放回抽样, 参数 `prob` 是一个维数与 `x` 相同的向量, 用于给 `x` 中不同的元素赋予不同的概率值. 函数 `write.csv()` 将数据框 `plan` 写入一个名为 `Plan.csv` 的文件中, 该文件可在当前工作目录下找到. 利用函数 `getwd()` 可以找到当前工作目录, 利用函数 `setwd()` 可以修改工作目录. `csv` 格式的文档可用 Excel 打开. 上述代码块的运行结果为

runs	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
levels	b	b	a	c	a	c	a	c	b	b	a	c

重复运行该代码块将得到相同的结果, 这是因为使用了命令 `set.seed(7638)`, 将该命令删去后即可得到不同的结果.

例 1.10 (绿茶叶酸测定试验 [1]). 考察不同产地绿茶的叶酸 (一种维生素 B) 含量是否有显著差异. 试验因子是绿茶的产地, 用 A 表示, 选四个不同的产地 A_1, A_2, A_3, A_4 , 它们构成因子 A 的四个水平. 为了测定误差, 需要重复. 重复数相等的设计称为平衡设计, 重复数不等的设计称为不平衡设计. 采用不平衡设计: A_1 制作了 7 各样品, A_2 制作了 5 个样品, A_3 和 A_4 各制作了 6 个样品, 共有 24 个样品等待测试. 一次测试就是一次试验. 试验次序要随机化, 为此把 24 次试验按序编号, 结果如下:

因子 A 的水平	试验编号						
	1	2	3	4	5	6	7
A_1							
A_2	8	9	10	11	12		
A_3	13	14	15	16	17	18	
A_4	19	20	21	22	23	24	

如果按试验号顺序进行, 一天内就完成这 24 个试验, 但从早到晚试验员的注意力、熟练程度和厌倦程度都会发生变化, 光线强度也会发生变化. 若测得产地 A_4 的叶酸含量较低, 这可能是产地的原因, 也可能是由于晚间试验引起的. 这种混杂现象 (*confounding*) 在设计中要尽力避免, 随机化是防止这种混杂的一种有效办法. 为了实现随机化, 可在 1 到 24 个试验号中一个接一个的随机抽取, 抽取所得的序列就是实际进行试验的次序, 这在 R 中使用命令 `sample(1 : 24, 24)` 即可实现. 这样安排的单因子试验在试验设计中称为不平衡 (或平衡) 完全随机设计 (*balanced, or unbalanced completely randomized design*).

1.3.3 区组

如何消除试验中已知且可控噪声因子的影响呢？有的噪声因子可以稳定在固定的水平上，而有的噪声因子则无法控制在一个水平上，如试验单元之间的差异等，对这些因子需要采用区组的技术。把条件接近的一组试验单元放在一起，称为一个区组（block），区组之间的试验条件允许有较大的差异。

例 1.11 (完全随机区组设计). 比较 3 个品种水稻的产量是否存在区别。现取 5 个不同土壤条件的地区，每个地区各选 3 块面积和形状都非常接近的试验田，如图 1.11 所示。若每块试验田安排一个品种，应该如何安排这 15 个试验？

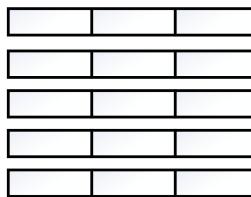


图 1.11：区组设计示意图

可按如下方案安排试验：把每个地区的三个试验单元作为一个区组，规定在每个区组内，三个品种各占一块地。至于区组内哪个品种占哪块地，则由随机的方式决定。这种试验安排称为完全随机区组设计 (*randomized complete block design, RCBD*)。利用 R 的基础包很容易给出完全随机区组设计的试验方案，这里我们使用 (*de Mendiburu, 2012*) 提供的包 agricolae 中的函数 `design.rcbd()` 来给出试验方案，代码如下：

```

1 install.packages("agricolae")
2 library(agricolae)
3 treat <- c(1,2,3)
4 outdesign <- design.rcbd(treat, 5, seed = 11)
5 rcb <- outdesign$book
6 levels(rcb$block) <- c("block1", "block2", "block3", "block4", "block5")

```

其中，命令 `install.packages("agricolae")` 可在联网状态下安装添加包 `agricolae`，如果已经安装该包，则应删去该行；函数 `design.rcbd()` 的参数 `seed` 确保每次运行结果一致，它的返回对象 `outdesign` 是一个列表，其结构如下：

```

1 str(outdesign)
#> List of 3
#> $ parameters:List of 7
#> ..$ design: chr "rcbd"
#> ..$ trt : num [1:3] 1 2 3
#> ..$ r : num 5
#> ..$ serie : num 2
#> ..$ seed : num 11
#> ..$ kinds : chr "Super-Duper"
#> ..$ : logi TRUE
#> $ sketch : chr [1:5, 1:3] "2" "1" "3" "3" ...
#> $ book : 'data.frame': 15 obs. of 3 variables:
#> ..$ plots: num [1:15] 101 102 103 201 202 203 301 302 303 401 ...

```

```
14 #> ..$ block: Factor w/ 5 levels "1","2","3","4",... : 1 1 1 2 2 2 3 3 3 4 ...
15 #> ..$ treat: Factor w/ 3 levels "1","2","3": 2 1 3 1 2 3 3 2 1 3 ...
```

列表 `outdesign` 的元素 `book` 是一个数据框, 它记录了试验方案, 它把每个试验单元称为 `plots`, 并用整数对其编号; 第 5 行命令将试验方案提取到 `rcb` 中; 第 6 行命令将数据框 `rcb` 中的因子类型 `block` 的水平 $1, 2, \dots, 5$ 修改为 `block1, block2, \dots, block5`. 设计方案如下:

```
1 > rcb
2 #> plots block treat
3 #> 1 101 block1 2
4 #> 2 102 block1 1
5 #> 3 103 block1 3
6 #> 4 201 block2 1
7 #> 5 202 block2 2
8 #> 6 203 block2 3
9 #> 7 301 block3 3
10 #> 8 302 block3 2
11 #> 9 303 block3 1
12 #> 10 401 block4 3
13 #> 11 402 block4 2
14 #> 12 403 block4 1
15 #> 13 501 block5 3
16 #> 14 502 block5 1
17 #> 15 503 block5 2
```

一般地, 若因子有 q 个水平, 完全随机区组设计要求每个区组恰好包含 q 个试验单元, 而全部 n 个试验单元能分解为 r 个区组, 即 $n = qr$. 每个水平在每个区组内恰好占一个试验单元; 而区组内用随机化的方法确定哪一个试验单元分配哪个水平.

完全随机区组设计中只有一个“单向区组”, 然而有些试验需要用到“双向区组”. 下面看一个例子.

例 1.12 (双向区组设计). 有 4 个玉米品种, 在一块长方形的试验田上进行试验, 将其按横向和竖向各 4 等分, 共分为 16 个长方块, 每个品种占 4 块, 如图 1.12 所示. 若这块试验田的土壤肥沃程度和其他条件沿横竖两个方向都有差异, 如何安排这 16 个试验?

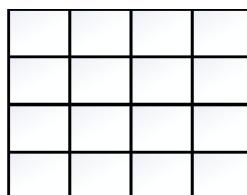


图 1.12: 区组设计示意图

这块试验田的土壤肥沃程度和其他条件沿横竖两个方向都有差异, 此时我们需要双向区组设计, 即希望在每一横向的 4 块试验田中每个品种都占一块, 且在每一纵向的 4 块试验田中每个品种也都占一块, 从而使任意品种在任意方向上都不占优势. 解决这一问题可以采用

拉丁方设计 (*Latin square design*). 一个 n 阶的拉丁方设计为一个由 n 个拉丁字母 $n \times n$ 的方阵, 每个字母在每行只出现一次, 在每列也只出现一次. 有时, 我们用数字 $1, 2, \dots, n$ 代表拉丁字母, 表 1.6 给出两个 4 阶拉丁方设计. 这些 4 阶拉丁方设计可以处理本例中的问题.

表 1.6: 4 阶拉丁方设计

1	2	3	4	4	2	1	3
2	1	4	3	2	1	3	4
3	4	1	2	1	3	4	2
4	3	2	1	3	4	2	1

拉丁方设计可借助添加包 `agricolae` 中的函数 `design.lsd()` 来实现. 本例的代码如下:

```

1 library(agricolae)
2 treatments <- c(1, 2, 3, 4)
3 outdesign <- design.lsd(treatments, seed = 21)
4 lsd <- outdesign$book
5 levels(lsd$row) <- c("row1", "row2", "row3", "row4")
6 levels(lsd$col) <- c("col1", "col2", "col3", "col4")

```

结果为

```

1 > lsd
2 #>   plots row col treatments
3 #> 1 101 row1 col1 1
4 #> 2 102 row1 col2 3
5 #> 3 103 row1 col3 2
6 #> 4 104 row1 col4 4
7 #> 5 201 row2 col1 3
8 #> 6 202 row2 col2 1
9 #> 7 203 row2 col3 4
10 #> 8 204 row2 col4 2
11 #> 9 301 row3 col1 2
12 #> 10 302 row3 col2 4
13 #> 11 303 row3 col3 3
14 #> 12 304 row3 col4 1
15 #> 13 401 row4 col1 4
16 #> 14 402 row4 col2 2
17 #> 15 403 row4 col3 1
18 #> 16 404 row4 col4 3

```

由表 1.6 可知, n 阶拉丁方设计不唯一. 表 1.6 右边的拉丁方称为 4 阶**左循环拉丁方**. 一个 n 阶拉丁方称为左循环拉丁方, 若其第 $i+1$ 行 \mathbf{x}_{i+1} 可由第 i 行 \mathbf{x}_i 通过一个左移算子 L 得到, 即

$$\mathbf{x}_{i+1} = L\mathbf{x}_i, \quad i = 1, \dots, n-1,$$

其中左移算子 $L(a_1, a_2, \dots, a_n) = (a_2, a_3, \dots, a_n, a_1)$. 因此, 只要设计的第一行是 $(1, \dots, n)$ 的一个置换, 就可以得到一个左循环拉丁方. 类似地可以定义右循环拉丁方.

在完全随机区组设计和拉丁方设计中, 每个区组所含的试验单元数与因子的水平数相同. 然而有些试验中, 区组所含的试验单元数目小于因子的水平数, 无法在每个区组内把因

子的各水平都做一次试验. 这种区组叫做**不完全区组** (incomplete block). 此时需要在区组不完全的条件下, 设法达到某种程度的均衡. 下面看一个例子.

例 1.13 (平衡不完全区组设计). 若比较 4 个水稻品种产量是否存在区别. 现取 4 个不同土壤条件的地区各选 3 块面积和水土条件都非常接近的试验田, 每一块试验田安排一个品种, 如图 1.13 所示. 如何安排这 12 个试验?

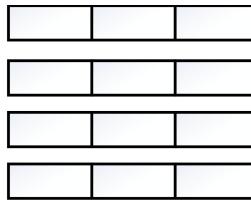


图 1.13: 区组设计示意图

记 4 个地区分别为 B_1, B_2, B_3, B_4 , 并作为 4 个区组. 4 个水稻品种记为 A_1, A_2, A_3, A_4 , 即因子的水平数为 4. 按照表 1.7 安排试验. 表 1.7 中 (i, j) 位置上的元素为 1 表示第 i 个水平品种在第 j 个地区做试验, $i = 1, 2, 3, 4$, $j = 1, 2, 3, 4$. 每个地区的三块试验田安排 3 个品种, 例如 B_1 中安排 A_1, A_2, A_3 这 3 个平品种, 这里采用随机的方法安排哪块试验田种植哪个品种, 表 1.7 的设计具有以下几个性质:

- 每个区组中都含 3 个不同的水平;
- 每个水平都在 3 个区组中出现;
- 任一对水平在同一区组内同时出现的次数都是 2.

表 1.7 的设计体现了一种平衡性, 又因为其区组为不完全的, 且在区组内实行随机化, 称这类设计为**平衡不完全区组设计** (*balanced incomplete block design, BIBD*).

表 1.7: 平衡不完全区组设计

水稻品种	地区			
	B_1	B_2	B_3	B_4
A_1	1	1	1	—
A_2	1	1	—	1
A_3	1	—	1	1
A_4	—	1	1	1

一般地, 在 BIBD 中有 5 个参数 (t, k, b, r, λ) , 其中 t 为水平数, k 为每区组所含的试验单元数, b 为区组数目, r 为每个水平的试验次数, λ 为任一对水平在同一区组内出现的次数. 在例 1.13 中, $t = 4$, $k = 3$, $b = 4$, $r = 3$, $\lambda = 2$. 如果 $t = b$, 则称区组设计为对称的, 否则称为

非对称的. Fisher 给出了 BIBD 存在的必要条件:

$$\begin{cases} tr = bk, \\ \lambda(t-1) = r(k-1), \\ b \geq t. \end{cases} \quad (1.2)$$

$tr = bk$ 是两种计算试验次数的方法. 一方面, 存在水平 1 的区组个数为 r , 这 r 个区组中其它水平的试验总数为 $r(k-1)$; 另一方面, 水平 1 与其它 $t-1$ 个水平组成对水平对为 $t-1$, 而每个水平对在 BIBD 中出现 λ 次, 则与水平 1 的水平对共有 $\lambda(t-1)$, 因此 $r(k-1) = \lambda(t-1)$. $b \geq t$ 是由 Fisher 给出的, 证明比较复杂, 这里略过.

给定水平数 t 和区组内试验单元数目 k , R 添加包 `daewr` 中的函数 `BIBsize` 可以用于计算满足条件(1.2)的 λ 和 r . 例如

```
1 > library(daewr)
2 > BIBsize(4, 3)
3 #> Possible BIB design with b= 4 and r= 3 lambda= 2
```

(Fisher 1940) 发现满足条件(1.2)的 (t, k, b, r, λ) 未必存在 BIBD 与之对应. (Kiefer 1958) 和 (Kshirsager 1958) 发现如果 BIBD 存在, 则它一定是 D-最优的¹, 因此可以用添加包 `AlgDesign` 中的函数 `optBlock()` 来得到 BIBD. 除了 BIBD 外, 还有部分平衡不完全区组设计 (partially balanced incomplete block design, PBIBD), 这里就不在叙述了.

本节讲述的都是单因子试验的区组设计, 多因子试验的区组设计比较麻烦, 感兴趣的读者可参考 [17]. 此外, 本节没有介绍区组设计的数据分析方法, 感兴趣的读者可参考 [14, 17].

¹参考3.3节.

1.4 预备知识

本节试图以较少的篇幅介绍后续章节需要用到的一些数学和统计学的知识, 给出的结论基本都没有证明, 感兴趣的读者可查阅相关的文献. 有些内容在先修课程中已经学过, 有些内容则是新的, 对于难以理解的内容读者可先行跳过.

1.4.1 矩阵、线性空间与 Hilbert 空间

本节首先回顾矩阵的基本运算, 然后介绍线性空间和 Hilbert 空间的概念, 目的在于使读者形成对无穷维空间的基本感性认识.

矩阵

称同阶矩阵 A 和 B 等价¹, 如果存在可逆矩阵 P 和 Q , 使得 $A = PBQ$. 称方阵 A 和 B 相似, 如果存在可逆矩阵 P , 使得 $B = P^{-1}AP$. 相似矩阵必然等价.

设 A 为 $n \times m$ 矩阵, 其 n 个行向量中最大线性无关组的个数称为 A 的行秩 (row rank), 记作 $\text{rank}_r(A)$; m 个列向量中最大线性无关组的个数称为 A 的列秩 (column rank), 记作 $\text{rank}_c(A)$; 矩阵 A 的非零子式的最大阶数称为该矩阵的秩 (rank), 记作 $\text{rank}(A)$. 线性代数课程中已经指出, 矩阵的秩具有以下性质:

- (1) 对任意 $n \times m$ 阶矩阵 A , 都有 $\text{rank}_r(A) = \text{rank}_c(A) = \text{rank}(A) \leq \min\{n, m\}$;
- (2) 初等变换不改变矩阵的秩, 即等价矩阵具有相同的秩;
- (3) $n \times n$ 阶方阵 A 可逆, 当且仅当 A 满秩, 即 $\text{rank}(A) = n$;
- (4) 如果 A 和 B 分别为 $n \times m$ 阶和 $m \times l$ 阶矩阵, 且 $\text{rank}(A) = m$, 则 $\text{rank}(AB) = \text{rank}(B)$;
- (5) 如果 A 和 B 分别为 $m \times n$ 和 $n \times k$ 阶矩阵, 则

$$\text{rank}(A) + \text{rank}(B) - n \leq \text{rank}(AB) \leq \min\{\text{rank}(A), \text{rank}(B)\},$$

特别地, 如果 $AB = \mathbf{0}$, 则 $\text{rank}(A) + \text{rank}(B) \leq n$.

方阵 A 的迹 (trace) 定义为其对角线上元素的和, 记作 $\text{tr}(A)$. 根据迹的定义可得到, $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$. 由此可知, 相似变换不改变矩阵的迹. 称方阵 P 为幂等矩阵 (idempotent matrix), 如果 $P^2 = P$. 显然, 如果 P 为幂等矩阵, 则 $P^T, I - P, T^{-1}PT$ 均为幂等矩阵. 幂等矩阵的特征值只可能是 0 和 1, 特别地, 幂等矩阵的秩等于它的迹. 幂等矩阵也称为投影矩阵 (projection matrix).

¹ 设 A 为非空集合, 称定义在 A 上的二元关系 “ \sim ” 为等价关系, 如果它满足: (1) 自反性, 对任意 $a \in A$, $a \sim a$; (2) 对称性, $a \sim b$ 则 $b \sim a$; (3) 传递性, $a \sim b$ 且 $b \sim c$, 则 $a \sim c$. 此处定义的矩阵等价与相似, 都是等价关系. 等价关系可以用来对集合进行分类, 这在某些研究中能够大大简化问题.

如果 \mathbf{A} 为实对称矩阵, 则 \mathbf{A} 的特征值均为实数, 其不同特征向量互相正交, 且一定存在正交矩阵 \mathbf{P} , 使得 $\mathbf{P}^T \mathbf{A} \mathbf{P} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$, 其中 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 表示矩阵 \mathbf{A} 的特征值. 称 n 阶实对称矩阵 \mathbf{A} 为 **正定的** (positive definite), 如果对任意 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 都有 $\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0$, 类似地可以定义**负定矩阵** (negative definite) 和**非负定矩阵** (non-negative definite). 矩阵 \mathbf{A} 正定, 当且仅当 \mathbf{A} 的所有特征值均为正数, 当且仅当存在 n 阶可逆矩阵 \mathbf{C} 使得 $\mathbf{A} = \mathbf{C}^T \mathbf{C}$, 当且仅当 \mathbf{A} 的所有顺序主子式大于零. 设 \mathbf{A} 为 n 阶对称矩阵, 考虑二次型 $f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$.

- (1) 如果 \mathbf{A} 的特征值都非负, 即 \mathbf{A} 为非负定矩阵, 则 $\mathbf{0}$ 是二次型的极小点;
- (2) 如果 \mathbf{A} 的特征值都非正, 即 \mathbf{A} 为非正定矩阵, 则 $\mathbf{0}$ 是二次型的极大点;
- (3) 如果 \mathbf{A} 的特征值有正有负, 即 \mathbf{A} 为不定矩阵, 则 $\mathbf{0}$ 是二次型的鞍点.

R 本质上是一种矩阵语言驱动的软件工具 (matrix language orientated software), 它提供了丰富的矩阵运算函数:

- 用于生成矩阵的函数 `matrix()` 和 `diag()`;
- 矩阵的合并 `cbind()` 和 `rbind()`;
- 矩阵转置 `t()`、矩阵加法 `+` 和乘法 `%*%`;
- 求各行各列的和和平均值 `rowSums()`, `rowMeans()`, `colSums()`, `colMeans()`;
- 求行列式 `det()` 和逆 `solve()`;
- 求矩阵的特征值和特征向量 `eigen()`;
- 正定矩阵的 Cholesky 分解 `chol()`;
- 矩阵的奇异值分解 `svd()` 和 QR 分解 `qr()`;
- ...

此外还有一些添加包提供了一些矩阵运算, 例如 MASS 包中的函数 `ginv()` 可用于计算矩阵的 Moore-Penrose 逆.

线性空间

设 X 为非空集合, \mathbb{R} 为实数域, 如果 X 满足下列性质, 则称 X 为实数域 \mathbb{R} 上的**线性空间** (linear space):

- (a) X 上定义有二元运算 “+”, 对任意 $x, y, z \in X$, 满足
 - 交换律: $x + y = y + x$;
 - 结合律: $(x + y) + z = x + (y + z)$;
 - X 中存在零元 θ , 使得对任意 $x \in X$ 都有 $x + \theta = x$;
 - 对任意 $x \in X$, 存在加法逆元 $-x$ 使得 $x + (-x) = \theta$.
- (b) 对任意 $x \in X$ 以及 $\alpha \in \mathbb{R}$, 存在 X 中唯一一个称为 α 与 x 的乘积的元素, 记为 $\alpha \cdot x$ 或 αx , 满足
 - $\alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x$;

- $1 \cdot x = x$;
- $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$;
- $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$.

线性空间中的元素称为**向量** (vector), 向量之间的加法以及数与向量之间的乘法统称为**线性运算** (linear operation). 由线性空间的定义可知: 对任意 $x \in X$, $0 \cdot x = \theta$, $(-1) \cdot x = -x$; $\alpha x = \theta$ 的充要条件是 α 与 x 中至少有一个为零. 如果线性空间 X 的子集 A 在其线性运算下仍然为线性空间, 则称 A 为 X 的**线性子空间** (linear sub-space), 简称**子空间** (sub-space).

设 X 是线性空间, $x_1, x_2, \dots, x_n \in X$, $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n \in \mathbb{R}$, 如果

$$\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \cdots + \lambda_n x_n = \theta \iff \lambda_1 = \lambda_2 = \cdots = \lambda_n = 0,$$

则称 x_1, x_2, \dots, x_n **线性无关** (linear independent), 否则称为**线性相关** (linear dependent). 称集合 $A \subset X$ 线性无关, 如果 A 中任意有限个元素均线性无关. 设 $A \subset X$, 可以证明, 集合

$$\left\{ \sum_{i=1}^n \lambda_i x_i : n \in \mathbb{N}, \lambda_i \in \mathbb{R}, x_i \in A \right\}$$

是 X 的一切包含集合 A 的子空间的交, 称为**集合 A 张成的子空间**, 记作 $\text{span}(A)$. 如果集合 $A \subset X$ 线性无关, 且任意 $x \in X$ 均可唯一表示为

$$x = \lambda_1 x_1 + \cdots + \lambda_n x_n,$$

其中, $n \in \mathbb{N}$, $\{x_1, \dots, x_n\} \subset A$, $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\} \subset \mathbb{R}$, 则称 A 为 X 的**Hamel 基** (Hamel basis), 简称**基** (basis). 任意非空线性空间都存在**Hamel 基**.

设 X 为线性空间, 称函数 $\|\cdot\| : X \mapsto \mathbb{R}^+$ 为**范数** (norm), 称 $(X, \|\cdot\|)$ 为**赋范线性空间** (normed linear space), 如果 $\|\cdot\|$ 满足:

- (1) $\|x\| = 0$, 当且仅当 x 为 X 中的零元;
- (2) 对任意 $x \in X$ 以及 $\alpha \in \mathbb{R}$, $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$;
- (3) 对任意 $x \in X$ 以及 $y \in X$, $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

有了范数就可以定义序列的收敛和拓扑, 这里就不多说了. 称完备的赋范线性空间为 Banach 空间.

Hilbert 空间

设 X 为定义在实数域 \mathbb{R} 上的线性空间, 称映射 $\langle \cdot, \cdot \rangle : X \times X \mapsto \mathbb{R}$ 为**内积** (inner product) 或**点积** (dot product), 如果

- (1) $\langle x, x \rangle \geq 0$, $\langle x, x \rangle = 0 \iff x = \theta$;
- (2) 对任意的 $x, y \in X$, $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$;
- (3) 对任意的 $x, y, z \in X$, $\langle x + y, z \rangle = \langle x, z \rangle + \langle y, z \rangle$;

(4) 对任意 $x, y \in X$ 以及 $\alpha \in \mathbb{R}$, $\langle \alpha x, y \rangle = \alpha \langle x, y \rangle$.

定义了内积的线性空间称为**内积空间** (inner product space) 或**拟 Hilbert 空间** (pseudo-Hilbert space). 设 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 是线性空间 X 上的内积, 则有**Cauchy 不等式**

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle, \quad \forall x, y \in X. \quad (1.3)$$

对任意 $x \in X$, 定义 $\|x\| := \langle x, x \rangle^{\frac{1}{2}}$, 利用 Cauchy 不等式可以证明 $\|\cdot\|$ 为 X 上的范数, 称该范数为内积导出的范数, 如果 $(X, \|\cdot\|)$ 构成完备赋范线性空间, 即 Banach 空间, 则称 $(X, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ 为**Hilbert 空间**.

设 I 为一指标集, H 为 Hilbert 空间. 称 $\{e_i : i \in I\} \subseteq H$ 为 H 的**标准正交集** (standard orthogonal set), 如果

$$\langle x_i, x_j \rangle = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

若 $\{e_i : i = 1, 2, \dots, n\}$ 是 H 的标准正交集, 则有**Bessel 不等式**

$$\|x\|^2 \geq \sum_{i=1}^n \langle x, e_i \rangle^2, \quad \forall x \in H.$$

如果 H 中没有其它标准正交集包含 $\{e_i : i \in I\}$, 则称 $\{e_i : i \in I\}$ 为 H 的**标准正交基** (standard orthogonal basis). 定义标准正交基的势 (集合中元素的个数) 为空间 H 的维数, 从维数的角度可将 Hilbert 空间划分为有限维空间和无限维空间, 无限维空间又可分为可数无限维和不可数无限维. 如果 H 可分, 即存在可数稠密子集, 则 H 一定存在可数的标准正交基 $\{e_1, e_2, \dots\}$, 且任意 $x \in H$ 均可表示为

$$x = \sum_{i=1}^{\infty} a_i e_i,$$

其中 $a_i = \langle x, e_i \rangle$ 满足 $\sum_{i=1}^{\infty} a_i^2 < \infty$. 由此可见, 可分 Hilbert 空间或为有限维的, 或为可数维的.

例 1.14 (n 维欧氏空间 \mathbb{R}^n). n 维欧氏空间 $\mathbb{R}^n = \{(a_1, a_2, \dots, a_n) : a_i \in \mathbb{R}\}$ 在线性运算

$$(a_1, a_2, \dots, a_n) + (b_1, b_2, \dots, b_n) = (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \dots, a_n + b_n),$$

$$\alpha \cdot (a_1, a_2, \dots, a_n) = (\alpha a_1, \alpha a_2, \dots, \alpha a_n)$$

和内积

$$\langle (a_1, a_2, \dots, a_n), (b_1, b_2, \dots, b_n) \rangle = \sum_{i=1}^n a_i b_i$$

的意义下构成 n 维 Hilbert 空间.

例 1.15 (序列空间 $\ell^2(\infty)$). 集合

$$\ell^2(\infty) := \left\{ (a_1, a_2, \dots) : a_i \in \mathbb{R}, \sum_{i=1}^{\infty} a_i^2 < \infty \right\}$$

在线性运算

$$(a_1, a_2, \dots) + (b_1, b_2, \dots) = (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \dots),$$

$$\alpha \cdot (a_1, a_2, \dots) = (\alpha a_1, \alpha a_2, \dots)$$

和内积

$$\langle (a_1, a_2, \dots), (b_1, b_2, \dots) \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} a_i b_i,$$

的意义下构成 *Hilbert* 空间, 其一组标准正交基为 $\{e_i : i \geq 1\}$, 其中 $e_i = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots)$ 表示 $\ell^2(\infty)$ 中第 i 个坐标为 1, 其余坐标全为 0 的元素.

例 1.16 (函数空间 $L^2([-1, 1])$). 集合

$$L^2([-1, 1]) := \left\{ f : [-1, 1] \mapsto \mathbb{R} : \int_{-1}^1 f(x)^2 \, dx < \infty \right\}$$

在线性运算

$$f + g : x \mapsto f(x) + g(x), \quad \alpha f : x \mapsto \alpha f(x)$$

以及内积

$$\langle f, g \rangle = \int_{-1}^1 f(x)g(x) \, dx$$

的意义下构成 *Hilbert* 空间, 其一组标准正交基为

$$\left\{ \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2} \cos(\pi x), \frac{\sqrt{2}}{2} \sin(\pi x), \frac{\sqrt{2}}{2} \cos(2\pi x), \frac{\sqrt{2}}{2} \sin(2\pi x), \dots \right\},$$

将函数 $f \in L^2([-1, 1])$ 用这组基表示称为函数 f 的 *Fourier* 展开.

1.4.2 正态总体及其抽样分布

在概率论中已经学过, 均值向量为 $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \dots, \mu_n)$, 协方差矩阵为

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} \sigma_{11}^2 & \sigma_{12}^2 & \cdots & \sigma_{1n}^2 \\ \sigma_{21}^2 & \sigma_{22}^2 & \cdots & \sigma_{2n}^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1}^2 & \sigma_{n2}^2 & \cdots & \sigma_{nn}^2 \end{bmatrix}$$

的 n 维正态分布 $N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C})$ 的密度函数为

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} \det(\mathbf{C})^{\frac{1}{2}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}) \right\}, \quad (1.4)$$

其中 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, 协方差矩阵 \mathbf{C} 是正定的对称矩阵. 当 \mathbf{C} 为退化矩阵 (即 $\det(\mathbf{C}) = 0$) 时, 称正态分布为退化的. 退化正态分布可通过特征函数来定义, 一般不需关注退化的情况. 多元正态分布由其均值向量和协方差矩阵唯一确定. 当均值向量 $\boldsymbol{\mu}$ 为零向量 $\mathbf{0}$ 、协方差矩阵 \mathbf{C} 为单位矩阵 \mathbf{I} 时, 称相应的多元正态分布为**标准正态分布**. n 维标准正态分布的密度函数为:

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{x} \right\}. \quad (1.5)$$

若 n 维随机向量 $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n)$ 的分布为 $N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C})$, 则称 $\boldsymbol{\xi}$ 为**Gauss 随机向量**或**正态随机向量**. 正态随机向量的均值向量为 $\boldsymbol{\mu}$, 协方差矩阵为 \mathbf{C} . 本书中总假设随机误差向量 $\boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)$ 为 Gauss 随机向量, 且 $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$. Gauss 随机向量有很多优良的性质, 下面列举一些本书中可能会用到的性质.

引理 1.2. 设 n 维随机向量 $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_n) \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C})$, 则

- (1) 如果 \mathbf{C} 为对角矩阵, 则随机变量族 $\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n\}$ 互相独立, 且 $\xi_i \sim N(\mu_i, \sigma_{ii}^2)$;
- (2) 如果 \mathbf{A} 为 $m \times n$ 阶矩阵, 则 $\mathbf{A}\boldsymbol{\xi} \sim N(\mathbf{A}\boldsymbol{\mu}, \mathbf{A}\mathbf{C}\mathbf{A}^T)$, 即 Gauss 随机向量的线性变换仍为 Gauss 随机向量;
- (3) 设

$$\boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} \sim N \left(\begin{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{11} & \mathbf{C}_{12} \\ \mathbf{C}_{21} & \mathbf{C}_{22} \end{bmatrix} \right)$$

则 $\xi_1 | \xi_2 \sim N(\mu_1 + \mathbf{C}_{12}\mathbf{C}_{22}^{-1}(\xi_2 - \mu_2), \mathbf{C}_{11} - \mathbf{C}_{12}\mathbf{C}_{22}^{-1}\mathbf{C}_{21})$.

我们知道, 任何一个正定对称矩阵 \mathbf{C} 都可以分解为 $\mathbf{A}\mathbf{v}\mathbf{c}\mathbf{A}^T$ 的形式, 因此如果随机向量 $\boldsymbol{\xi} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$, 则随机向量 $\mathbf{A}\boldsymbol{\xi} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{C})$, 而随机向量 $\mathbf{A}\boldsymbol{\xi} + \boldsymbol{\mu} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C})$. 因此可以由独立的标准正态随机变量得到任意的多元正态随机向量. R 中与正态随机变量相关的函数包括:

- 分布函数: `dnorm(x, mean = 0, sd = 1, log = FALSE)`;
- 密度函数: `pnorm(q, mean = 0, sd = 1, lower.tail = TRUE, log.p = FALSE)`;
- 分位数函数: `qnorm(p, mean = 0, sd = 1, lower.tail = TRUE, log.p = FALSE)`;
- 随机变量生成函数: `rnorm(n, mean = 0, sd = 1)`.

例如, 如果想知道标准正态分布的 0.95 分位点, 可利用 `qnorm(0.95)` 得到 1.644854. 正是由于 R 的便利, 本书没有给出各种分布的分位数表.

利用正态随机向量可以定义数理统计学中应用广泛的 χ^2 分布、 t 分布和 F 分布.

定义 1.3. (1) 称 n 维正态随机向量 $\xi \sim N(\mu, I)$ 的二次型

$$\eta := \xi^T \xi = \sum_{i=1}^n \xi_i^2$$

的分布为自由度为 n 、非中心参数为 $\lambda = \mu^T \mu$ 的 χ^2 分布, 记作 $\eta \sim \chi^2(n, \lambda)$. 当 $\lambda = 0$ 时, 称 η 的分布为自由度为 n 的中心化 χ^2 分布, 记作 $\eta \sim \chi^2(n)$.

(2) 设随机变量 $\xi \sim N(0, 1)$ 与 $\eta \sim \chi^2(n)$ 互相独立, 则称随机变量

$$T := \frac{\xi}{\sqrt{\eta/n}}$$

的分布为自由度为 n 的 t 分布, 记作 $t(n)$;

(3) 设随机变量 $\xi \sim \chi^2(m)$ 与 $\eta \sim \chi^2(n)$ 互相独立, 则称随机变量

$$F := \frac{\xi/m}{\eta/n}$$

的分布为自由度为 m 和 n 的 F 分布, 记作 $F(m, n)$.

中心化的 $\chi^2(n)$ 分布的密度函数为

$$f_{\chi^2(n)}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2^{\frac{n}{2}} \Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} x^{\frac{n}{2}-1} e^{-\frac{x}{2}}, & x > 0, \\ 0, & x \leq 0. \end{cases}$$

其中 $\Gamma(\cdot)$ 表示 Gamma 函数. 它的均值恰为 n , 方差为 $2n$. R 中与 χ^2 分布相关的函数包括:

- 分布函数: `dchisq(x, df, ncp = 0, log = FALSE)`;
- 密度函数: `pchisq(q, df, ncp = 0, lower.tail = TRUE, log.p = FALSE)`;
- 分位数函数: `qchisq(p, df, ncp = 0, lower.tail = TRUE, log.p = FALSE)`;
- 随机变量生成函数: `rchisq(n, df, ncp = 0)`.

自由度为 n 的 t 分布的密度函数为

$$f_{t_n}(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)}{\sqrt{n\pi}\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(1 + \frac{x^2}{n}\right)^{-\frac{n+1}{2}}.$$

它是一个偶函数, 当 $n > 1$ 时它的均值为 0, 当 $n > 2$ 时它的方差为 $n/(n-1)$. t 分布的图像与标准正态分布相似, 但它的尾部要“重”, 因此也称为重尾分布. 当 $n \rightarrow \infty$ 时, t 分布收敛到标准正态分布. R 中与 t 分布相关的函数包括:

- 分布函数: `dt(x, df, ncp, log = FALSE)`;
- 密度函数: `pt(q, df, ncp, lower.tail = TRUE, log.p = FALSE))`;
- 分位数函数: `qt(p, df, ncp, lower.tail = TRUE, log.p = FALSE)`;
- 随机变量生成函数: `rt(n, df, ncp)`.

F 分布是由 Fisher 提出的, 因此以他名字的首字母命名. 自由度为 (m, n) 的 F 分布的密度函数为

$$f_{F_{m,n}}(x) = \frac{\Gamma\left(\frac{m+n}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{m}{2}\right)\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)} \left(\frac{m}{n}\right)^{m/2} x^{m/2-1} \left(1 + \frac{m}{n}x\right)^{-(m+n)/2} \mathbb{1}_{(0,\infty)}(x).$$

当 $n > 2$ 时它的期望为 $n/(n-2)$, 当 $n > 4$ 时它的方差为 $2n^2(n+m-2)/[m(n-2)^2(n-4)]$. R 中与 F 分布相关的函数包括:

- 分布函数: `df(x, df1, df2, ncp, log = FALSE)`;
- 密度函数: `pf(q, df1, df2, ncp, lower.tail = TRUE, log.p = FALSE)`;
- 分位数函数: `qf(p, df1, df2, ncp, lower.tail = TRUE, log.p = FALSE)`;
- 随机变量生成函数: `rf(n, df1, df2, ncp)`.

利用这些函数可以轻松得到诸分布的分位数点, 以及生成服从这些分布的随机变量. 关于这些函数的用法请查询 R 的帮助文档.

χ^2 分布对加法运算的封闭性.

引理 1.4. 若随机变量 $\{\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_m\}$ 互相独立, 且 $\eta_i \sim \chi^2(n_i, \lambda_i)$, 则

$$\eta_1 + \eta_2 + \dots + \eta_m \sim \chi^2(n_1 + \dots + n_m, \lambda_1 + \dots + \lambda_m).$$

由 χ^2 分布的定义以及上述引理可以得到: 若随机变量 ξ_1, \dots, ξ_n 互相独立, 且 $\xi_i \sim N(\mu_i, \sigma_i^2)$, 则

$$\sum_{i=1}^n \frac{\xi_i^2}{\sigma_i^2} \sim \chi^2\left(n, \sum_{i=1}^n \frac{\mu_i^2}{\sigma_i^2}\right).$$

定义1.3给出的是正态随机向量关于单位矩阵 \mathbf{I} 的二次型的分布, 以下引理给出了一般的二次型 $\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\xi}$ 的分布为 χ^2 分布的条件.

引理 1.5. 设 $\boldsymbol{\xi} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{I})$, \mathbf{A} 为 n 阶对称矩阵. 则

- (1) $\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\xi} \sim \chi^2(\text{rank}(\mathbf{A}), \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\mu})$ 当且仅当 \mathbf{A} 为幂等矩阵, 即 $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}$;
- (2) 设 \mathbf{A}_1 和 \mathbf{A}_2 均为对称非负定的幂等矩阵, 则 $\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{A}_1 \boldsymbol{\xi}$ 和 $\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{A}_2 \boldsymbol{\xi}$ 互相独立当且仅当 $\mathbf{A}_1 \mathbf{A}_2 = \mathbf{0}$;
- (3) 如果 \mathbf{A} 可分解为 k 个对称矩阵 $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_k$ 的和, 则 $\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{A}_1 \boldsymbol{\xi}, \dots, \boldsymbol{\xi}^T \mathbf{A}_k \boldsymbol{\xi}$ 互相独立, 且

$$\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{A}_i \boldsymbol{\xi} \sim \chi^2(\text{rank}(\mathbf{A}_i), \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{A}_i \boldsymbol{\mu}), \quad i = 1, \dots, k$$

的充要条件是 \mathbf{A} 为幂等矩阵, 且 $\text{rank}(\mathbf{A}) = \text{rank}(\mathbf{A}_1) + \dots + \text{rank}(\mathbf{A}_k)$;

- (4) 设 \mathbf{B} 为 $m \times n$ 阶矩阵, $\mathbf{B} \mathbf{A} = \mathbf{0}$, 则线性型 $\mathbf{B} \boldsymbol{\xi}$ 与二次型 $\boldsymbol{\xi}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\xi}$ 互相独立.

引理1.5中, $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}$ 保证了 \mathbf{A} 的特征值均为 1, 利用正态随机向量的正交变换可得到(1); (2) 同样可以利用对称幂等矩阵的正交变换得到; (3) 可由 (1) 和 (2) 推得. 当考虑服从标准正态分布 $N(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ 的误差向量 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 时, 引理1.5的结论可以简化为:

- (1) $\boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{A} \boldsymbol{\varepsilon} \sim \chi^2(\text{rank}(\mathbf{A}))$ 当且仅当 \mathbf{A} 为对称幂等矩阵;
- (2) 如果对称矩阵 \mathbf{A} 可分解为 k 个对称矩阵 $\mathbf{A}_1, \dots, \mathbf{A}_k$ 的和, 则 $\boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{A}_1 \boldsymbol{\varepsilon}, \dots, \boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{A}_k \boldsymbol{\varepsilon}$ 互相独立, 且

$$\boldsymbol{\varepsilon}^T \mathbf{A}_i \boldsymbol{\varepsilon} \sim \chi^2(\text{rank}(\mathbf{A}_i)), \quad i = 1, \dots, k$$

的充要条件是 \mathbf{A} 为幂等矩阵, 且 $\text{rank}(\mathbf{A}) = \text{rank}(\mathbf{A}_1) + \dots + \text{rank}(\mathbf{A}_k)$.

由于幂等矩阵的秩与迹相等, 因而上述 $\text{rank}(\mathbf{A})$ 均可替换为 $\text{tr}(\mathbf{A})$.

利用引理 1.5, 可以得到如下在数理统计中十分重要的结果, 这个结果在本书中也将多次用到.

引理 1.6. 设有两组互相独立来自方差相同、均值不同的正态分布的样本: $\mathbf{x}_1^T = (x_{11}, x_{12}, \dots, x_{1n}) \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(\mu_1, \sigma^2)$ 和 $\mathbf{x}_2^T = (x_{21}, x_{22}, \dots, x_{2m}) \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(\mu_2, \sigma^2)$, 以

$$\bar{x}_{1.} := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{1i}, \quad S_1^2 := \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_{1i} - \bar{x}_{1.})^2$$

和

$$\bar{x}_{2.} := \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m x_{2i}, \quad S_2^2 := \frac{1}{m-1} \sum_{i=1}^m (x_{2i} - \bar{x}_{2i})^2$$

分别表示两组样本的样本均值和样本方差, 则 $\bar{x}_{1.}$ 与 S_1^2 互相独立, $\bar{x}_{2.}$ 与 S_2^2 互相独立, 且

$$\frac{n-1}{\sigma^2} S_1^2 \sim \chi^2(n-1), \quad \frac{m-1}{\sigma^2} S_2^2 \sim \chi^2(m-1), \quad (1.6a)$$

$$\frac{\sqrt{n}(\bar{x}_{1.} - \mu_1)}{S_1} \sim t(n-1), \quad \frac{\sqrt{m}(\bar{x}_{2.} - \mu_2)}{S_2} \sim t(m-1), \quad \frac{S_1^2}{S_2^2} \sim F(n-1, m-1), \quad (1.6b)$$

$$\sqrt{\frac{nm(n+m-2)}{n+m}} \frac{(\bar{x}_{1.} - \mu_1) - (\bar{x}_{2.} - \mu_2)}{\sqrt{(n-1)S_1^2 + (m-1)S_2^2}} \sim t(m+n-2). \quad (1.6c)$$

Proof. 令

$$\mathbf{B} = \left[\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n} \right] = \frac{1}{n} \mathbf{1}_n^T,$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{n-1} \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{n} & -\frac{1}{n} & \cdots & -\frac{1}{n} \\ -\frac{1}{n} & 1 - \frac{1}{n} & \cdots & -\frac{1}{n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{1}{n} & -\frac{1}{n} & \cdots & 1 - \frac{1}{n} \end{bmatrix} = \frac{1}{n-1} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \right).$$

则 $\bar{x}_{1.} = \mathbf{B} \mathbf{x}_1$, $S_1^2 = \mathbf{x}_1^T \mathbf{A} \mathbf{x}_1$, 且

$$\mathbf{A}^2 = \frac{1}{(n-1)^2} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \right)^2 = \frac{1}{(n-1)^2} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \right),$$

$$\mathbf{B} \mathbf{A} = \frac{1}{n} \mathbf{1}_n^T \frac{1}{n-1} \left(\mathbf{I} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \right) = \frac{1}{n(n-1)} \left(\mathbf{1}_n^T - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n^T \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \right) = \mathbf{0},$$

故根据引理1.5, $\bar{x}_{1\cdot}$ 与 S_1^2 互相独立, 且(1.6a)式成立. 结合 t 分布和 F 分布的定义, 马上得到(1.6b)式. 利用独立性可知,

$$(\bar{x}_{1\cdot} - \mu_1) - (\bar{x}_{2\cdot} - \mu_2) \sim N\left(0, \frac{\sigma^2}{n} + \frac{\sigma^2}{m}\right), \quad \frac{(n-1)S_1^2 + (m-1)S_2^2}{\sigma^2} \sim \chi^2(n+m-2),$$

由 t 分布的定义, 马上得到(1.6c)式. \square

1.4.3 统计推断

“实验设计与分析”的“分析”二字就体现为统计推断, 统计推断的方法可以分为频率学派 (Frequentist) 和贝叶斯学派 (Bayesian) 两类. 实际上, 试验设计也可以分为频率学派方法和贝叶斯学派方法. 二者的区别主要在于对未知参数的认识上:

- 频率学派理论主要由统计学家 Fisher, K. Person, Neyman 等建立, 其核心观点是认为参数是一个未知的固定常量, 即存在一个真值 (the truth of nature);
- 贝叶斯学派源自于英国统计学家 T. Bayes 1774 年的论文“机会问题的数学解法”, 现已得到广泛的发展和应用, 它的核心观点是参数是随机的, 可以用一个概率分布去描述关于它的认识.

贝叶斯学派的理论框架较为完备, 读者可通过多种途径了解贝叶斯学派的知识, 如访问国际贝叶斯学会的网站<https://bayesian.org/>等.

统计模型与统计量

统计推断从样本 (即数据) 出发, 获取关于总体的知识, 样本和统计模型是推断的依据. 数据的表现形式有两种:

- 只有结果, $\mathcal{D}_n = (y_1, y_2, \dots, y_n)$;
- 有条件和结果, $\mathcal{D}_n = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, 2, \dots, n\}$.

统计模型就是样本的联合分布, 通常记为 $\{P_\theta^{(n)} : \theta \in \Theta\}$, 其中 θ 表示未知的参数. 统计建模包括确定 $P_\theta^{(n)}$ 和参数集 Θ . 根据参数 θ 的形式, 可将统计模型分为参数模型 (parametric model) 和非参数模型 (nonparametric model). 参数模型是指 θ 为有限维向量, 即 Θ 为某欧氏空间中的子集; 而非参数模型则指 θ 为无穷维的, 如级数、函数或者测度, 有时也把非参数统计模型记为 $\{P^{(n)} : P^{(n)} \text{ 为满足某些性质的概率分布}\}$. 因而非参数模型并非没有参数, 而是参数有无限多个.

例 1.17. 研究当前成年人的体重情况.

- (1) 直接抽样得到 n 个人的体重数据 $\{y_1, y_2, \dots, y_n\}$. 如果假定体重服从正态分布 $N(\mu, \sigma^2)$, 则统计模型为参数模型, 其参数为 $\theta = (\mu, \sigma)$, 参数空间为 $\Theta = \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+$. 如果无法给出体重分布的形式, 就只能采用非参数模型, 即假定密度函数属于一个由满足某些性质的函数组成的集合.

(2) 经分析发现, 体重并不是完全随机的, 它与身高、年龄都有一定的关系, 此时应该抽样得到 n 个人的体重数据 $\{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, 2, \dots, n\}$, 其中, \mathbf{x}_i 表示第 i 个人的身高与年龄, y_i 表示它的体重. 通过建立回归模型 $y_i = f(\mathbf{x}_i) + \varepsilon_i$ 来分析体重的规律, 其中, ε_i 表示服从 $N(0, \sigma^2)$ 的随机变量. 如果 f 的形式已知, 那么是参数模型, 如果形式未知, 就是非参数模型.

样本中包含总体的信息, 但较为分散, 一般不宜直接用于统计推断. **统计量** (statistic) 是样本的函数, 是对样本的加工, 是从样本中提取信息的工具. 称统计量的分布为**抽样分布** (sampling distribution), 它在研究统计量的性质和评价统计推断的优良性等方面十分重要. 尽管统计量不依赖于统计模型, 完全可以由给定的样本计算出它的取值, 但抽样分布却往往与统计模型 (特别地, 模型中的参数) 有关, 正是这种相关性使得我们能够从统计量中得到模型的信息. Fisher 曾把抽样分布、参数估计和假设检验列为统计推断的三个中心内容.

最常见的统计量要数样本均值和样本方差了, 引理1.6给出了当统计模型为正态分布时, 样本均值和样本方差的抽样分布. 引理1.6中,

$$\bar{x}_{1\cdot}, \quad \bar{x}_{2\cdot}, \quad S_1^2, \quad S_2^2, \quad S_1^2/S_2^2$$

都是统计量, 它们与统计模型无关. 而

$$\frac{n-1}{\sigma^2}S_1^2, \quad \frac{m-1}{\sigma^2}S_2^2, \quad \frac{\sqrt{n}(\bar{x}_{1\cdot} - \mu_1)}{S_1}, \quad \frac{\sqrt{m}(\bar{x}_{2\cdot} - \mu_2)}{S_2}, \quad \frac{(\bar{x}_{1\cdot} - \mu_1) - (\bar{x}_{2\cdot} - \mu_2)}{\sqrt{(n-1)S_1^2 + (m-1)S_2^2}}$$

则不是统计量, 因为它们都与统计模型中的参数有关. 有意思的是, 尽管它们的值与参数有关, 而它们的分布却与参数无关, 我们称这种量为**枢轴量** (pivot quantity). 枢轴量在经典参数区间估计和假设检验理论中十分重要.

参数估计

一般地, 我们称样本分布的泛函 $g(P^{(n)})$ 为参数, 例如 $P^{(n)}$ 的均值、方差、分位数等等. 如果统计模型为参数模型 $\{P_\theta^{(n)} : \theta \in \Theta\}$, 则参数可理解为 θ 的实值函数. 按照这一定义, 统计模型中的参数 θ 本身也是参数, 因此以下仅以 θ 为对象讨论参数估计. 参数的估计包括点估计和区间估计两类.

点估计就是找到一个统计量 $\hat{\theta}_n$ 作为 θ_0 的估计, 它是由样本到参数空间 Θ 的映射. 频率学派将参数真值 θ_0 看作一个未知的常数, 在这一基本假定下, 衡量估计量好坏的标准包括:

- 无偏性: 即估计量的均值 $E(\hat{\theta}_n)$ 与参数真值 θ_0 之间的偏差是否为 0;
- 相合性: 即当样本量 $n \rightarrow \infty$ 时, $\hat{\theta}_n$ 是否在某种意义上收敛于真值 θ_0 ;
- 渐近正态性: 即是否存在 $\sigma_n^2(\theta_0)$, 使得当 $n \rightarrow \infty$ 时随机变量 $(\hat{\theta}_n - \theta_0)/\sigma_n^2(\theta_0)$ 服从标准正态分布 $N(0, 1)$;
- 收敛速度: 刻画上述各种收敛的收敛速度的量.

更一般地, 可以定义某种风险函数来衡量估计量的好坏, 这是统计决策的通用做法. 常见的频率学派估计方法包括矩法、极大似然法和最小二乘法. 这些估计方法在概率论与数理统计课程中已经学过了, 在后续学习中我们会陆续用到它们.

以一维参数为例, 参数区间估计就是要找到两个统计量 $\hat{\theta}_L$ 和 $\hat{\theta}_U$, 使得参数真值 θ_0 落入随机区间 $[\hat{\theta}_L, \hat{\theta}_U]$ 的概率不低于 $1 - \alpha$, 也称 $[\hat{\theta}_L, \hat{\theta}_U]$ 为参数 θ 的 $1 - \alpha$ 置信区间 (confidence interval, CI). 一般来说, 给定的 α , 区间估计越窄越好, Neyman 建议在使得置信系数达到一定要求的前提下, 寻找区间平均长度尽可能短的区间估计. 随着样本量的增大, 区间估计的长度应当以一定的速度收敛于 0. 高维参数的置信区间一般难以得到. 由于参数的置信区间与假设检验有着某种对偶关系, 因此本书不对置信区间做过多的讨论, 大家只需理解它的概念即可.

例 1.18 (正态分布参数估计). 设 $\mathcal{D}_n = (x_1, x_2, \dots, x_n) \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(\mu, \sigma^2)$, 考虑参数 μ 和 σ^2 的估计问题.

引理 1.6 中给出了均值参数 μ 的无偏估计为

$$\hat{\mu} = \bar{x}_\cdot = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i,$$

方差参数 σ^2 的无偏估计为

$$\widehat{\sigma^2} = S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\bar{x}_\cdot - x_i)^2.$$

在 R 中, 可利用函数 `mean()` 计算样本均值, 利用函数 `sd()` 计算样本标准差, 即 S . 前面提到的枢轴量就可以用来构造参数的区间估计, 例如, 根据(1.6b)式,

$$\mathbb{P}\left(t_{\alpha/2}(n-1) \leq \frac{\sqrt{n}(\bar{x}_\cdot - \mu)}{S} \leq t_{1-\alpha/2}(n-1)\right) = 1 - \alpha,$$

由此便可得到均值参数 μ 的 $1 - \alpha$ 置信区间为

$$\left[\bar{x}_\cdot - \frac{S}{\sqrt{n}}t_{1-\alpha/2}(n-1), \bar{x}_\cdot + \frac{S}{\sqrt{n}}t_{\alpha/2}(n-1)\right].$$

假设检验

给定参数空间 Θ 的分划 $\Theta = \Theta_0 \cup \Theta_1$, 假设检验就是利用数据来回答检验

$$H_0 : \theta_0 \in \Theta_0, \quad \text{v.s.} \quad H_1 : \theta_0 \in \Theta_1. \tag{1.7}$$

方法是构造一个取值于区间 $[0, 1]$ 的检验 (test) ϕ , 以 $\phi(\mathcal{D}_n)$ 的概率接受 H_1 , 以 $1 - \phi(\mathcal{D}_n)$ 的概率接受 H_0 . 称统计量 $\phi(\mathcal{D}_n)$ 的期望

$$p_\phi(\theta) := \mathbb{E}_\theta [\phi(\mathcal{D}_n)],$$

为检验 ϕ 的势函数 (power function), 简称势或者功效, 它是 θ 的函数, 表示接受 H_1 即拒绝 H_0 的概率.

假设检验中最重要的三个概念是 p 值和两类错误, 这三个概念都比较难以理解, 内涵十分深刻. p 值的概念在 1.1.1 节中已经介绍的.

- 称 $\theta \in \Theta_0$ 时 $p_\phi(\theta)$ 的值为犯第 I 类错误 (type I error) 的概率;
- 称 $\theta \in \Theta_1$ 时 $1 - p_\phi(\theta)$ 的值为犯第 II 类错误 (type II error) 的概率.

显然, 这两类错误都越小越好. 遗憾的是, 在样本给定的情况下, 我们不能同时降低它们, 必须在第 I 类错误与第 II 类错误之间实现某种均衡 (trade-off). 均衡就是选择, 是生活中最重要的概念之一. 统计学家们通常有以下两种方式实现均衡

- 控制一类错误, 使另一类错误最小. 例如, 经典假设检验理论认为, 在满足 $\max_{\theta \in \Theta_0} p_\phi(\theta) \leq \alpha$ 的约束下, 使得当 $\theta \in \Theta_1$ 时 $p_\phi(\theta)$ 越大的检验越好, α 称为显著性显著性水平 (significance level).
- 定义某种损失函数, 即价值观, 将两类错误综合成风险, 使风险最小.

构造检验的最常用的方法是似然比检验法, 这里就不再叙述了.

例 1.19 (正态均值的 t 检验). 设 $D_n = (x_1, x_2, \dots, x_n) \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(\mu, \sigma^2)$, 考虑如下三个检验问题:

- (1) $H_0 : \mu = \mu_0$ vs $H_1 : \mu \neq \mu_0$;
- (2) $H_0 : \mu \leq \mu_0$ vs $H_1 : \mu \geq \mu_0$;
- (3) $H_0 : \mu \geq \mu_0$ vs $H_1 : \mu \leq \mu_0$;

引理 1.6 已经给出了检验的构造方法: 令

$$t_n = \frac{\sqrt{n}(\bar{x}_n - \mu_0)}{S_n}$$

其中, \bar{x}_n 表示样本均值, S_n^2 表示样本方差. 则三个检验问题的检验分别为

- (1) $\phi_1 = \mathbb{1}_{(-\infty, t_{\alpha/2}(n-1))}(t_n) + \mathbb{1}_{(t_{1-\alpha/2}(n-1), \infty)}(t_n);$
- (2) $\phi_2 = \mathbb{1}_{(t_{1-\alpha}(n-1), \infty)}(t_n);$
- (3) $\phi_3 = \mathbb{1}_{(-\infty, t_\alpha(n-1))}(t_n).$

t_n 称为检验统计量 (test statistic), 它的分布已知, 且能够提供检验的信息. 注意, 检验统计量实际上也是枢轴量, 它与 μ_0 有关, 但在 μ_0 已知的情况下, 仍可将它视为统计量. 三个检验的 p 值分别为

- (1) $p = 2\mathbb{P}_t\{(-\infty, -|t_n|)\};$
- (2) $p = 1 - \mathbb{P}_t\{(-\infty, t_n)\};$
- (3) $p = \mathbb{P}_t\{(-\infty, t_n)\}.$

其中, \mathbb{P}_t 表示 t 分布的概率测度. p 值与样本量有关, 通常 $n \geq 30$ 被认为样本量足够.

在 R 中, 可以使用函数

```

1 t.test(x, y = NULL, alternative = c("two.sided", "less", "greater"),
2 mu = 0, paired = FALSE, var.equal = FALSE, conf.level = 0.95, ...)

```

来实现正态均值的 t 检验.

引理1.6还提供了两样本均值 t 检验、两样本方差的 F 检验等检验方法的理论基础, 这里就不再叙述了.

统计决策

下面从统计决策理论 (statistical decision) 的角度来阐述统计推断的统一框架. 统计决策理论包含如下三要素:

- **统计模型.** 这在前面已经叙述过了, 我们假定为参数模型 $\{P_\theta^{(n)} : \theta \in \Theta\}$, 它表示样本 \mathcal{D}_n 所服从的可能分布的集合;
- **决策空间或行动空间 Δ .** 表示决策者可能采取的行动组成的集合, 由具体的问题决定. 对于参数点估计而言, 决策空间就是参数空间; 对于假设检验问题而言, 决策空间为区间 $[0, 1]$, 一个决策就表示拒绝原假设的概率.
- **损失函数 (loss function), 简称损失.** $\ell(\cdot, \cdot) : \Theta \times \Delta \mapsto \mathbb{R}^+$, 表示当参数为 θ 而采取决策 δ 时的损失.

称由样本空间到决策空间的函数 $\delta(\mathcal{D}_n)$ 为一个**决策函数**. 由于决策函数与数据 \mathcal{D}_n 有关, 因此它是一个随机变量. 定义**风险** (risk) 为损失的期望, 即平均损失:

$$\mathcal{R}(\theta, \delta(\mathcal{D}_n)) := \mathbb{E}_\theta[\ell(\theta, \delta(\mathcal{D}_n))] = P_\theta^{(n)}[\ell(\theta, \delta(\mathcal{D}_n))]. \quad (1.8)$$

一个好的决策应使风险最小, 称 $\delta^*(\cdot)$ 为**一致最优决策函数** (uniformly optimal decision), 如果对任意 $\delta(\cdot)$, 都有

$$\mathcal{R}(\theta, \delta^*) \leq \mathcal{R}(\theta, \delta), \quad \forall \theta \in \Theta.$$

例 1.20. 对于点估计问题, 决策 $\delta(\cdot)$ 是从样本空间到参数空间 Θ 的函数. 通常取平方损失:

$$\ell(\theta, \delta) = \|\theta - \delta(\mathcal{D}_n)\|^2,$$

这里 $\|\cdot\|$ 表示定义在 Θ 上的范数. 风险函数

$$\mathcal{R}(\theta, \delta(\mathcal{D}_n)) = P_\theta^{(n)} \left[\|\theta - \delta(\mathcal{D}_n)\|^2 \right]$$

常称为**均方误差** (mean square error). 对于假设检验问题(1.7), 决策 $\delta(\cdot)$ 是从样本空间到区间 $[0, 1]$ 的函数, 损失函数可定义为

$$\ell(\theta, \delta(\mathcal{D}_n)) = \mathbf{1}_{\Theta_0}(\theta)\delta(\mathcal{D}_n) + a\mathbf{1}_{\Theta_1}(\theta)(1 - \delta(\mathcal{D}_n)),$$

其中 $a > 0$ 为常数, 它表示范第 II 类错误相对于范第 I 类错误的损失比. 风险函数为

$$\mathcal{R}(\theta, \delta(\mathcal{D}_n)) = \mathbb{1}_{\Theta_0}(\theta)p_\delta(\theta) + a\mathbb{1}_{\Theta_1}(\theta)(1 - p_\delta(\theta)),$$

其中 $p_\delta(\theta)$ 表示检验 δ 的势, $\mathbb{1}_{\Theta_i}(\theta)$ 表示集合 Θ_i 的示性函数, 当 $\theta \in \Theta_i$ 时它取 1, 否则取 0. 可见, 在这一损失函数下, 检验的风险函数是两类错误的均衡, 常数 a 代表了一种价值观.

根据风险的定义(1.8)式, 它与参数 θ 有关, 因而无法直接极小化风险得到最优估计. 为了应对这一问题, 统计学家们提出了三种思路.

- **最大风险最小化**, 即找到决策 δ^* , 使得

$$\max_{\theta} \mathcal{R}(\theta, \delta^*) = \arg \min_{\delta} \max_{\theta} R(\theta, \delta);$$

- **平均风险最小化**, 通过定义 Θ 上的“权”或概率分布 $\Pi(\theta)$, 使得加权平均风险

$$\int_{\Theta} R(\theta, \delta) \Pi(d\theta)$$

最小, 贝叶斯学派中称 $\Pi(\theta)$ 为参数 θ 的先验分布;

- **经验风险最小化**, 该方法适用于数据 \mathcal{D}_n 为独立同分布的情形, 它以数据的经验分布 \mathbb{P}_n 代替 $P_\theta^{(n)}$, 从而得到所谓的经验风险 $\mathcal{R}_n(\delta)$, 它与参数 θ 无关, 通过使得经验风险最小得到最佳决策.

贝叶斯方法

贝叶斯学派的基本观点是, 任一未知量 θ 都可以看作随机变量, 可以用一个概率分布 $\Pi(\theta)$ 去描述关于它的不确定性, 这个分布称为**先验分布** (prior distribution). 从统计决策理论的角度来理解贝叶斯方法是十分方便的, 有了参数的先验分布 $\Pi(\theta)$, 便可计算平均风险: 进而可以找到最优的贝叶斯决策. 称使得平均风险

$$\int_{\Theta} R(\theta, \delta) \Pi(d\theta)$$

最小的决策 $\hat{\delta}$ 为**贝叶斯决策** (Bayesian decision). 由于风险 $R(\theta, \delta)$ 是损失 $\ell(\theta, \delta)$ 关于样本的积分, 因此风险实质上是考虑了没有出现的样本的, 这不符合**似然原理** (likelihood principle). 利用积分的交换次序法则, 可以证明在一定条件下, 贝叶斯决策是使得**贝叶斯后验风险** (Bayesian posterior risk)

$$R_\pi(\delta) := \int_{\Theta} \ell(\theta, \delta(\mathcal{D}_n)) \Pi(d\theta | \mathcal{D}_n)$$

达到最小的决策 $\hat{\delta}$. 其中条件分布 $\Pi(\cdot | \mathcal{D}_n)$ 称为 θ 的**后验分布** (posterior distribution). 由此可见, 贝叶斯决策只依赖于已经出现了的样本 \mathcal{D}_n , 它是符合似然原理的. 理论上已经证明,

任何一个决策都存在一个贝叶斯决策不次于该决策，因此我们只需要在所有贝叶斯决策中去寻找最优决策。

下面利用密度函数叙述贝叶斯公式，并从中介绍贝叶斯学派的基本观点。

- (1) 因把未知参数 θ 视作随机变量，样本的密度函数，也即参数的似然函数， $p_\theta(\mathcal{D}_n)$ 就应当视作给定 θ 的条件下， \mathcal{D}_n 的条件分布，记作 $p(\mathcal{D}_n|\theta)$ ；
- (2) 根据对参数 θ 的先验信息确定先验分布 $\Pi(\theta)$ ，假设先验分布的密度函数为 $\pi(\theta)$ ；
- (3) 数据 \mathcal{D}_n 的产生分两步进行，首先从先验分布 $\pi(\theta)$ 中产生一个 θ ，然后从条件分布 $p(\cdot|\theta)$ 中产生数据 \mathcal{D}_n ；
- (4) 数据 \mathcal{D}_n 与参数 θ 的联合分布的密度函数为

$$h(\mathcal{D}_n, \theta) = p(\mathcal{D}_n|\theta)\pi(\theta),$$

如此一来就把先验信息和数据信息综合到一起了。

- (5) 能够用来对 θ 做决策的是条件分布 $\Pi(\theta|\mathcal{D}_n)$ ，它的密度函数的计算公式是

$$\pi(\theta|\mathcal{D}_n) = \frac{p(\mathcal{D}_n|\theta)\pi(\theta)}{\int_{\Theta} p(\mathcal{D}_n|\theta)\pi(\theta) d\theta} \quad (1.9)$$

$\pi(\theta|\mathcal{D}_n)$ 为参数的后验分布的密度函数， $\int_{\Theta} p(\mathcal{D}_n|\theta)\pi(\theta) d\theta$ 是数据的边际分布 (marginal distribution)，也称为后验分布的归一化因子 (normalizing factor)，(1.9)式为贝叶斯公式的密度函数形式。

- (6) 对参数 θ 的一切统计推断都应当依据它的后验分布进行。例如，可以以后验均值或后验峰值作为参数的点估计，分别称为参数的后验均值估计 (posterior mean estimator) 和极大后验估计 (maximum a posterior estimator)；可以依据原假设 Θ_0 和备择假设 Θ_1 的后验概率的大小来做假设检验。

可以证明，后验均值估计是在平方损失下的贝叶斯决策，极大后验估计是在 $0 - 1$ 损失

$$\ell(\theta, \delta) = \begin{cases} 0, & |\delta - \theta| \leq \varepsilon \\ 1, & |\delta - \theta| > \varepsilon \end{cases}$$

当 ε 较小时的贝叶斯决策。

利用贝叶斯方法解决实际问题的关键一步是如何把对未知参数的先验认识转化为它的先验分布，先验分布的合理性决定了贝叶斯方法结论的可靠性。因此在确定先验分布时，一定要确保它能够准确地刻画当前对未知参数的认知状态。先验分布的确定已经有一些成功的方法，读者可在任一本贝叶斯专著上查到，本书就不做专门的介绍了。贝叶斯公式的意义在于，它将先验分布与样本信息综合后得到参数的后验分布，即对未知参数的认知状态进行了修正。这恰当地描述了人类认识世界的过程。下面以一个简单的案例来介绍贝叶斯推断。

例 1.21. 设 $\{y_1, y_2, \dots, y_n\} \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(\mu, 1)$ ，记样本均值为 \bar{y} ，考虑参数 μ 的统计推断。

频率学派假定 μ 为未知但固定的参数，即存在一个真值，在这一假定下作出如下推断：

- μ 的极大似然估计为 $\hat{\mu} = \bar{y}$.
- 估计量的标准误差 (standard error, se) 为 $se(\hat{\mu}) = \sqrt{\text{Var}(\bar{y})} = 1/\sqrt{n}$;
- 因 $\bar{y} \sim N(\mu, 1/n)$, 故 95% 的置信区间为 $\hat{\mu} \pm 1.96se(\hat{\mu})$.

贝叶斯学派则假定参数 μ 为随机变量, 并给它一个先验分布 $\Pi(\mu)$, 这一分布是我们对 μ 的认知状态, 可以存在一定的主观性. 假定先验分布为 $N(\mu_0, \tau_0^2)$, 根据贝叶斯公式(1.9), 可以得到 μ 的后验分布为

$$\mu|\bar{y} \sim N(\mu_n, \tau_n^2),$$

其中

$$\mu_n = \frac{\frac{1}{\tau_0^2}\mu_0 + n\bar{y}}{\frac{1}{\tau_0^2} + n}, \quad \tau_n^2 = \frac{1}{\frac{1}{\tau_0^2} + n}.$$

可见在正态模型中, 如果均值参数的先验分布为正态分布, 则它的后验分布也是正态分布. 在贝叶斯学派中, 对于某似然函数, 如果参数的先验分布和后验分布属同一分布族, 则称该先验分布为共轭先验 (conjugate prior). 共轭先验使得计算简单, 便于理论分析. 由于后验分布只与样本的均值 \bar{y} 有关, 这在统计学中称 \bar{y} 为 μ 的充分统计量 (sufficient statistic).

由于得了参数 μ 的后验分布, 其点估计、区间估计和假设检验都十分简便. 参数 μ 的后验均值估计为

$$\tilde{\mu} = \frac{\frac{1}{\tau_0^2}\mu_0 + n\bar{y}}{\frac{1}{\tau_0^2} + n} = \frac{\frac{1}{\tau_0^2}}{\frac{1}{\tau_0^2} + n}\mu_0 + \frac{n}{\frac{1}{\tau_0^2} + n}\bar{y},$$

它是先验均值与样本均值的加权平均, 权系数由先验方差和样本量共同决定:

- 给定样本量 n , 当 $\tau_0 \rightarrow 0$ 时 $\tilde{\mu} \rightarrow \mu_0$, 而当 $\tau_0 \rightarrow \infty$ 时 $\tilde{\mu} \rightarrow \bar{y}$.
- 给定 τ_0 , 当 $n = 0$ 时 $\tilde{\mu} = \mu_0$, 当 $n \rightarrow \infty$ 时 $\tilde{\mu} \rightarrow \bar{y}$.

以上两点体现了贝叶斯估计在先验信息与样本信息之间的某种均衡关系. 称参数后验分布的方差的平方根为标准偏差 (standard deviation, sd), 本例中

$$sd(\tilde{\mu}) = \sqrt{\frac{1}{\frac{1}{\tau_0^2} + n}}$$

它要优于频率学派的标准误差, 即利用贝叶斯估计能够提高估计精度. 从频率学派的角度来看, 由于引入了先验均值, 因此 $\tilde{\mu}$ 一定是有偏的. 一方面, 虽然精度提高了, 但是偏差增加了, 这不一定是件坏事, 这体现了偏差与方差之间的均衡; 另一方面, 当样本量足够大, 先验信息将被样本信息淹没, 贝叶斯估计以 $n^{-1/2}$ 的速度收敛于参数的真值, 这就是后验相合性 (posterior consistency) 与后验收敛速度 (posterior contraction rates) 的概念.

贝叶斯学派称参数的区间估计为可信区间 (Credible Interval, CI), 可直接取后验概率为 $1 - \alpha$ 的区间作为参数的可信区间. 称满足以下两个条件

- (1) 区间内任意一点的后概率密度不小于区间外任意一点的后验概率密度;
- (2) 在一切 $1 - \alpha$ 可信区间中长度最短.

的可信区间为 $1 - \alpha$ 的贝叶斯 HPD (*Highest Posterior Density*) 区间。本例中参数的 95% 贝叶斯 HPD 区间为 $\bar{\mu} \pm 1.96sd(\bar{\mu})$ 。虽然可信区间与置信区间的英文缩写都是 *CI*, 但它们有着本质的不同：置信区间是随机区间，参数是常量；可信区间是非随机的区间，参数是随机变量。

对于检验问题, $H_0 : \mu \in \Theta_0$ vs $H_1 : \mu \in \Theta_1$, 可直接计算集合 Θ_0 和 Θ_1 的后验概率, 如果 $\Pi(\Theta_0|\bar{y}) > \Pi(\Theta_1|\bar{y})$, 则接受原假设, 否则拒绝原假设.

1.5 习题

- 1.1** 如何确定两个变量之间是否有相关关系?
- 1.2** 如何确定两个变量之间是否有因果关系?
- 1.3** 查阅文献, 了解抽样与试验设计的联系和区别.
- 1.4** 详细分析避免 Yule-Simpson 悖论处理组与对照组试验单元个数应该满足的条件.
- 1.5** 查阅文献, 了解六西格玛法.
- 1.6** 本章列举了一些试验设计领域的关键人物, 如 Fisher, Yates, Box, Taguchi 等, 请查阅他们的生平并梳理其主要贡献.
- 1.7** 安装 RStudio, 并利用 swirl 包自学 R 语言.
- 1.8** 请结合**1.2.4**节, 谈谈实验设计与分析的军事应用.
- 1.9** 从**1.2.4**节中的试验结果, 你能分析出 7 个因子中, 哪个因子对空战结果影响最大吗?
- 1.10** 访问宾夕法利亚大学艾伯利理学院 (PennState Eberly College of Science) 试验设计课程网站: <https://newonlinecourses.science.psu.edu/stat503/node/1/>.
- 1.11** 根据随机误差方差的估计, 分析样本量与精度之间的关系.
- 1.12** 设 \mathbf{A} 为 n 阶方阵, \mathbf{X} 为 $n \times m$ 阶矩阵, \mathbf{x} 为 n 维列向量, 证明:
- (1) 如果 $y = \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}$, 则 $\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathbf{x}$;
 - (2) 如果 $y = \text{tr}(\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X})$, 则 $\frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathbf{X}$.

第二章 因子试验设计

本章目标:

- (1) 学会利用方差分析法分析因子试验数据;
- (2) 会构造 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 型正交表并利用它设计和分析 2^k 因子试验;
- (3) 会构造 $L_{3^k}(3^{\frac{3^k-1}{2}})$ 型正交表并利用它设计和分析 3^k 因子试验;
- (4) 理解效应混杂、别名、定义关系、分辨度等概念;
- (5) 掌握利用正交表设计试验和分析数据的方法.

因子设计 (factorial design) 也称析因设计, 是一种经典的、使用最广泛的试验设计方法. 它即适用于定量因子, 也适用于定性因子, 还可以处理同时包含定性定量因子的试验. 它采用方差分析作为数据处理的基本工具, 可量化因子对响应的效应, 判断效应的显著性.

因子设计的基本思路是同时考虑多个试验因子, 将试验因子设定为若干个水平, 构成由有限个处理组成的试验空间 \mathcal{X} , 以全部或部分处理作为试验点安排试验, 比较诸处理之间的差异, 分析造成响应波动的原因, 并筛选出重要因素. 其对应的统计模型可总结为以下两个.

- (1) **比较试验模型:** 试验的目的是估计 n 个试验点 (处理) $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ 处的响应值 y_1, y_2, \dots, y_n , 并比较它们的大小.
- (2) **方差分析模型:** 除了估计 n 个试验点 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n$ 处的响应值 y_1, y_2, \dots, y_n 外, 还希望把响应值分解为不同因子效应及交互效应, 并分析诸因子的敏感性, 搞清楚每个因子对响应的影响和各个因子同时变化对响应的影响.

比较试验模型可以看作单因子方差分析模型, 每个试验点代表一个水平.

例 2.1. 为了提高某化工产品的转化率, 选择 3 个试验因子: 反应温度 (A)、反应时间 (B) 和用碱量 (C), 每个因子取 3 个水平: $A_1 = 80^\circ\text{C}$, $A_2 = 85^\circ\text{C}$, $A_3 = 90^\circ\text{C}$; $B_1 = 90\text{min}$, $B_2 = 120\text{min}$, $B_3 = 150\text{min}$; $C_1 = 5\%$, $C_2 = 6\%$, $C_3 = 7\%$. 如何安排这一试验呢?

单因子试验轮换法是一种控制变量法, 通过逐次控制其余因子, 将一个多因子试验化为多个单因子试验. 步骤如下:

- 固定 $B = B_1$, $C = C_1$, 考察 A 的 3 个水平: (A_1, B_1, C_1) , (A_2, B_1, C_1) , (A_3, B_1, C_1) ,
假设结果表明处理 (A_3, B_1, C_1) 最好;

- 固定 $A = A_3, C = C_1$, 考察 B 的 3 个水平: $(A_3, B_1, C_1), (A_3, B_2, C_1), (A_3, B_3, C_1)$, 假设结果表明处理 (A_3, B_2, C_1) 为最好;
- 固定 $A = A_3, B = B_2$, 考察 C 的 3 个水平: $(A_3, B_2, C_1), (A_3, B_2, C_2), (A_3, B_2, C_3)$, 假设结果表明处理 (A_3, B_2, C_2) 最好;
- 固定 $B = B_2, C = C_2$, 考察 A 的 3 个水平: $(A_1, B_2, C_2), (A_2, B_2, C_2), (A_3, B_2, C_2)$, 假设结果表明处理 (A_3, B_2, C_2) 最好,
- 固定 $A = A_3, C = C_2$, 变化 B : $(A_3, B_1, C_2), (A_3, B_2, C_2), (A_3, B_3, C_2)$, 假设结果以处理 (A_3, B_2, C_2) 为最好, 这时已有明朗的结论: (A_3, B_2, C_2) 为最佳处理.

上述过程一共进行了 11 次试验, 如图 2.1 所示. 从图中可以看到, 该方法的缺陷是试验方案不均衡, 例如 C_1 水平共进行了 5 次试验, 而 C_3 水平仅进行了 1 次试验. 在没有交互效应的情况下, 单因子试验轮换法能够很快找到最佳处理; 如果因子间有交互效应时, 则可能辗转于各种单因子优化水平试验之中. 单因子试验轮换法一次只考虑一个因子, 而因子设计同时考虑所有试验因子, 因此严格意义上来说单因子轮换法不属于因子设计.

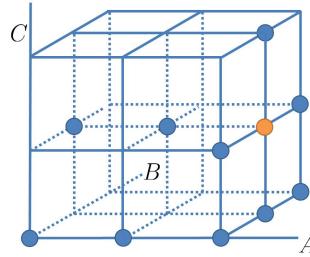


图 2.1: 因子轮换法试验点

因子设计包括全面实施和部分实施两类试验方案. 顾名思义, 全面实施把全部处理当作试验点, 相应的试验设计方法称为完全因子设计. 本试验中共有 27 个处理, 全面实施要求至少做 27 次试验, 它们是图 2.2 立方体内的 27 个点. 从图中可以看出, 即便每个处理只进行一次重复, 每个因子的每个水平都进行了 9 次重复. 在全面实施中, 每个因子水平的重复次数等于处理重复次数与其余因子水平数的乘积, 称这种重复为隐性重复 (*hidden replication*).

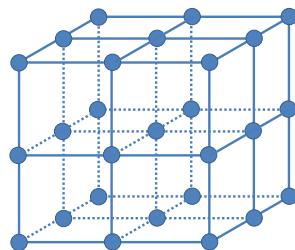


图 2.2: 3^3 全面实施的处理组合

在 R 中, 可以利用函数 `expand.grid()` 给出多因子试验的全面实施方案. 例如本例中可以使用代码

```

1 D <- expand.grid(A = c("A1", "A2", "A3"), B = c("B1", "B2", "B3"), C = c("C1", "C2", "C3")
2   "'))
3 set.seed(2591)
4 D <- rbind(D, D)
5 D <- D[order(sample(1:54)), ]
6 Design <- D[c("A", "B", "C")]
7 write.csv(Design, file = "Desin.csv", row.names = FALSE)

```

得到每一处理重复 2 次试验的全面实施的试验方案, 其中第 4 行对试验次序进行随机化.

全面实施获取的信息比较完整, 当处理数目不太大时可以使用. 当因子数增加或因子的水平数增加时, 处理数将呈指数增长, 使得无法实现全面实施. 如有 6 个 5 水平因子, 全面实施至少需要做 $5^6 = 15625$ 次试验. 部分因子设计 (*fractional factorial design*) 从全部处理中挑选出部分有代表性的点来部分实施. 图 2.3 是用正交表 $L_9(3^4)$ 安排的试验方案, 在该方案下每一个因子的每一个水平都进行了 3 次试验.

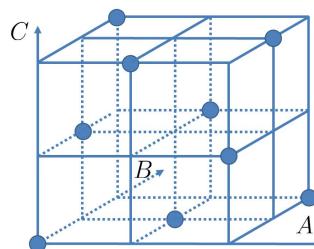


图 2.3: 利用正交表 $L_9(3^4)$ 前三列安排三因子试验

读者应记住, 部分实施是在试验资源稀缺的条件下不得已而采用的办法, 它不可能获取全面实施那么多的信息. 为了控制试验次数, 实际工作中常将每个因子的水平数限制为 2, 称该类试验为 2^k 因子试验, 这里 k 表示因子数目. 但 2^k 因子试验对于非线性模型是远远不够的, 实践表明, 非线性因子往往需取 3–5 个水平. 如何从诸多处理中挑选出部分具有代表性的试验点, 是本章所关注的重点问题.

本章结构如下: 2.1 节以单因子、双因子以及三因子试验的全面实施为例, 介绍试验数据的方差分析法, 同时引入“主效应”、“交互效应”、“自由度”、“对照”等重要概念; 2.2 节介绍 2^k 因子试验及其部分实施, 在巩固方差分析法的同时, 引入正交表、混杂、别名、定义关系等基本概念; 2.3 节简单介绍 3^k 因子设计及其部分实施, 推广和巩固 2^k 因子设计中的思想和方法; 2.4 节简单讨论一般的正交表及其使用方法.

2.1 方差分析法

试验中, 噪声因子和处理的改变都会引起响应值的波动, 判断试验因子与响应之间是否存在因果关系就是要判断处理的改变是否是造成响应改变的原因之一. **方差分析** (analysis of variance, ANOVA) 的基本思想是: 假定不同处理下的响应值来自方差相同的正态总体; 若不同处理下正态总体的均值相等, 则试验数据的波动由噪声因子引起; 如果不同处理下正态总体的均值不全相等, 则试验数据的波动还包含被考察因子的效应. 为此, 需要构造统计量来刻画数据的波动, 并将这个统计量分解为与不同因子效应对应的部分, 然后利用假设检验的理论来检验因子效应是否显著. 方差分析法的基本假设总结如下:

假设 2.1. 不同处理对应的响应值来自于方差相同的正态总体, 且每次试验结果都互相独立.

2.1.1 单因子试验

设因子 A 共有 a 个不同的水平, 按照1.2.1节的记法, 我们应记 A 的 a 个水平为 x_1, x_2, \dots, x_a . 为了保持与主流教材的一致, 这里采用 A_1, A_2, \dots, A_a 的记号. 试验的目的是研究 A 的变动是否会带来响应的波动, 并进一步比较 A 的水平之间的优劣. 如果试验误差极小, 则在每个水平下做一次试验即可. 但实际中误差的大小往往无从知晓, 需要通过重复试验获得对误差的估计, 再比较诸水平. 设在水平 A_i 下做 n_i 次重复试验, 总共做

$$n = \sum_{i=1}^a n_i$$

次试验. n 次试验的数据如表2.1所示, 其中 y_{ij} 表示第 i 个水平的第 j 次试验的观察值.

表 2.1: 单因子试验数据表

水平	观察值			
A_1	y_{11}	y_{12}	\cdots	y_{1n_1}
A_2	y_{21}	y_{22}	\cdots	y_{2n_2}
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
A_a	y_{a1}	y_{a2}	\cdots	y_{an_a}

(1) 单因子试验固定效应模型

假设响应值 y_{ij} 由两部分组成, 水平 A_i 下的均值 μ_i 和服从正态分布 $N(0, \sigma^2)$ 的随机误差 ε_{ij} , 这里 σ 是一个未知参数. 综合起来得到模型

$$\begin{cases} y_{ij} = \mu_i + \varepsilon_{ij}, & \varepsilon_{ij} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2), \\ i = 1, \dots, a, & j = 1, \dots, n_i. \end{cases} \quad (2.1)$$

称

$$\mu := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a n_i \mu_i$$

为一般平均或总平均 (grand mean), 表示因子 A 以外其它试验条件的总效应; 称

$$\tau_i := \mu_i - \mu, \quad i = 1, \dots, a$$

为水平 A_i 的效应 (effect), 表示与 A_i 对应的第 i 个总体的均值比一般平均大 (或小) 多少. 从因果关系的角度来看, A_i 是原因, τ_i 是结果. 注意到

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a n_i \mu_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a n_i (\mu + \tau_i) \\ &= \mu + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a n_i \tau_i, \end{aligned}$$

故 $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_a$ 满足约束

$$\sum_{i=1}^a n_i \tau_i = 0.$$

于是, 统计模型(2.1)可改写成

$$\begin{cases} y_{ij} = \mu + \tau_i + \varepsilon_{ij}, & \varepsilon_{ij} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2), \\ i = 1, \dots, a, & j = 1, \dots, n_i, \\ \sum_{i=1}^a n_i \tau_i = 0. \end{cases} \quad (2.2)$$

由于模型(2.2)中参数 μ 和 τ_i 都是一次的, 因此称(2.2)式为单因子试验的线性可加模型 (linear additive model). 又因为模型(2.2)中, 效应 τ_i 为常量, 也称(2.2)式为单因子试验的固定效应模型 (fixed effect model). 显然, 模型(2.2)是满足基本假设2.1的.

(2) 方差分析

方差分析的目的是比较 a 个效应 $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_a$ 之间的大小关系. 这是一个假设检验的问题, 一个可供选择的办法是对任意 $i \neq j$, 检验 $H_0^{ij} : \tau_i = \tau_j$, 一共检验 C_a^2 个不同的假设. 如果检验其中一个假设犯第 I 类错误 (弃真) 的概率是 $\alpha = 0.05$, 则正确地接受这个假设的概率是 0.95. 如果 $a = 5$, 则共需检验 $C_a^2 = 10$ 个假设, 正确地接受这 10 个假设的概率是 $0.95^{10} \approx 0.60$, 即错误地拒绝这 10 个假设中至少一个的概率是 0.40, 这大大地增加了犯第 I 类错误的概率.

为控制犯第 I 类错误的概率, 本节首先考虑如下假设检验问题:

$$H_0 : (\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_a) = \mathbf{0} \quad \text{v.s.} \quad H_1 : (\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_a) \neq \mathbf{0}. \quad (2.3)$$

就像机场入口检查爆炸品, 一次性检查几十个, 既降低了犯第 I 类错误 (虚警) 的概率又节约了时间. 当然, 这其中暗含稀疏 (sparsity) 假定, 即 $\tau_i \neq 0$ 的个数很少, 携带有爆炸品的人数是及其稀少的.

为构造检验统计量, 引入记号

$$y_{..} := \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij}, \quad \bar{y}_{..} := \frac{y_{..}}{n}, \quad y_{i..} := \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij}, \quad \bar{y}_{i..} := \frac{y_{i..}}{n_i},$$

即下标 “..” 表示对相应的下标求和. 类似地,

$$\varepsilon_{..} := \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij}, \quad \bar{\varepsilon}_{..} := \frac{\varepsilon_{..}}{n}, \quad \varepsilon_{i..} := \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij}, \quad \bar{\varepsilon}_{i..} := \frac{\varepsilon_{i..}}{n_i}.$$

全部数据之间的波动可用**总偏差平方和**

$$SS_T := \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij}^2 - \frac{y_{..}^2}{n} \quad (2.4)$$

来表示. 因子的水平变动和试验误差共同引起试验数据的波动, 为了区分这两个原因的影响, 将 SS_T 分解为

$$\begin{aligned} SS_T &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} [(y_{ij} - \bar{y}_{i..}) + (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{..})]^2 \\ &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_{i..})^2 + 2 \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_{i..})(\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{..}) + \sum_{i=1}^a n_i (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{..})^2. \end{aligned}$$

因 $\sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_{i..}) = 0$, 故

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_{i..})^2 + \sum_{i=1}^a n_i (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{..})^2. \quad (2.5)$$

把模型(2.2)代入(2.5)式右边第一项, 可得到

$$\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_{i..})^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (\varepsilon_{ij} - \bar{\varepsilon}_{i..})^2,$$

它只与随机误差有关, 因此称它为**误差平方和**, 记作 SS_E . 把模型(2.2)代入(2.5)式右边的第二项, 得到

$$\sum_{i=1}^a n_i (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{..})^2 = \sum_{i=1}^a n_i (\tau_i + \bar{\varepsilon}_{i..} - \bar{\varepsilon}_{..})^2,$$

其中随机误差都是求过平均的, 方差变小了. 故当 H_0 不成立时, $\sum_{i=1}^a n_i (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{..})^2$ 主要是由于因子 A 的水平变动造成的, 故称之为**因子 A 的偏差平方和**, 记作 SS_A , 即

$$SS_A = \sum_{i=1}^a n_i (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{..})^2 = \sum_{i=1}^a \frac{y_{i..}^2}{n_i} - \frac{y_{..}^2}{n}. \quad (2.6)$$

于是, 偏差平方和分解公式又可写作 $SS_T = SS_A + SS_E$.

为了看出如何选择检验(2.3)中假设 H_0 的统计量, 先计算两个平方和 SS_A 和 SS_E 的期望. 根据模型(2.2)可得

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(SS_E) &= \mathbb{E} \left[\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (\varepsilon_{ij} - \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij})^2 \right] \\ &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} \mathbb{E}(\varepsilon_{ij}^2) - 2 \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} \mathbb{E} \left(\frac{\varepsilon_{ij}}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij} \right) + \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} \mathbb{E} \left(\frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij} \right)^2 \\ &= n\sigma^2 - 2 \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{n_i} \mathbb{E}(\varepsilon_{ij}^2) + \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} \frac{1}{n_i^2} \mathbb{E} \left(\sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij}^2 \right) \\ &= (n-a)\sigma^2\end{aligned}$$

以及

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(SS_A) &= \mathbb{E} \left[\sum_{i=1}^a n_i \left(\frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij} \right)^2 \right] \\ &= \mathbb{E} \left[\sum_{i=1}^a n_i \left(\tau_i + \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij} - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij} \right)^2 \right] \\ &= \sum_{i=1}^a \left[n_i \tau_i^2 + \sigma^2 + \frac{n_i}{n^2} \mathbb{E} \left(\sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij} \right)^2 - \frac{2}{n} \mathbb{E} \left(\sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} \varepsilon_{ij} \right) \right] \\ &= \sum_{i=1}^a \left[n_i \tau_i^2 + \sigma^2 - \frac{n_i}{n} \sigma^2 \right] = \sum_{i=1}^a n_i \tau_i^2 + (a-1)\sigma^2.\end{aligned}$$

称 $\frac{SS_A}{a-1}$ 为因子 A 的均方和, 记作 MS_A ; 称 $\frac{SS_E}{n-a}$ 为误差均方和, 记作 MS_E . MS_E 是 σ^2 的无偏估计, 而当原假设 H_0 成立时, MS_A 也是 σ^2 的无偏估计. 故当 H_0 成立时, 这两个估计应当差不多, 否则相差很大, 故可构造统计量

$$F := \frac{MS_A}{MS_E} = \frac{SS_A/(a-1)}{SS_E/(n-a)} \tag{2.7}$$

来检验原假设. 问题转化为求统计量 F 的分布.

从 SS_E 和 SS_A 的定义可看出, 它们都是正态随机向量 (y_{ij}) 的二次型, 根据引理1.5, 它们应服从 χ^2 分布, 故统计量 F 可能服从 F 分布. 有如下定理.

定理 2.1. 模型(2.2)中, 如果原假设 $H_0 : (\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_a) = \mathbf{0}$ 成立, 则由(2.7)式构造的 F 统计量的分布为 $F(a-1, n-a)$.

Proof. 根据 F 分布的定义, 只需证明, $SS_E/\sigma^2 \sim \chi^2(n - a)$, 当 H_0 成立时, $SS_A/\sigma^2 \sim \chi^2(a - 1)$ 且与 SS_E 独立即可. 这可通过把它们分别表示成 Gauss 随机向量的二次型, 再利用引理1.5得到.

事实上, 令

$$\mathbf{y} = \frac{1}{\sigma}(y_{11}, \dots, y_{1n_1}, y_{21}, \dots, y_{2n_1}, \dots, y_{a1}, \dots, y_{an_a})^T,$$

则 $\mathbf{y} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{I})$ 为 Gauss 随机向量, 其中

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{\sigma}(\mu + \tau_1, \dots, \mu + \tau_1, \mu + \tau_2, \dots, \mu + \tau_2, \dots, \mu + \tau_a, \dots, \mu + \tau_a)^T.$$

令

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{1}{n} & -\frac{1}{n} & \cdots & -\frac{1}{n} \\ -\frac{1}{n} & 1 - \frac{1}{n} & \cdots & -\frac{1}{n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{1}{n} & -\frac{1}{n} & \cdots & 1 - \frac{1}{n} \end{bmatrix} = \mathbf{I}_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}_n^T,$$

则 \mathbf{P} 为对称幂等矩阵,

$$\text{rank}(\mathbf{P}) = \text{tr}(\mathbf{P}) = n - 1, \quad \frac{SS_T}{\sigma^2} = \mathbf{y}^T \mathbf{P} \mathbf{y},$$

且当 H_0 成立时, $\boldsymbol{\mu}^T \mathbf{P} \boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$, 故 $SS_T/\sigma^2 \sim \chi^2(n - 1)$.

令

$$\mathbf{P}_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{U}_1 & & & \\ & \mathbf{U}_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{U}_a \end{bmatrix}$$

其中, 空白处元素全为 $-\frac{1}{n_i}$, \mathbf{U}_i 表示元素全为 $\frac{1}{n_i} - \frac{1}{n}$ 的 n_i 阶方阵. 则 \mathbf{P}_1 为对称幂等矩阵,

$$\text{rank}(\mathbf{P}_1) = \text{tr}(\mathbf{P}_1) = \sum_{i=1}^a n_i \left(\frac{1}{n_i} - \frac{1}{n} \right) = a - 1,$$

且 $\frac{SS_A}{\sigma^2} = \mathbf{y}^T \mathbf{P}_1 \mathbf{y}$, 故当 H_0 成立时, $\frac{SS_A}{\sigma^2} \sim \chi^2(a - 1)$.

令

$$\mathbf{P}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{n_1} - \frac{1}{n_1}\mathbf{1}_{n_1}\mathbf{1}_{n_1}^T & & & \\ & \mathbf{I}_{n_2} - \frac{1}{n_2}\mathbf{1}_{n_2}\mathbf{1}_{n_2}^T & & \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{I}_{n_a} - \frac{1}{n_a}\mathbf{1}_{n_a}\mathbf{1}_{n_a}^T \end{bmatrix}$$

则 \mathbf{P}_2 为对称幂等矩阵,

$$\text{rank}(\mathbf{P}_2) = \text{tr}(\mathbf{P}_2) = \sum_{i=1}^a n_i \left(1 - \frac{1}{n_i}\right) = n - a,$$

且 $\frac{SS_E}{\sigma^2} = \mathbf{y}^\top \mathbf{P}_2 \mathbf{y}$, 故 $\frac{SS_E}{\sigma^2} \sim \chi^2(n - a)$.

由于 $\mathbf{P} = \mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2$, 且 $\text{rank}(\mathbf{P}_1) + \text{rank}(\mathbf{P}_2) = \text{rank}(\mathbf{P})$, 故 SS_E 和 SS_A 互相独立. \square

单因子试验的方差分析归纳在表2.2中. 其中, f_E 表示误差的自由度, f_A 表示因子 A 的自由度, f_T 表示总的自由度, 它们是诸平方和所对应的 χ^2 分布的自由度, 满足 $f_T = f_A + f_E$. 注意, 因子 A 的自由度恰为其效应参数中独立的个数.

表 2.2: 单因子试验方差分析表

来源	平方和	自由度	均方和	F 值
因子 A	$SS_A = \sum_{i=1}^a \frac{y_{i\cdot}^2}{n_i} - \frac{y_\cdot^2}{n}$	$f_A = a - 1$	$MS_A = \frac{SS_A}{f_A}$	$F = \frac{MS_A}{MS_E}$
误差	$SS_E = SST - SS_A$	$f_E = n - a$	$MS_E = \frac{SS_E}{f_E}$	
总	$SST = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij}^2 - \frac{y_\cdot^2}{n}$	$f_T = n - 1$		

(3) 参数的点估计

当诸 ε_{ij} 互相独立, 且满足 $\mathbb{E}(\varepsilon_{ij}) = 0$ 时, 前面的分析已经指出

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

是 σ^2 的无偏估计. 下面讨论 μ 和诸 τ_i 的估计. 分别用 $\hat{\mu}$ 和 $\hat{\tau}_i$ 表示它们的估计, 用 $\hat{y}_{ij} = \hat{\mu} + \hat{\tau}_i$ 表示 y_{ij} 的估计. 常用的估计方法包括**最小二乘估计**和**极大似然估计**.

所谓最小二乘估计, 就是使得目标函数

$$Q(\mu, \tau_1, \dots, \tau_a) := \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \mu - \tau_i)^2$$

达到最小的 $\hat{\mu}$ 与 $\hat{\tau}_i$. 对参数求导, 并令导数为 0, 得到正规方程组

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \hat{\mu} - \hat{\tau}_i) = 0, \\ \sum_{j=1}^{n_1} (y_{1j} - \hat{\mu} - \hat{\tau}_1) = 0, \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{n_a} (y_{aj} - \hat{\mu} - \hat{\tau}_a) = 0, \end{cases}$$

注意到第一个方程是后面 a 个方程的和, 因此上述方程组实际上只有 a 个独立的方程, 还需要引入约束 $\sum_{i=1}^a n_i \hat{\tau}_i = 0$ 才能求得 $a+1$ 个参数的解. 整理简化得到:

$$\begin{cases} n\hat{\mu} & = y.. \\ n_1\hat{\mu} + n_1\hat{\tau}_1 & = y_{1..} \\ n_2\hat{\mu} + n_2\hat{\tau}_2 & = y_{2..} \\ & \vdots \\ n_a\hat{\mu} + n_a\hat{\tau}_a & = y_{a..} \end{cases}$$

除 $\hat{\mu}$ 外, 上述每个方程中仅包含一个参数, 且包含这个参数的方程中仅包含与该参数有关的数据, 即数据得到了充分而恰当的应用. 求解上述方程组得到 μ 和 τ_i 的最小二乘估计:

$$\begin{cases} \hat{\mu} = \bar{y}.., \\ \hat{\tau}_1 = \bar{y}_{1..} - \bar{y}.., \\ & \vdots \\ \hat{\tau}_a = \bar{y}_{a..} - \bar{y}.. \end{cases} \quad (2.8)$$

一般平均的估计恰为所有观测值的平均, 任一水平的效应的估计恰为该水平下观察值的平均与总平均的差. 由于估计量都是数据的线性函数, 很容易求得

$$\mathbb{E}(\hat{\mu}) = \mu, \quad \mathbb{E}(\hat{\tau}_i) = \tau_i, \quad i = 1, \dots, a.$$

因而称它们为参数的**线性无偏估计** (linear unbiased estimator). 由数理统计课程中的 C-R 下界定理可知, 当误差 $\varepsilon_{ij} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2)$ 时, 它们还是一切线性无偏估计类中方差最小的, 因而又称为**最佳线性无偏估计** (best linear unbiased estimator, BLUE).

当假设 $\varepsilon_{ij} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2)$ 成立时, 还可以求得诸参数的极大似然估计. 此时, 似然函数为

$$\begin{aligned} L(\mu_1, \dots, \mu_a, \sigma^2) &= \prod_{i=1}^a \prod_{j=1}^{n_i} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (y_{ij} - \mu_i)^2 \right\} \right] \\ &= \left(\sqrt{2\pi}\sigma \right)^{-n} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \mu_i)^2 \right\}. \end{aligned}$$

两边同时取对数得到

$$\begin{aligned} \ell(\mu_1, \dots, \mu_a, \sigma^2) &:= -\ln L(\mu_1, \dots, \mu_a, \sigma^2) \\ &= \frac{n}{2} \ln(2\pi) + \frac{n}{2} \ln(\sigma^2) + \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \mu_i)^2. \end{aligned}$$

分别对参数 $\mu_1, \dots, \mu_a, \sigma^2$ 求导，并令其导数为零可得

$$\begin{cases} \frac{\partial \ell(\mu_1, \dots, \mu_a, \sigma^2)}{\partial \mu_i} = \frac{1}{\sigma^2} \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \mu_i) = 0, & i = 1, \dots, a, \\ \frac{\partial \ell(\mu_1, \dots, \mu_a, \sigma^2)}{\partial \sigma^2} = \frac{n}{2\sigma^2} - \frac{1}{2\sigma^4} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \mu_i)^2 = 0. \end{cases}$$

由此可求得 μ_i 和 σ^2 的极大似然估计 (MLE) 为：

$$\begin{cases} \hat{\mu}_i = \bar{y}_{i\cdot}, & i = 1, \dots, a, \\ \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} (y_{ij} - \bar{y}_{i\cdot})^2. \end{cases}$$

特别指出， σ^2 的极大似然估计不是无偏估计.

最小二乘估计与极大似然估计是两类常用的估计方法，它们的区别如下：

- (1) 最小二乘不需要知道随机误差的分布，只需假定诸 ε_{ij} 独立同分布，均值为 0，方差有限，即可得到较好的理论性质。而极大似然估计需要知道误差的具体分布。
- (2) 设 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 是参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的极大似然估计， $f(\boldsymbol{\theta})$ 是 $\boldsymbol{\theta}$ 的连续函数，则 $f(\hat{\boldsymbol{\theta}})$ 是 $f(\boldsymbol{\theta})$ 的极大似然估计。根据这一性质，可得到总体均值 μ 和效应 τ_i 的极大似然估计为：

$$\hat{\mu} = \bar{y}_{..}, \quad \hat{\tau}_i = \bar{y}_{i\cdot} - \bar{y}_{..}, i = 1, \dots, a.$$

不能如此方便地得到参数的函数的最小二乘估计。

- (3) 极大似然估计同时给出所有参数的估计，而最小二乘估计对 τ_i 和 σ^2 是分别处理的。

例 2.2. 假设制造某新型手枪共有 A, B, C, D 四种不同工艺。为研究四种工艺之间的差异，命 a, b, c, d, e 五个战士打靶，命中频数数据如表 2.2 所示。

表 2.3: 新型手枪打靶试验数据

	A	B	C	D
a	0.60	0.59	0.71	0.72
b	0.80	0.81	0.88	0.86
c	0.68	0.64	0.80	0.79
d	0.68	0.70	0.81	0.82
e	0.59	0.60	0.73	0.72
$y_{i\cdot}$	3.35	3.34	3.93	3.91
$\bar{y}_{i\cdot}$	0.670	0.668	0.786	0.782

这一试验的试验因子是工艺，共有 4 个水平，响应就是命中频数，它是一个 4 水平单因子试验。一个处理就是试验因子的一个水平组合，这里只有一个因子，因此只有 4 个处理。

- 这里用到了重复，每一处理都重复了 5 次试验；
- 这里也用到了区组，一个战士就是一个区组，以消除不同战士射击水平这个噪声因子带来的系统偏差；
- 这里也应当用到随机化，每个战士使用四种不同工艺生产出来手枪的次序应该随机确定，以消除同一战士熟练程度和心理等因素造成的影响。

本例的固定效应模型是

$$\begin{cases} y_{ij} = \mu + \tau_i + \varepsilon_{ij}, & \varepsilon_{ij} \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(0, \sigma^2), \\ i = 1, \dots, 4, & j = 1, \dots, 5. \\ \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 + \tau_4 = 0, \end{cases}$$

手动计算偏差平方和：

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^{n_i} y_{ij}^2 - \frac{y_{..}^2}{n} = 0.16106,$$

$$SS_A = \sum_{i=1}^a \frac{y_i^2}{n_i} - \frac{y_{..}^2}{n} = 0.06618$$

$$F = \frac{SS_A/(4-1)}{(SS_T - SS_A)/(20-4)} = 3.72 > F_{0.95}(3, 16) = 3.24.$$

在显著性水平 $\alpha = 0.05$ 下，应拒绝原假设，即认为这四种工艺之间存在差异。

手动计算十分困难，下面利用 R 来对本例进行方差分析。添加包 stats 提供了用于方差分析的函数 aov()，其用法如下：

```
1 aov(formula, data = NULL, projections = FALSE, contrasts = NULL, ...)
```

其各参数的含义可以在 R 帮助文档中找到。本例为单因素方差分析，代码清单如下：

```
1 x <- c(0.60, 0.80, 0.68, 0.68, 0.59, 0.59, 0.81, 0.64, 0.70, 0.60, 0.71, 0.88,
      0.80, 0.81, 0.73, 0.72, 0.86, 0.79, 0.82, 0.72);
2 method <- factor(rep(1:4, each = 5));
3 aov_Data <- data.frame(x, method);
4 aov_Result <- aov(x ~ method, data = aov_Data);
```

第一行代码利用函数 c() 创建数值型原子向量，并将结果存储到 x 中；第二行创建一个名为 method 的因子，它有 4 个水平，每个水平重复 5 次，关于函数 rep() 的使用，可以借助 R 的帮助文档；第三行将数据存储到名为 aov_Data 的数据框中，如果在 RStudio 控制台命令提示符后输入 aov_Data，回车后将得到如下结果：

```
1 aov.Data
2 #>   x  method
3 #> 1  0.60     1
4 #> 2  0.80     1
5 #> 3  0.68     1
6 #> 4  0.68     1
7 #> 5  0.59     1
```

```

8  #> 6 0.59    2
9  #> 7 0.81    2
10 #> 8 0.64    2
11 #> 9 0.70    2
12 #> 10 0.60   2
13 #> 11 0.71   3
14 #> 12 0.88   3
15 #> 13 0.80   3
16 #> 14 0.81   3
17 #> 15 0.73   3
18 #> 16 0.72   4
19 #> 17 0.86   4
20 #> 18 0.79   4
21 #> 19 0.82   4
22 #> 20 0.72   4

```

第四行命令将方差分析的结果存入 `aov_Result` 中, `aov()` 函数的返回对象是一个 13 列的列表. 调用 `summary()` 函数可将方差分析结果展示出来:

```

1 summary(aov_Result)
2      Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
3  method     3 0.06618 0.02206 3.72 0.0334 *
4  Residuals 16 0.09488 0.00593
5  ---
6  #> Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

```

其中, `Df` 表示自由度; `Sum Sq` 表示平方和, `Mean Sq` 表示均方和, `F value` 表示 F 检验统计量的值; `Pr(> F)` 表示检验的 p 值; `method` 表示因子; `Residuals` 表示残差. $p = 0.0334 > 0.05$, 说明拒绝原假设, 即认为四种工艺有显著区别.

诸参数的估计为

$$\begin{cases} \hat{\mu} = \bar{y}_{..} = 0.7265, \\ \hat{\tau}_1 = \bar{y}_{1\cdot} - \bar{y}_{..} = -0.0565, \\ \hat{\tau}_2 = \bar{y}_{2\cdot} - \bar{y}_{..} = -0.0585, \\ \hat{\tau}_3 = \bar{y}_{3\cdot} - \bar{y}_{..} = 0.0595, \\ \hat{\tau}_4 = \bar{y}_{4\cdot} - \bar{y}_{..} = 0.0555, \\ \widehat{\sigma^2} = M S_E = 0.00593. \end{cases}$$

2.1.2 双因子试验与交互效应

设双因子试验中, 试验因子 A 有 a 个水平 A_1, A_2, \dots, A_a , B 有 b 个水平 B_1, B_2, \dots, B_b . 与单因子试验相比, 双因子试验要复杂一些, 表现为:

- (1) 因子的种类. A 和 B 可能都是定量的, 也可能都是定性的, 或一个是定量的一个是定性的. 如果用回归模型来建模, 对不同的情形, 其处理方法是不同的, 第三章将会讨论这一问题.
- (2) 因子之间的关系. 因子 A 和 B 可能是平等的, 即 A 和 B 可以自由地选择各自的水平, 然后考虑所有的处理 $(A_i, B_j)(i = 1, \dots, a, j = 1, \dots, b)$ 来安排试验, 这种试验

称为**交叉设计**. 因子 A 和 B 也可能是不平等的, 例如因子 A 是前一个工序的因子, 而 B 是后一个工序的因子. 这一种试验的设计称为**套设计**. 鉴于篇幅, 我们仅考虑 A 与 B 平等时的交叉试验设计.

- (3) 因子之间有无交互效应. 在双因子试验中, 不仅仅需要考虑估计每个因子的主效应, 还要考虑因子之间的交互效应, 后者用 $A \times B$ 表示. 显然, 交互效应会增加双因子试验的难度.

考虑等重复的情形, 双因子试验的线性可加模型为

$$\begin{cases} y_{ijl} = \mu + \tau_i + \beta_j + (\tau\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijl}, & \varepsilon_{ijl} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2), \\ i = 1, \dots, a, \quad j = 1, \dots, b, \quad l = 1, \dots, m. \end{cases} \quad (2.9)$$

这里, y_{ijl} 是处理 (A_i, B_j) 的第 l 次试验的响应值, m 表示重复次数. ε_{ijl} 表示试验的随机误差. 试验总次数 $n = abm$.

定义 2.2. 定义 τ_i 为因子 A 的水平 A_i 的主效应 (*main effect*), 所有 τ_i 共同表示因子 A 的主效应; β_j 为因子 B 取水平 B_j 的主效应, 所有 β_j 共同表示因子 B 的主效应; $(\tau\beta)_{ij}$ 表示处理 (A_i, B_j) 的交互效应或交互作用 (*interact effect*), 所有 $(\tau\beta)_{ij}$ 共同表示因子 A 和因子 B 的交互效应.

若将 y_{ijl} 做如下分解:

$$y_{ijl} = \bar{y}_{...} + (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...}) + (\bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...}) + (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y}_{...}) + (y_{ikl} - \bar{y}_{ij.}),$$

将上式与模型(2.9)对比, 猜测应有如下估计

$$\begin{cases} \hat{\mu} = \bar{y}_{...}, \\ \hat{\tau}_i = \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...}, \\ \hat{\beta}_j = \bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...}, \\ \widehat{(\tau\beta)}_{ij} = \bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y}_{...}, \\ \hat{\varepsilon}_{ijl} = y_{ikl} - \bar{y}_{ij.}, \end{cases} \quad (2.10)$$

并且发现

$$\sum_{i=1}^a \hat{\tau}_i = 0, \quad \sum_{j=1}^b \hat{\beta}_j = 0,$$

$$\sum_{i=1}^a \widehat{(\tau\beta)}_{ij} = 0, \quad j = 1, \dots, b,$$

$$\sum_{j=1}^b \widehat{(\tau\beta)}_{ij} = 0, \quad i = 1, \dots, a.$$

这提示我们对模型(2.9)的主效应 τ_i 、 β_j 及交互效应 $(\tau\beta)_{ij}$ 提出如下约束条件

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^a \tau_i = 0, \quad \sum_{j=1}^b \beta_j = 0, \\ \sum_{i=1}^a (\tau\beta)_{ij} = 0, \quad j = 1, \dots, b, \\ \sum_{j=1}^b (\tau\beta)_{ij} = 0, \quad i = 1, \dots, a. \end{array} \right. \quad (2.11)$$

故双因子试验的固定效应模型为(2.9)式并加上限制条件(2.11)式.

交互效应是指因子间的联合搭配对指标的影响效应，在试验中可能大量存在。为了加深对交互效应的直观理解，先看一个简单的例子。

例 2.3. 设有两个二水平因子 A 和 B ，它们的两个水平分别为 A_1, A_2 和 B_1, B_2 。这时共有 4 个处理，每个组合试验一次，即 $m = 1$ ，其试验结果列于图 2.4 中。

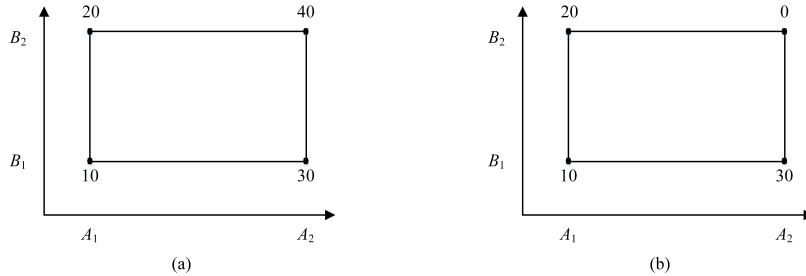


图 2.4: 两因子二水平试验结果

图 2.4(a) 中的试验结果为 $y_{11} = 10, y_{12} = 20, y_{21} = 30, y_{22} = 40$ 。平均响应值分别为：

$$\bar{y}_{1\cdot} = \frac{1}{2}(10 + 20) = 15, \quad \bar{y}_{2\cdot} = \frac{1}{2}(30 + 40) = 35.$$

$$\bar{y}_{\cdot 1} = \frac{1}{2}(10 + 30) = 20, \quad \bar{y}_{\cdot 2} = \frac{1}{2}(20 + 40) = 30.$$

$$\bar{y}_{\cdot \cdot} = \frac{1}{4}(10 + 20 + 30 + 40) = 25.$$

主效应的估计值分别为

$$\hat{\tau}_1 = \bar{y}_{1\cdot} - \bar{y}_{\cdot \cdot} = 15 - 25 = -10,$$

$$\hat{\tau}_2 = \bar{y}_{2\cdot} - \bar{y}_{\cdot \cdot} = 35 - 25 = +10,$$

$$\hat{\beta}_1 = \bar{y}_{\cdot 1} - \bar{y}_{\cdot \cdot} = 20 - 25 = -5,$$

$$\hat{\beta}_2 = \bar{y}_{\cdot 2} - \bar{y}_{\cdot \cdot} = 30 - 25 = +5,$$

交互效应的估计为

$$\widehat{(\tau\beta)}_{11} = \bar{y}_{11} - \bar{y}_{1\cdot} - \bar{y}_{\cdot 1} + \bar{y}_{\cdot\cdot} = 10 - 15 - 20 + 25 = 0,$$

类似地可以计算得到 $\widehat{(\tau\beta)}_{12} = \widehat{(\tau\beta)}_{21} = \widehat{(\tau\beta)}_{22} = 0$, 即因子 A 与 B 之间没有交互效应.

对于第二个试验, 由图 2.4(b), 试验结果为 $y_{11} = 10$, $y_{12} = 20$, $y_{21} = 30$, $y_{22} = 0$. 平均响应值分别为:

$$\bar{y}_{1\cdot} = \frac{1}{2}(10 + 20) = 15, \quad \bar{y}_{2\cdot} = \frac{1}{2}(30 + 0) = 15.$$

$$\bar{y}_{\cdot 1} = \frac{1}{2}(10 + 30) = 20, \quad \bar{y}_{\cdot 2} = \frac{1}{2}(20 + 0) = 10.$$

$$\bar{y}_{\cdot\cdot} = \frac{1}{4}(10 + 20 + 30 + 0) = 15.$$

主效应的估计值分别为

$$\hat{\tau}_1 = \bar{y}_{1\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot} = 15 - 15 = 0,$$

$$\hat{\tau}_2 = \bar{y}_{2\cdot} - \bar{y}_{\cdot\cdot} = 15 - 15 = 0,$$

$$\hat{\beta}_1 = \bar{y}_{\cdot 1} - \bar{y}_{\cdot\cdot} = 20 - 15 = 5,$$

$$\hat{\beta}_2 = \bar{y}_{\cdot 2} - \bar{y}_{\cdot\cdot} = 10 - 15 = -5,$$

交互效应的估计为

$$\widehat{(\tau\beta)}_{11} = \bar{y}_{11} - \bar{y}_{1\cdot} - \bar{y}_{\cdot 1} + \bar{y}_{\cdot\cdot} = 10 - 15 - 20 + 15 = -10,$$

$$\widehat{(\tau\beta)}_{12} = \bar{y}_{12} - \bar{y}_{1\cdot} - \bar{y}_{\cdot 2} + \bar{y}_{\cdot\cdot} = 20 - 15 - 10 + 15 = 10,$$

$$\widehat{(\tau\beta)}_{21} = \bar{y}_{21} - \bar{y}_{2\cdot} - \bar{y}_{\cdot 1} + \bar{y}_{\cdot\cdot} = 30 - 15 - 20 + 15 = 10,$$

$$\widehat{(\tau\beta)}_{22} = \bar{y}_{22} - \bar{y}_{2\cdot} - \bar{y}_{\cdot 2} + \bar{y}_{\cdot\cdot} = 0 - 15 - 10 + 15 = -10,$$

可见, 因子 A 与 B 之间有交互效应.

可以从另一个角度来看待因子之间的交互效应. 图 2.5 是利用代码

```

1 y1 <- c(10, 20, 30, 40)
2 y2 <- c(10, 20, 30, 0)
3 A <- factor(c("A1", "A1", "A2", "A2"))
4 B <- factor(c("B1", "B2", "B1", "B2"))
5 par(mfrow = c(1,2))
6 interaction.plot(A, B, y1, type = "b", col = c("red", "green"), pch = c(15, 17),
  xlab = "(a)")
7 interaction.plot(A, B, y2, type = "b", col = c("red", "green"), pch = c(15, 17),
  xlab = "(b)")
```

生成的. 其中, 函数 `par()` 是 R 中用来设置绘图参数的, 函数 `interaction.plot()` 用于绘制两因子交互效应图 (*two-way interaction plot*), 更多信息可以查询它们的帮助文档. 图 (a) 中, 当因子 B 取水平 B_1 时, A_1 变到 A_2 使 y 增加 $30 - 10 = 20$; 类似地, 当 $B = B_2$ 时, A_1 变到 A_2 使 y 也增加 $40 - 20 = 20$. 这就是说 A 对 y 的影响与 B 取什么水平无关. 类似地, 当 B 从 B_1 变到 B_2 时, y 增加 $20 - 10 = 10$ 或 $40 - 30 = 10$, 与 A 取的水平无关.

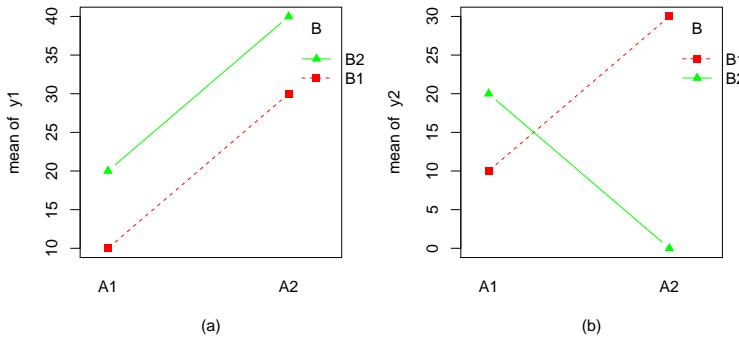


图 2.5: 交互效应示意图

这时称 A 和 B 之间没有交互效应. 判断 A 和 B 之间是否存在交互效应, 选用图 2.5 的作图方法更为直观. 当图中的两条线平行或接近平行时, 可认为 A 和 B 之间没有交互效应.

通过计算诸交互效应的估计和画图判断两因子之间是否有交互效应, 虽然直观, 但不够准确. 方差分析可用于检验两个因子的主效应和它们之间的交互效应是否对响应有显著影响. 其思路和单因子试验的方差分析一样, 将响应的总偏差平方和 SS_T 进行分解:

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{l=1}^m (y_{ijl} - \bar{y}_{...})^2 = SS_A + SS_B + SS_{A \times B} + SS_E, \quad (2.12)$$

其中

$$SS_A = mb \sum_{i=1}^a (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_{i=1}^a \frac{y_{i..}^2}{bm} - \frac{y_{...}^2}{abm}$$

表示因子 A 的偏差平方和,

$$SS_B = ma \sum_{j=1}^b (\bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_{j=1}^b \frac{y_{.j.}^2}{am} - \frac{y_{...}^2}{abm}$$

表示因子 B 的偏差平方和,

$$SS_{A \times B} = m \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y}_{...})^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \frac{y_{ij.}^2}{m} - \frac{y_{...}^2}{abm} - SS_A - SS_B$$

表示交互效应 $A \times B$ 的偏差平方和,

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

表示误差平方和. 由正态随机向量的二次型理论可知, SS_E 服从自由度为 $ab(m-1)$ 的 χ^2 分布. 当检验问题

$$H_0^A : \tau_1 = \cdots = \tau_a = 0, \quad H_1^A : \text{至少有一个 } \tau_i \neq 0$$

的原假设成立时, SS_A 服从自由度为 $a - 1$ 的 χ^2 分布, 自由度恰为诸 τ_i 中独立参数的个数; 当检验问题

$$H_0^B : \beta_1 = \cdots = \beta_b = 0, \quad H_1^B : \text{至少有一个 } \beta_j \neq 0$$

的原假设成立时, SS_B 服从自由度为 $b - 1$ 的 χ^2 分布, 自由度恰为诸 β_j 中独立参数的个数; 当检验问题

$$H_0^{A \times B} : (\tau\beta)_{ij} = 0, i = 1, \dots, a, j = 1, \dots, b, \quad H_1^{A \times B} : \text{至少有一个 } (\tau\beta)_{ij} \neq 0$$

的原假设成立时, $SS_{A \times B}$ 服从自由度为 $(a - 1)(b - 1)$ 的 χ^2 分布, 自由度恰为诸 $(\tau\beta)_{ij}$ 中独立参数的个数. 从而上述平方和的均方为

$$\begin{cases} MS_A = SS_A/(a - 1), \\ MS_B = SS_B/(b - 1), \\ MS_{A \times B} = SS_{A \times B}/[(a - 1)(b - 1)], \\ MS_E = SS_E/[ab(m - 1)]. \end{cases}$$

双因子试验的方差分析表列于表2.4.

表 2.4: 双因子试验方差分析表

方差来源	自由度	平方和	均方	F 值
A	$a - 1$	SS_A	MS_A	MS_A/MS_E
B	$b - 1$	SS_B	MS_B	MS_B/MS_E
$A \times B$	$(a - 1)(b - 1)$	$SS_{A \times B}$	$MS_{A \times B}$	$MS_{A \times B}/MS_E$
误差	$ab(m - 1)$	SS_E	MS_E	
总和	$n - 1$	SS_T		

例 2.4. 考察某种电池的最大输出电压受极板材料与使用时环境温度的影响. 因子 A 为材料类型, 取 3 个水平; 因子 B 为环境温度, 也取 3 个水平; 每个处理重复 4 次试验, 试验数据归纳在表2.5中, 其中括号内的数据是 $y_{ij..}$.

本例中, $a = 3$, $b = 3$, $m = 4$, $n = abm = 36$. 诸平方和计算如下:

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^m y_{ijk}^2 - \frac{y_{...}^2}{n} = 81063.64.$$

$$SS_A = \sum_{i=1}^a \frac{y_{i..}^2}{bm} - \frac{y_{...}^2}{abm} = 6767.06,$$

$$SS_B = \sum_{j=1}^b \frac{y_{.j..}^2}{am} - \frac{y_{...}^2}{abm} = 47535.39,$$

表 2.5: 电池最大输出电压试验数据

		因子 B						$y_{i..}$	
		15°C		25°C		35°C			
因子 A	1	130	155	34	40	20	70		
		174	180	80	75	82	58		
		(639)		(229)		(230)			
	2	150	188	136	122	25	70	1300	
	3	159	126	106	115	58	45	1501	
		138	110	174	120	96	104		
		168	160	150	139	82	60		
		(576)		(583)		(342)			
$y_{.j.}$		1838		1291		770		$y... = 3899$	

$$SS_{A \times B} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \frac{y_{ij.}^2}{m} - \frac{y_{...}^2}{abm} - SS_A - SS_B = 13180.44,$$

$$SS_E = SS_T - SS_A - SS_B - SS_{A \times B} = 13580.75.$$

方差分析表见表 2.6. 由于 $F_{0.95}(2, 27) = 3.35$, $F_{0.95}(4, 27) = 2.73$, 所以因子 A、因子 B 和交互效应 $A \times B$ 当 $\alpha = 0.05$ 时都是显著的.

表 2.6: 电池最大输出电压试验数据方差分析表

来源	平方和	自由度	均方和	F 值
A	6767.06	2	3383.53	6.73
B	4753509	2	23767.70	47.25
$A \times B$	13180.44	4	3295.11	6.55
误差	13580.75	27	520.99	
总和	81063.64	35		

也可以利用 R 对本例进行方差分析, 代码如下:

```

1 x <- c(130, 155, 174, 180, 150, 188, 159, 126, 138, 110, 168, 160, 34, 40, 80, 75,
      136, 122, 106, 115, 174, 120, 150, 139, 20, 70, 82, 58, 25, 70, 58, 45, 96,
      104, 82, 60);
2 A <- factor(c(rep(1:3, each = 4), rep(1:3, each=4), rep(1:3, each=4)));
3 B <- factor(rep(1:3, each = 12));
4 aov_Data <- data.frame(A, B, x);
5 aov_Result <- aov(x ~ A * B, data = aov_Data);
6 # aov_Result <- aov(x ~ A + B + A:B, data = aov_Data);

```

其中第 6 行代码被注释掉了，它的意义和第 5 行一样，这两行代码说明 `aov()` 函数的参数可以有不同的形式。其输出结果为：

```

1 summary(aov_Results)
2 #>          Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
3 #> A           2   6767   3384  6.727 0.004261 ***
4 #> B           2  47535  23768 47.253 1.52e-09 ***
5 #> A:B         4  13180   3295  6.551 0.000807 ***
6 #> Residuals  27 13581    503
7 #> ---
8 #> Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

```

从中可看出，当 $\alpha = 0.01$ 时，因子 A、因子 B 和交互效应 $A \times B$ 都是显著的。

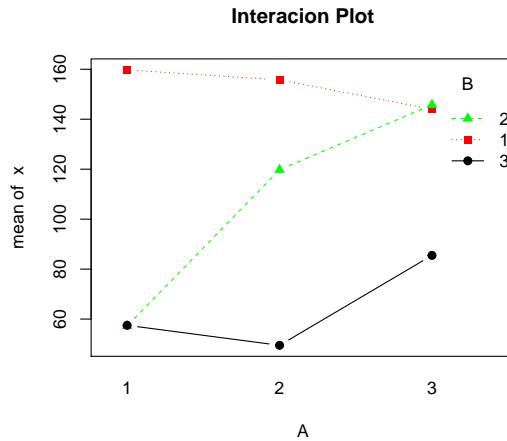


图 2.6: 极板材料与环境温度交互效应 (一)

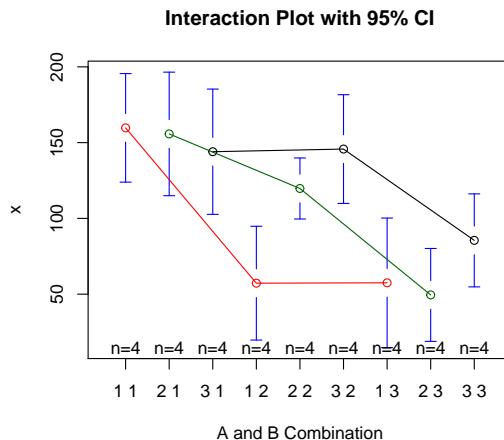


图 2.7: 极板材料与环境温度交互效应 (二)

R 提供多种方式展示两因子之间的交互效应。代码

```

1 interaction.plot(A, B, x, type = "b", col = c("red", "green", "black"), pch = c
(15, 17, 19), main = "Interaction Plot")

```

展示的结果如图 2.6 所示. 代码

```
1 library(gplots);
2 plotmeans(x~interaction(A, B, sep = " "), connect = list(c(1, 4, 7), c(2, 5, 8), c
  (3, 6, 9)), col = c("red", "darkgreen", "black"), main = "Interaction Plot
  with 95% CI", xlab = "A and B Combination")
```

展示的结果如图 2.7 所示. 代码

```
1 library(HH);
2 interaction2wt(x ~ A*B);
```

展示的结果如图 2.8 所示.

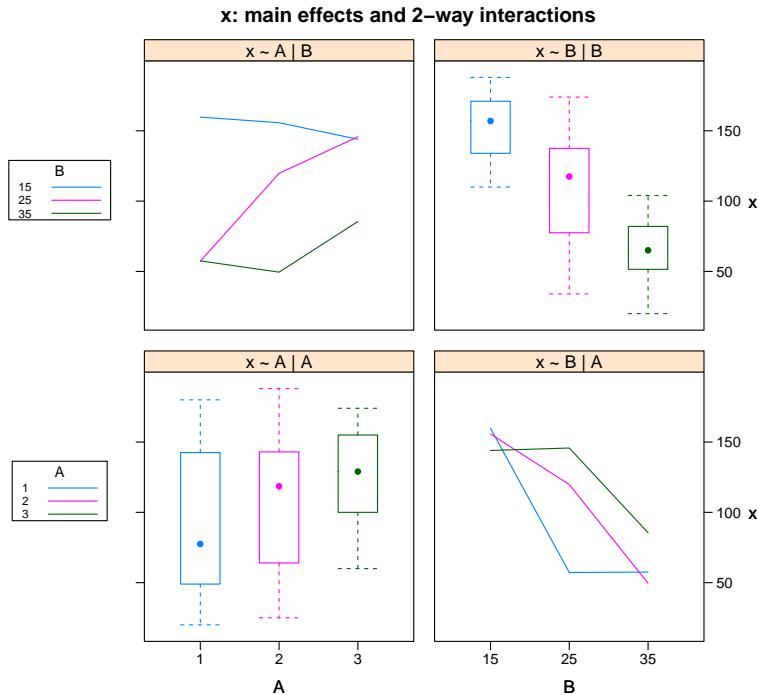


图 2.8: 极板材料与环境温度交互效应 (三)

如果把双因子试验看做单因子试验, 即把每一个处理都当作某个因子 C 的一个水平, 则 C 一共有 ab 个水平, 自由度为 $ab - 1$, 恰为 A 、 B 和 $A \times B$ 的自由度的和. 可以验证, 平方和之间也存在如下关系:

$$SS_C = SS_A + SS_B + SS_{A \times B}.$$

区别在于:

- (1) 如果视作单因子试验, 方差分析时将所有效应一起检验, 而双因子方差分析则将两个主效应和一个交互效应分开检验, 因而结论要相对精确一些;

- (2) 视作单因子试验, 参数为 $\tau_i (i = 1, 2, \dots, ab)$ 分别为 ab 个处理的效应, 而双因子试验固定效应模型中的参数包括因子主效应和二因子交互效应, 诸参数的物理意义更明确一些.

事实上, 在对响应函数建模时, **参数化** (parametrize) 是一种十分重要的思想. 它把测量各种处理下响应的值转化为测量响应模型中参数的值. 在建模时, 我们应尽量使模型中的参数的物理意义明确, 且参数的个数尽量少.

2.1.3 三因子试验的方差分析

设有三个试验因子 A, B, C , 分别有 a, b, c 三个水平: $A_1, A_2, \dots, A_a, B_1, B_2, \dots, B_b$ 以及 C_1, C_2, \dots, C_c , 共有 abc 个处理. 如果在每一个处理下重复 m 次试验, 则共需进行 $abcm$ 次试验.

以 y_{ijkl} 表示处理 (A_i, B_j, C_k) 处的第 l 次试验, 与双因子试验固定效应模型类似, 三因子试验固定效应模型为

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{ijkl} = \mu + \tau_i + \beta_j + \gamma_k + (\tau\beta)_{ij} + (\tau\gamma)_{ik} + (\beta\gamma)_{jk} + (\tau\beta\gamma)_{ijk} + \varepsilon_{ijkl}; \\ \varepsilon_{ijkl} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2), \quad i = 1, \dots, a, \quad j = 1, \dots, b, \quad k = 1, \dots, c, \quad l = 1, \dots, m; \\ \sum_{i=1}^a \tau_i = 0, \quad \sum_{j=1}^b \beta_j = 0, \quad \sum_{k=1}^c \gamma_k = 0; \\ \sum_{i=1}^a (\tau\beta)_{ij} = 0, \quad j = 1, \dots, b, \quad \sum_{j=1}^b (\tau\beta)_{ij} = 0, \quad i = 1, \dots, a; \\ \sum_{i=1}^a (\tau\gamma)_{ik} = 0, \quad k = 1, \dots, c, \quad \sum_{k=1}^c (\tau\gamma)_{ik} = 0, \quad i = 1, \dots, a; \\ \sum_{j=1}^b (\beta\gamma)_{jk} = 0, \quad k = 1, \dots, c, \quad \sum_{k=1}^c (\beta\gamma)_{jk} = 0, \quad j = 1, \dots, b; \\ \sum_{i=1}^a (\tau\beta\gamma)_{ijk} = 0, \quad j = 1, \dots, b, \quad k = 1, \dots, c; \\ \sum_{j=1}^b (\tau\beta\gamma)_{ijk} = 0, \quad i = 1, \dots, a, \quad k = 1, \dots, c; \\ \sum_{k=1}^c (\tau\beta\gamma)_{ijk} = 0, \quad i = 1, \dots, a, \quad j = 1, \dots, b. \end{array} \right. \quad (2.13)$$

其中, $(\tau\beta\gamma)_{ijk}$ 是处理 (A_i, B_j, C_k) 的交互效应, 它们的全体称为**三因子交互效应**, 记作 $A \times B \times C$. 注意, 三因子交互效应 $A \times B \times C$ 的 $bc + ac + ab$ 个等式约束中, 独立的只有 $bc + ac + ab - a - b - c + 1$ 个, 使得 $(\tau\beta\gamma)_{ijk}$ 中独立的参数为 $(a-1)(b-1)(c-1)$ 个.

三因子试验的方差分析就是要检验三个主效应、三个二因子交互效应和一个三因子交

互效应是否存在, 即如下七个假设:

$$\left\{ \begin{array}{l} H_0^A : \tau_1 = \tau_2 = \cdots = \tau_a = 0; \\ H_0^B : \beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_b = 0; \\ H_0^C : \gamma_1 = \gamma_2 = \cdots = \gamma_c = 0; \\ H_0^{A \times B} : (\tau\beta)_{ij} = 0, \quad i = 1, \dots, a, \quad j = 1, \dots, b; \\ H_0^{A \times C} : (\tau\gamma)_{ik} = 0, \quad i = 1, \dots, a, \quad k = 1, \dots, c; \\ H_0^{B \times C} : (\beta\gamma)_{jk} = 0, \quad j = 1, \dots, b, \quad k = 1, \dots, c; \\ H_0^{A \times B \times C} : (\tau\beta\gamma)_{ijk} = 0, \quad i = 1, \dots, a, \quad j = 1, \dots, b, \quad k = 1, \dots, c. \end{array} \right. \quad (2.14)$$

利用初等代数计算, 可以证明总偏差平方和

$$SS_T := \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^c \sum_{l=1}^m (y_{ijkl} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^c \sum_{l=1}^m y_{ijkl}^2 - \frac{y_{...}^2}{abcm}$$

有如下分解公式

$$SS_T = SS_A + SS_B + SS_C + SS_{A \times B} + SS_{A \times C} + SS_{B \times C} + SS_{A \times B \times C} + SS_E, \quad (2.15)$$

其中

$$\begin{aligned} SS_A &= bcm \sum_{i=1}^a (\bar{y}_{i...} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_{i=1}^a \frac{y_{i...}^2}{bcm} - \frac{y_{...}^2}{abcm}, \\ SS_B &= acm \sum_{j=1}^b (\bar{y}_{.j..} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_{j=1}^b \frac{y_{.j..}^2}{acm} - \frac{y_{...}^2}{abcm}, \\ SS_C &= abm \sum_{k=1}^c (\bar{y}_{..k.} - \bar{y}_{...})^2 = \sum_{k=1}^c \frac{y_{..k.}^2}{abm} - \frac{y_{...}^2}{abcm} \end{aligned}$$

分别表示因子 A , B 和 C 的偏差平方和,

$$\begin{aligned} SS_{A \times B} &= \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \frac{y_{ij..}^2}{cm} - \frac{y_{...}^2}{abcm} - SS_A - SS_B, \\ SS_{A \times C} &= \sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^c \frac{y_{i..k.}^2}{bm} - \frac{y_{...}^2}{abcm} - SS_A - SS_C, \\ SS_{B \times C} &= \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^c \frac{y_{.jk.}^2}{am} - \frac{y_{...}^2}{abcm} - SS_B - SS_C \end{aligned}$$

分别表示二因子交互效应 $A \times B$, $A \times C$ 和 $B \times C$ 的偏差平方和,

$$SS_{A \times B \times C} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^c \frac{y_{ijk.}^2}{m} - \frac{y_{...}^2}{abcm} - SS_A - SS_B - SS_C - SS_{A \times B} - SS_{A \times C} - SS_{B \times C}$$

表示三因子交互效应 $A \times B \times C$ 的偏差平方和,

$$SS_E = SS_T - SS_A - SS_B - SS_C - SS_{A \times B} - SS_{A \times C} - SS_{B \times C} - SS_{A \times B \times C}$$

为误差的偏差平方和. 利用正态随机向量的二次型理论, 可知 $SS_E \sim \chi^2(abc(m-1))$, 且

- 当 H_0^A 成立时, $SS_A \sim \chi^2(a-1)$;
- 当 H_0^B 成立时, $SS_B \sim \chi^2(b-1)$;
- 当 H_0^C 成立时, $SS_C \sim \chi^2(c-1)$;
- 当 $H_0^{A \times B}$ 成立时, $SS_{A \times B} \sim \chi^2((a-1)(b-1))$;
- 当 $H_0^{A \times C}$ 成立时, $SS_{A \times C} \sim \chi^2((a-1)(c-1))$;
- 当 $H_0^{B \times C}$ 成立时, $SS_{B \times C} \sim \chi^2((b-1)(c-1))$;
- 当 $H_0^{A \times B \times C}$ 成立时, $SS_{A \times B \times C} \sim \chi^2((a-1)(b-1)(c-1))$.

因而可以构造 F 分布统计量:

$$\left\{ \begin{array}{l} F_A = \frac{abc(m-1)SS_A}{(a-1)SS_E} \\ F_B = \frac{abc(m-1)SS_B}{(b-1)SS_E} \\ F_C = \frac{abc(m-1)SS_C}{(c-1)SS_E} \\ F_{A \times B} = \frac{abc(m-1)SS_{A \times B}}{(a-1)(b-1)SS_E} \\ F_{A \times C} = \frac{abc(m-1)SS_{A \times C}}{(a-1)(c-1)SS_E} \\ F_{B \times C} = \frac{abc(m-1)SS_{B \times C}}{(b-1)(c-1)SS_E} \\ F_{A \times B \times C} = \frac{abc(m-1)SS_{A \times B \times C}}{(a-1)(b-1)(c-1)SS_E} \end{array} \right. \quad (2.16)$$

来检验(2.14)式中的七个检验问题.

例 2.5. 假定影响某次行动的损益仅有 3 个因子: 行动时间 (A)、战术 (B)、投入装备 (C). 有 3 个行动时间、3 种战术和 3 种投入装备可供选择, 进行 2 次重复的 3^3 因子试验, 行动损益数据见表 2.7. 试分析各因子对行动损益的影响.

这里 $a = b = c = 3$, $m = 2$, 诸平方和计算如下:

$$SS_A = \sum_{i=1}^a \frac{y_{i...}^2}{bcm} - \frac{y_{...}^2}{abcm} = 886.37,$$

$$SS_B = \sum_{i=1}^a \frac{y_{.j..}^2}{acm} - \frac{y_{...}^2}{abcm} = 60848.48,$$

表 2.7: 某次行动损益数据表

投入装备 (C)	行动时间 (A)									$y_{..k}$	
	A ₁			A ₂			A ₃				
	战术 (B)										
	B ₁	B ₂	B ₃	B ₁	B ₂	B ₃	B ₁	B ₂	B ₃		
C_1	-35	-45	-40	17	-65	20	-39	-55	15	-459	
	-25	-60	15	24	-58	4	-35	-67	-30		
C_2	100	30	80	55	-55	110	90	-28	110	953	
	75	-40	54	120	-44	44	113	-26	135		
C_3	4	-30	31	-23	-64	-20	-30	-61	54	-339	
	5	-155	36	-5	-62	-31	-55	-62	4		
$y_{ij..}$	124	-155	176	188	-348	127	44	-289	288		
$y_{i...}$	145			-33			43			$y_{....} = 155$	

$$SS_C = \sum_{i=1}^a \frac{y_{..k..}^2}{abm} - \frac{y_{....}^2}{abcm} = 68100.15,$$

$$SS_{A \times B} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \frac{y_{ij..}^2}{cm} - \frac{y_{....}^2}{abcm} - SS_A - SS_B = 6397.41,$$

$$SS_{A \times C} = \sum_{i=1}^a \sum_{k=1}^c \frac{y_{i..k..}^2}{bm} - \frac{y_{....}^2}{abcm} - SS_A - SS_C = 7572.41,$$

$$SS_{B \times C} = \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^c \frac{y_{..jk..}^2}{am} - \frac{y_{....}^2}{abcm} - SS_B - SS_C = 12390.63,$$

$$SS_{A \times B \times C} = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^c \frac{y_{ijk..}^2}{m} - \frac{y_{....}^2}{abcm} - SS_A - SS_B - SS_C - SS_{A \times B} - SS_{A \times C} - SS_{B \times C} = 4669.14,$$

$$SS_T = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \sum_{k=1}^c \sum_{l=1}^2 y_{ijkl}^2 - \frac{y_{....}^2}{abcm} = 172062.09,$$

$$SS_E = SS_T - SS_A - SS_B - SS_C - SS_{A \times B} - SS_{A \times C} - SS_{B \times C} - SS_{A \times B \times C} = 11215.50.$$

方差分析表列出如下. 查表或利用 R 函数 `qf()` 可知 $F_{0.95}(4, 27) = 2.73$, $F_{0.99}(4, 27) = 4.11$, $F_{0.99}(2, 27) = 5.49$. 由于 $F_B = 73.24 > 5.49$, $F_C = 81.97 > 5.49$, 所以因子 B 、 C 在 0.01 的显著水平下是显著的; $F_{A \times B} = 3.84 > 2.73$, 说明交互效应 $A \times B$ 在 0.05 的显著水平下是显著的; $F_{B \times C} = 7.46 > 4.11$, $F_{A \times C} = 4.56 > 4.11$, 说明交互效应 $A \times C$ 、 $B \times C$ 在 0.01 的显著水平下影响是明显的; 因子 A 和交互效应 $A \times B \times C$ 对损益无显著影响. 本例也可以用 R 函数 `aov()` 来作方差分析, 留作习题.

表 2.8: 某次行动损益方差分析表

方差来源	平方和	自由度	均方	F
A	886.37	2	443.19	1.07
B	60848.48	2	30424.24	73.24
C	68100.15	2	34050.08	81.97
$A \times B$	6379.41	4	1594.85	3.84
$A \times C$	7572.41	4	1893.10	4.56
$B \times C$	12390.63	4	3097.66	7.46
$A \times B \times C$	4669.14	8	583.64	1.42
误差	11215.50	27	415.39	
总和	172062.09	53		

2.1.4 多重比较与对照

方差分析时, 如果拒绝原假设, 表明因子的诸水平对响应有显著影响. 我们需要知道不同水平下响应是否有显著不同. 进一步会问, 不同处理下的响应有无显著的差别?

为方便起见, 考虑比较试验模型, 即将多因子试验看做单因子试验, 每个处理就是一个水平. 设一共有 N 个处理, 每个处理重复 m_i 次, 试验总次数为

$$n = \sum_{i=1}^N m_i.$$

试验数据如下:

处理	观察值			
x_1	y_{11}	y_{12}	\cdots	y_{1m_1}
x_2	y_{21}	y_{22}	\cdots	y_{2m_2}
\vdots	\vdots	\vdots	\ddots	\vdots
x_N	y_{N1}	y_{N2}	\cdots	y_{Nm_N}

注意, 将多因子试验看作单因子试验, 实质上是对效应做了可逆的线性变换, 不会改变模型的自由度. 这可从两个角度来看:

- 一是从诸偏差平方和的自由度来看. 以二因子试验为例, 两个因子偏差平方和的自由度分别为 $a - 1$ 和 $b - 1$, 交互效应的偏差平方和的自由度为 $(a - 1)(b - 1)$, 总计 $ab - 1$ 恰为处理的偏差平方和的自由度, 这在2.1.2节中已经讨论过了.
- 二是从独立参数的个数来看. 仍以二因子试验为例, 两个因子主效应独立参数的个数分别为 $a - 1$ 和 $b - 1$, 二因子交互效应中独立参数的个数为 $ab - a - b + 1$, 其和 $ab - 1$ 恰为处理效应独立参数的个数.

需要指出的是, 固定效应模型中诸效应满足的约束并不全是独立的, 例如二因子交互效应的 $a + b$ 个约束中, 只有 $a + b - 1$ 个是独立的.

为了检验试验的第 i 个处理和第 j 个处理的主效应是否有显著的差别, 注意到

$$\bar{y}_{i \cdot} - \bar{y}_{j \cdot} \sim N\left(\mu_i - \mu_j, \frac{\sigma^2}{m_i} + \frac{\sigma^2}{m_j}\right), \quad \frac{MS_E}{n - N} \sim \chi^2(n - N),$$

根据 t 分布的定义, 当原假设 $H_0^{ij} : \mu_i = \mu_j$ 成立时

$$t_{ij} = \frac{\bar{y}_{j \cdot} - \bar{y}_{i \cdot}}{\sqrt{MS_E(1/m_i + 1/m_j)}} \sim t(n - N), \quad (2.17)$$

这里 m_i 表示第 i 个处理的重复次数, m_j 表示第 j 个处理的重复次数. 给定检验水平 α , 第 i 个处理和第 j 个处理的主效应有显著区别, 如果 $|t_{ij}| > t_{1-\alpha/2}(n - N)$, 这里 $t_{1-\alpha/2}(n - N)$ 表示自由度为 $n - N$ 的 t 分布的上 $\alpha/2$ 分位点.

尽管 t 检验可以对比任意两个处理之间的效应是否有显著差异, 但前面已经指出, 当原假设为:

$$H_0 : \mu_i = \mu_j, \quad 1 \leq i < j \leq N$$

时, 这种逐个检验的方法犯第 I 类错误的概率随着检验个数的增加而增加. 一种直观的方法是, 通过降低单个检验的水平使整体上达到 α 的检验水平: 当

$$|t_{ij}| > t_{1-\alpha/(2m)}(n - N) \quad (2.18)$$

时, 称第 i 个处理和第 j 个处理的效应有显著差别, 其中 $m = C_N^2$ 为多重检验的个数. 记由(2.18)式确定的拒绝域为 A_{ij} , 则

$$P(A_{ij} | \mu_i = \mu_j) = \frac{\alpha}{m},$$

由于

$$P\left(\bigcup_{i < j} A_{ij} | H_0\right) < \sum_{i < j} P(A_{ij} | \mu_i = \mu_j) = \sum_{i < j} \frac{\alpha}{m} = \alpha.$$

因此, 这种方法可以把多重检验的显著性水平控制在 α 以下. 称上述不等式为 Bonferroni 不等式, 称这种检验方法为多重检验的 **Bonferroni 法**.

当 N 较大时, 多重检验属于大规模统计推断问题, 是近年来统计学中研究的热点问题之一, 其应用十分广泛, 感兴趣的读者可参考综述 (T. Tony Cai & Wenguang Sun, 2019).

定义 2.3. 设 c_1, c_2, \dots, c_N 为 N 个不全为零的常数, 满足 $c_1 + \dots + c_N = 0$, μ_i 为响应 y 在第 i 个处理 x_i 下的均值. 称线性组合

$$c = \sum_{i=1}^N c_i \mu_i$$

为一个对照或对比 (*contrast*).

例如,

$$\mu_i - \mu_j, \quad 2\mu_i - \mu_j - \mu_k, \quad \frac{1}{2}(\mu_k - \mu_i + \mu_l - \mu_j)$$

都是对照. 类似于单因子试验, 令 $\tau_i = \mu_i - \mu$, 对照又可以写作 $\sum_{i=1}^N c_i \tau_i$. 由于对照与满足约束条件 $c_1 + c_2 + \cdots + c_N = 0$ 的向量 $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_N)$ 一一对应, 因而一切对照构成 $N-1$ 维线性空间.

检验响应在不同处理下的均值有无显著的差别, 可统一为如下统计检验:

$$H_0 : \sum_{i=1}^N c_i \mu_i = 0, \quad H_1 : \sum_{i=1}^N c_i \mu_i \neq 0. \quad (2.19)$$

因

$$\bar{y}_{i \cdot} = \frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{m_i} y_{ij} \sim N\left(\mu_i, \frac{\sigma^2}{m_i}\right)$$

是 μ_i 的无偏估计, 所以

$$\sum_{i=1}^N c_i \bar{y}_{i \cdot} \sim N\left(\sum_{i=1}^N c_i \mu_i, \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i} \sigma^2\right)$$

是对照 $\sum_{i=1}^N c_i \mu_i$ 的无偏估计, 因此有时也称 $\sum_{i=1}^N c_i \bar{y}_{i \cdot}$ 为对照. 定义对照的平方和为

$$SS_c := \frac{\left(\sum_{i=1}^N c_i \bar{y}_{i \cdot}\right)^2}{\sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i}}. \quad (2.20)$$

根据 t 分布和 F 分布的定义, 可以得到检验假设(2.19)的统计量.

定理 2.4. 令 $f_E = n - N$ 为误差平方和的自由度, 当原假设 $H_0 : \sum_{i=1}^N c_i \mu_i = 0$ 成立时,

$$(1) \quad \sum_{i=1}^N c_i \bar{y}_{i \cdot} \sim N\left(0, \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i} \sigma^2\right), \quad \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N c_i \bar{y}_{i \cdot}}{MS_E \sum_{i=1}^N \frac{c_i^2}{m_i}}} \sim t(f_E);$$

$$(2) \quad \frac{SS_c}{\sigma^2} \sim \chi^2(1), \quad \frac{SS_c}{MS_E} \sim F(1, f_E).$$

Proof. (1) 可直接有 t 分布的定义得到. (2) 的思路是构造矩阵 \mathbf{B} , 使得对照可表示为 \mathbf{y} 的一次型 \mathbf{By} . 然后利用引理1.5, 证明 $\mathbf{BP}_2 = \mathbf{0}$ 即可, 其中 \mathbf{P}_2 的定义在定理2.1的证明中. 详细证明作为练习. \square

为了简单起见, 以下我们仅考虑每个处理处重复次数均相等的情形, 即 $m_i \equiv m$. 此时, 对照的平方和简化为

$$SS_c = \frac{\left(\sum_{i=1}^N c_i \bar{y}_{i \cdot}\right)^2}{m \sum_{i=1}^N c_i^2}. \quad (2.21)$$

等重复情形中, 称两个对照互相正交, 如果它们对应的向量互相正交.

由2.1.1节的知识可知, 总平方和 SST 可分解为处理平方和 SS_A 和误差平方和 SS_E . 处理平方和的自由度为 $N - 1$, 一个对照平方和自由度为 1, 一共由 $N - 1$ 个互相正交的对照, 那么处理平方和是否可分解为 $N - 1$ 个互相正交的对照的平方和呢?

定理 2.5. 果每个处理重复试验次数相等, 则处理的平方和可分解为任意 $N - 1$ 个互相正交的对照的平方和.

Proof. 设

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1 = c_{11}\mu_1 + c_{12}\mu_2 + \cdots + c_{1N}\mu_N \\ c_2 = c_{21}\mu_1 + c_{22}\mu_2 + \cdots + c_{2N}\mu_N \\ \cdots \\ c_{N-1} = c_{(N-1)1}\mu_1 + c_{(N-1)2}\mu_2 + \cdots + c_{(N-1)N}\mu_N \end{array} \right.$$

为 $N - 1$ 个互相正交的对照. 将这 $N - 1$ 个对照的估计排列如下

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{c}_1 = c_{11}\bar{y}_{1\cdot} + c_{12}\bar{y}_{2\cdot} + \cdots + c_{1N}\bar{y}_{N\cdot} \\ \hat{c}_2 = c_{21}\bar{y}_{1\cdot} + c_{22}\bar{y}_{2\cdot} + \cdots + c_{2N}\bar{y}_{N\cdot} \\ \cdots \\ \hat{c}_{N-1} = c_{(N-1)1}\bar{y}_{1\cdot} + c_{(N-1)2}\bar{y}_{2\cdot} + \cdots + c_{(N-1)N}\bar{y}_{N\cdot} \end{array} \right.$$

令 $c_{N1} = c_{N2} = \cdots = c_{NN} = \frac{1}{\sqrt{N}}$, $\hat{c}_N = c_{N1}\bar{y}_{1\cdot} + c_{N2}\bar{y}_{2\cdot} + \cdots + c_{NN}\bar{y}_{N\cdot}$, 则 \hat{c}_N 不是对照, 但它与其余对照均正交. 将上述各式右边系数向量归一化, 并写成矩阵形式, 得到

$$\begin{bmatrix} \frac{\hat{c}_1}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \frac{c_{1i}^2}{m_i}}} \\ \frac{\hat{c}_2}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \frac{c_{2i}^2}{m_i}}} \\ \vdots \\ \frac{\hat{c}_N}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \frac{c_{Ni}^2}{m_i}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{c_{11}}{\sqrt{m_1}} & \frac{c_{12}}{\sqrt{m_2}} & \cdots & \frac{c_{1N}}{\sqrt{m_N}} \\ \frac{c_{21}}{\sqrt{m_1}} & \frac{c_{22}}{\sqrt{m_2}} & \cdots & \frac{c_{2N}}{\sqrt{m_N}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{c_{N1}}{\sqrt{m_1}} & \frac{c_{N2}}{\sqrt{m_2}} & \cdots & \frac{c_{NN}}{\sqrt{m_N}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{y_{1\cdot}}{\sqrt{m_1}} \\ \frac{y_{2\cdot}}{\sqrt{m_2}} \\ \vdots \\ \frac{y_{N\cdot}}{\sqrt{m_N}} \end{bmatrix}$$

由于诸 m_i 均相等, 因而根据对照互相正交的概念, 上述系数矩阵为正交矩阵, 于是左右两侧向量的长度相等. 即

$$\sum_{j=1}^{N-1} \frac{\hat{c}_j^2}{\sum_{i=1}^N \frac{c_{ji}^2}{m_i}} + \frac{\hat{c}_N^2}{\sum_{i=1}^N \frac{c_{Ni}^2}{m_i}} = \sum_{i=1}^N \frac{y_{i\cdot}^2}{m_i}$$

将左侧第二项移到右侧, 得到

$$\sum_{j=1}^{N-1} SS_{c_j} = SS_A$$

定理得证. □

从以上证明过程可以看出, 要想使定理2.5对不等重复情形仍成立, 需将对照之间的正交关系修改为: 称对照 $c_1 = \sum_{i=1}^N c_{1i}\mu_i$ 和对照 $c_2 = \sum_{i=1}^N c_{2i}\mu_i$ 互相正交, 如果

$$\sum_{i=1}^N \frac{c_{1i}c_{2i}}{m_i} = 0,$$

其中, m_i 表示第 i 个处理的重复次数.

例 2.6 (例2.2续). 回到例2.2, 从数据中感觉到, A 与 B 两种工艺之间没有差异, C 与 D 两种工艺之间也没有差异; 而如果将 A 、 B 看做一组, 将 C 、 D 看做一组, 则这两组之间则应该存在差异. 为此, 我们构造三个互相正交的对照

$$c_1 = \tau_1 - \tau_2, \quad c_2 = \tau_3 - \tau_4, \quad c_3 = \tau_1 + \tau_2 - \tau_3 - \tau_4,$$

来检验这四组工艺之间是否存在差异.

根据对照平方和的计算式(2.21):

$$SS_{c_1} = \frac{(3.35 - 3.34)^2}{5 \times (1+1)} = 0.00001,$$

$$SS_{c_2} = \frac{(3.93 - 3.91)^2}{5 \times (1+1)} = 0.00004,$$

$$SS_{c_3} = \frac{(3.35 + 3.34 - 3.93 - 3.91)^2}{5 \times (1+1+1+1)} = 0.06613.$$

可以验证, $SS_{c_1} + SS_{c_2} + SS_{c_3} = 0.06618$ 恰为因子 A 的平方和. 利用例2.2的计算结果, $MS_E = 0.00593$, 于是诸对照的 F 统计量为

$$F_{c_1} = \frac{SS_{c_1}}{MS_E} = \frac{0.00001}{0.00593} = 0.00169 < F_{0.95}(1, 16) = 4.494,$$

$$F_{c_2} = \frac{SS_{c_2}}{MS_E} = \frac{0.00004}{0.00593} = 0.00675 < F_{0.95}(1, 16) = 4.494,$$

$$F_{c_3} = \frac{SS_{c_3}}{MS_E} = \frac{0.06613}{0.00593} = 11.152 > F_{0.95}(1, 16) = 4.494,$$

可见在显著性水平 0.05 下, 只有第三个对照是显著的. 即确实 A 、 B 可以作为一组, C 、 D 可以作为一组, 这两组之间有显著的差异.

2.2 2^k 因子设计及其部分实施

如果一个试验包含 k 个二水平因子, 则其处理一共有 2^k 个, 称这类因子设计为 2^k 因子设计. 2^k 因子设计的试验次数可以控制在相对较少的范围内, 这在实践中是一个很重要的优势. 它的缺陷是对连续变化的定量因子考察不够, 不能通过发掘因子与响应之间的非线性关系. 主要应用于以下情况:

- 定性考察因子对响应的影响;
- 筛选大量试验因子中有实质影响的因子的初级研究阶段.

本节介绍 2^k 因子设计及其部分实施, 同时引出正交表、混杂、分辨度等基本概念.

2.2.1 2^2 设计与正交表 $L_4(2^3)$

记 2^2 因子设计的两个二水平因子为 A 和 B , 以符号“0”和“1”表示两个水平, 一共有 4 个处理: $(0, 0)$ 、 $(1, 0)$ 、 $(0, 1)$ 以及 $(1, 1)$, 分别以符号 (1) 、 a 、 b 、 ab 表示这 4 个处理, 规则是当代表因子的字母出现时, 该因子水平取 1, 否则取 0, 例如 (1) 表示处理 $(0, 0)$.

如果因子的两个水平有高和低之分时, 可以把“1”理解为高水平而把“0”理解为低水平, 也可以反过来理解; 有的文献中以 (1) 表示处理 $(1, 1)$ 而以 ab 表示处理 $(0, 0)$. 这些都只是符号的问题, 不会造成本质上的区别.

设每个处理重复 m 次试验, 以 y_{ijk} 表示处理 (i, j) 处第 k 次重复试验的响应值. 则 2^2 试验的固定效应模型为

$$\begin{cases} y_{ijk} = \mu + \tau_i + \beta_j + (\tau\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijk}, & \varepsilon_{ijk} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2), \\ i = 0, 1, \quad j = 0, 1, \quad k = 1, \dots, m, \\ \tau_0 + \tau_1 = 0, \quad \beta_0 + \beta_1 = 0, \\ (\tau\beta)_{00} + (\tau\beta)_{01} = (\tau\beta)_{10} + (\tau\beta)_{11} = 0, \\ (\tau\beta)_{00} + (\tau\beta)_{10} = (\tau\beta)_{01} + (\tau\beta)_{11} = 0. \end{cases} \quad (2.22)$$

它是双因子试验固定效应模型的特例, 它的方差分析与参数估计在 2.1.2 节已有详细论述.

在 2^k 因子设计中, 所有主效应和交互效应的自由度均为 1, 因此可以用一个独立的参数来表示诸效应.

定义 2.6. 称 $\tau := \tau_1 - \tau_0$ 为因子 A 的主效应, 表示 A 的水平变动对响应的影响; 称 $\beta := \beta_1 - \beta_0$ 为因子 B 的主效应, 表示 B 的水平变动对响应的影响; 称

$$\tau\beta := \frac{1}{2} [(\tau\beta)_{11} - (\tau\beta)_{01} - (\tau\beta)_{10} + (\tau\beta)_{00}]$$

为因子 A 与因子 B 的交互效应, 表示因子 B 固定在 1 水平时 A 的水平变动对响应的影响与因子 B 固定在 0 水平时 A 的变动对响应的影响之差的一半.

有的文献定义效应时把水平记号“1”和“0”交换,如称 $\tau_0 - \tau_1$ 为因子 A 的主效应. 这种记法虽然一系列符号的不同,本质上并无区别. 注意到模型(2.22)中除 μ 外互相独立的参数只有 3 个,恰好与这里定义的 3 个效应对应. 也就是说,如果得到了效应的估计,就可以由这些估计计算出模型(2.22)中除 μ 以外的所有参数;反之,如果得到了模型(2.22)中参数的估计,也可根据这些估计计算出效应.

下面讨论诸效应的估计. 根据(2.10)式,我们知道

$$\begin{aligned} A &:= \hat{\tau}_1 - \hat{\tau}_0 = \frac{y_{1..}}{2m} - \frac{y_{0..}}{2m} = \frac{1}{2m} [-y_{00..} - y_{01..} + y_{10..} + y_{11..}], \\ B &:= \hat{\beta}_1 - \hat{\beta}_0 = \frac{y_{.1..}}{2m} - \frac{y_{.0..}}{2m} = \frac{1}{2m} [-y_{00..} + y_{01..} - y_{10..} + y_{11..}], \\ AB &:= \frac{1}{2} \left[(\widehat{\tau\beta})_{11} - (\widehat{\tau\beta})_{01} - (\widehat{\tau\beta})_{10} + (\widehat{\tau\beta})_{00} \right] = \frac{1}{2m} [y_{00..} - y_{01..} - y_{10..} + y_{11..}] \end{aligned}$$

分别为诸效应的无偏估计. 为方便起见,以处理记号 (1)、 a 、 b 、 ab 分别表示在各处理上的 m 个观察值的总和 $y_{00..}$ 、 $y_{10..}$ 、 $y_{01..}$ 和 $y_{11..}$,则诸效应的估计可写成

$$\begin{cases} A = \frac{1}{2m} [-(1) - b + a + ab]; \\ B = \frac{1}{2m} [-(1) + b - a + ab]; \\ AB = \frac{1}{2m} [(1) - b - a + ab]. \end{cases} \quad (2.23)$$

根据对照的定义,它们是三个互相正交的对照,它们的平方和分别为

$$\begin{cases} SS_A = \frac{1}{4m} [-(1) - b + a + ab]^2; \\ SS_B = \frac{1}{4m} [-(1) + b - a + ab]^2; \\ SS_{AB} = \frac{1}{4m} [(1) - b - a + ab]^2. \end{cases} \quad (2.24)$$

用它们做方差分析,可以检验两个因子主效应和一个二因子交互效应的显著性,参考2.1.4节.

表 2.9: 2^2 设计对照系数符号表

	A	B	AB
(1)	-	-	+
b	-	+	-
a	+	-	-
ab	+	+	+

将计算诸效应估计量的系数符号列成表,得到表2.9. 它的第一列前半部分全为“-”,后半部分全为“+”,称为**二分列**,类似地,称第二列为**四分列**. 表2.9中,每列“+”号与“-”号的出现的次数相等;任何两列组成四组不同的符号对,其出现的次数相等. 一般地,

定义 2.7. 称由一些符号组成的矩阵为正交表 (*orthogonal table*), 如果任意两列中同行符号构成的若干符号的重复次数相等.

显然, 表2.9是正交表, 用记号 $L_4(2^3)$ 表示它, L 表示正交表, 2 代表正交表中不同水平数, 4 代表表的行数, 3 代表表的列数. 根据定义, 马上可得到正交表的两个基本性质:

- (1) 任意一列中不同符号出现的次数相等;
- (2) 从一张正交表中挑选出部分列组成的子表依然是正交表.

表2.9还满足以下性质:

(3) 任意两列对应符号相乘得出另一列, 且任意一列均可由其余两列对应符号相乘得到. 例如 $A \times B = AB$, $A \times AB = B$. 在正交表 $L_4(2^3)$ 中, 这一性质有两层含义: **任何两列的交互效应列是另一列, 表 $L_4(2^3)$ 是完备正交表**. 在行数不变的情况下, 完备的正交表不能增加新的列使之成为更大的正交表.

2.2.2 2^3 设计与正交表 $L_8(2^7)$

设 2^3 设计的 3 个因子为 A 、 B 、 C , 以“1”和“0”分别表示因子的两个水平. 试验需要考察三个主效应、三个二因子交互效应以及一个三因子交互效应. 全部处理共 8 个:

$$(0, 0, 0), (0, 0, 1), (0, 1, 0), (0, 1, 1), (1, 0, 0), (1, 0, 1), (1, 1, 0), (1, 1, 1).$$

设每个处理重复 m 次试验, 以 y_{ijkl} 表示处理 (i, j, k) 的第 l 次试验的结果, 则 2^3 因子试验的固定效应模型为

$$\left\{ \begin{array}{l} y_{ijkl} = \mu + \tau_i + \beta_j + \gamma_k + (\tau\beta)_{ij} + (\tau\gamma)_{ik} + (\beta\gamma)_{jk} + (\tau\beta\gamma)_{ijk} + \varepsilon_{ijkl}; \\ \varepsilon_{ijkl} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2), \quad i = 0, 1, \quad j = 0, 1, \quad k = 0, 1, \quad l = 1, \dots, m; \\ \tau_0 + \tau_1 = \beta_0 + \beta_1 = \gamma_0 + \gamma_1 = 0; \\ (\tau\beta)_{00} + (\tau\beta)_{10} = (\tau\beta)_{01} + (\tau\beta)_{11} = (\tau\beta)_{00} + (\tau\beta)_{01} = (\tau\beta)_{10} + (\tau\beta)_{11} = 0; \\ (\tau\gamma)_{00} + (\tau\gamma)_{10} = (\tau\gamma)_{01} + (\tau\gamma)_{11} = (\tau\gamma)_{00} + (\tau\gamma)_{01} = (\tau\gamma)_{10} + (\tau\gamma)_{11} = 0; \\ (\beta\gamma)_{00} + (\beta\gamma)_{10} = (\beta\gamma)_{01} + (\beta\gamma)_{11} = (\beta\gamma)_{00} + (\beta\gamma)_{01} = (\beta\gamma)_{10} + (\beta\gamma)_{11} = 0; \\ (\tau\beta\gamma)_{0jk} + (\tau\beta\gamma)_{1jk} = 0, \quad j = 0, 1, \quad k = 0, 1; \\ (\tau\beta\gamma)_{i0k} + (\tau\beta\gamma)_{i1k} = 0, \quad i = 0, 1, \quad k = 0, 1; \\ (\tau\beta\gamma)_{ij0} + (\tau\beta\gamma)_{ij1} = 0, \quad i = 0, 1, \quad j = 0, 1. \end{array} \right. \quad (2.25)$$

它是三因子试验固定效应模型(2.13)的一个特例.

与 2^2 设计类似, 由于诸因子主效应和交互效应的自由度均为 1, 可以将它们概括为一个效应参数:

定义 2.8. 称 $\tau := \tau_1 - \tau_0$ 为因子 A 的主效应, 其估计量记作 A; 称 $\beta := \beta_1 - \beta_0$ 为因子 B 的主效应, 其估计量记作 B; 称 $\gamma := \gamma_1 - \gamma_0$ 为因子 C 的主效应, 其估计量记作 C; 称

$$\tau\beta := \frac{1}{2}[(\tau\beta)_{11} - (\tau\beta)_{10} - (\tau\beta)_{01} + (\tau\beta)_{00}]$$

为因子 A 与 B 的交互效应, 记作 $\tau\beta$, 其估计量记作 AB; 称

$$\tau\gamma := \frac{1}{2}[(\tau\gamma)_{11} - (\tau\gamma)_{10} - (\tau\gamma)_{01} + (\tau\gamma)_{00}]$$

为因子 A 与 C 的交互效应, 其估计量记作 AC; 称

$$\beta\gamma := \frac{1}{2}[(\beta\gamma)_{11} - (\beta\gamma)_{10} - (\beta\gamma)_{01} + (\beta\gamma)_{00}]$$

为因子 B 与 C 的交互效应, 其估计量记作 BC; 称

$$\begin{aligned} \tau\beta\gamma := & \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} [(\tau\beta\gamma)_{111} - (\tau\beta\gamma)_{011} - (\tau\beta\gamma)_{101} + (\tau\beta\gamma)_{001}] \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} [(\tau\beta\gamma)_{110} - (\tau\beta\gamma)_{010} - (\tau\beta\gamma)_{100} + (\tau\beta\gamma)_{000}] \right\} \end{aligned}$$

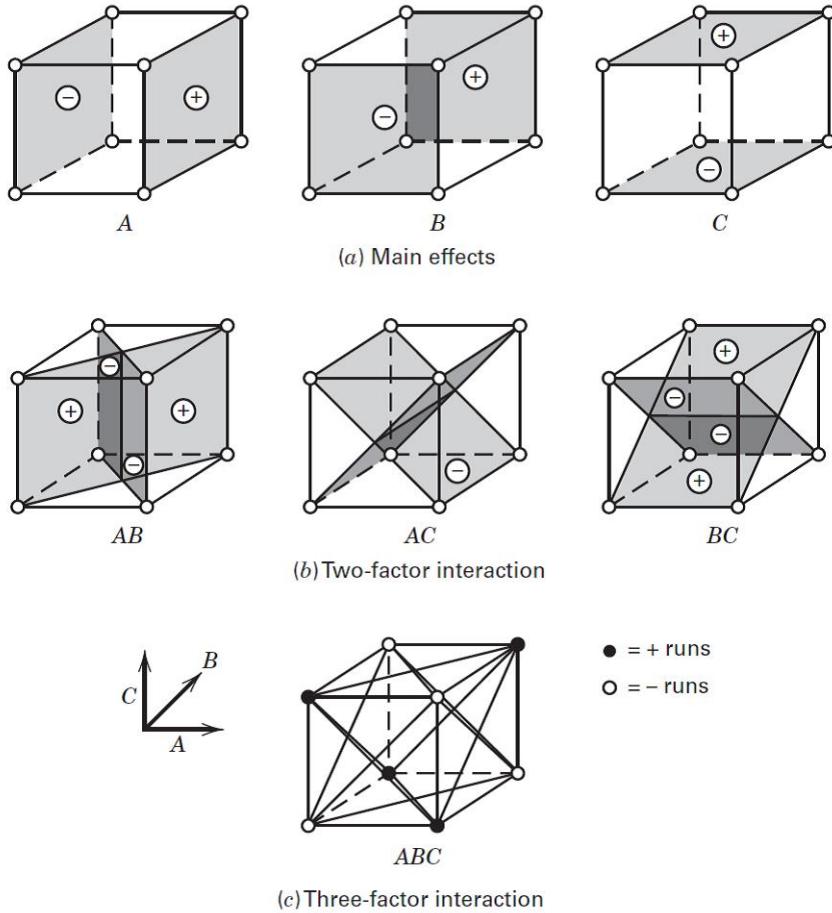
为 3 个因子 A、B、C 的交互效应, 表示因子 C 固定在水平 1 时 A、B 的交互效应与因子 C 固定在水平 0 时的 A、B 的交互效应之差的一半, 它的估计量记作 ABC.

注意, 由于在 2^k 因子设计中诸效应的自由度均为 1, 因此此处以 AB 代替 $A \times B$ 表示二因子交互效应、以 AB 代替 $A \times B \times C$ 表示三因子交互效应, 不会引起混淆.

如果各试验点上 m 个观察值的总和 $y_{000}.$ 、 $y_{100}.$ 、 $y_{010}.$ 、 $y_{110}.$ 、 $y_{001}.$ 、 $y_{101}.$ 、 $y_{011}.$ 、 $y_{111}.$ 分别用处理记号 (1)、a、b、ab、c、ac、bc、abc 表示, 则由模型(2.25)可得到诸效应的无偏估计为

$$\left\{ \begin{array}{l} A = \frac{1}{4m} [-(1) - c - b - bc + a + ac + ab + abc]; \\ B = \frac{1}{4m} [-(1) - c + b + bc - a - ac + ab + abc]; \\ C = \frac{1}{4m} [-(1) + c - b + bc - a + ac - ab + abc]; \\ AB = \frac{1}{4m} [+ (1) + c - b - bc - a - ac + ab + abc]; \\ AC = \frac{1}{4m} [+ (1) - c + b - bc - a + ac - ab + abc]; \\ BC = \frac{1}{4m} [+ (1) - c - b + bc + a - ac - ab + abc]; \\ ABC = \frac{1}{4m} [-(1) + c + b - bc + a - ac - ab + abc]. \end{array} \right. \quad (2.26)$$

因子 A 的主效应的估计可理解为: 当 B 和 C 处于组合 (0,0) 时, A 的效应的估计为 $(a - (1))/m$; 当 B 和 C 处于组合 (0,1) 时, A 的效应的估计为 $(ac - c)/m$; 当 B 和 C 处于

图 2.9: 2^3 设计中对应于主效应和交互效应的对照的几何表示

组合 $(1, 0)$ 时, A 的效应的估计为 $(ab - b)/m$; 当 B 和 C 处于组合 $(1, 1)$ 时, A 的效应的估计为 $(abc - bc)/m$; 而因子 A 的主效应的估计恰为这四个效应估计的平均值. 也可将 A 的主效应理解为图2.9的 (a) 中左面 4 个处理与右面 4 个处理之间的对照. B 和 C 的主效应的估计可以同样的方法理解, 图2.9摘自文献 [17] 的第 241 页. 交互效应 AB 的估计可理解为当 B 取水平 1 时 A 的平均效应

$$\frac{1}{2m}[(abc - bc) + (ab - b)]$$

与当 B 取水平 0 时 A 的平均效应

$$\frac{1}{2m}[(ac - c) + (a - (1))]$$

的差的一半, 也可理解为

$$AB = \frac{abc + ab + c + 1}{4m} - \frac{bc + ac + b + a}{4m},$$

即图2.9(b) 中第一幅子图中两个平面上处理的对照. 同理可参考图2.9来理解交互效应 BC , AC 和 ABC .

(2.26)式给出的七个效应的估计构成七个互相正交的对照. 利用(2.20)式可以得到这些效应的平方和计算公式, 它们的和恰为八个处理的偏差平方和. 利用相对照的偏差平方和可以检验每一个效应的显著性, 参考2.1.4节.

将(2.26)式中诸效应的对照的系数的符号列成表, 得到表2.10, 它是一张正交表, 记作 $L_8(2^7)$. 表 $L_8(2^7)$ 还具有以下特点:

表 2.10: 2^3 设计计算效应对照系数符号表

处理组合	A	B	AB	C	AC	BC	ABC
(1)	-	-	+	-	+	+	-
c	-	-	+	+	-	-	+
b	-	+	-	-	+	-	+
bc	-	+	-	+	-	+	-
a	+	-	-	-	-	+	+
ac	+	-	-	+	+	-	-
ab	+	+	+	-	-	-	-
abc	+	+	+	+	+	+	+

- (1) A 列为二分列, B 列称为四分列, C 列称为八分列.
- (2) 任何两列符号乘积之和为 0, 这即体现了正交表的正交性, 又体现了七个对照 A 、 B 、 C 、 AB 、 AC 、 BC 、 ABC 的正交性.
- (3) 任意两列对应位置符号相乘, 得出表中的某一列, 且表中任何一列均可由其余两列对应符号相乘得到, 即表 $L_8(2^7)$ 是完备正交表. 可由其它两列运算得到的列称为那两列的交互效应列, 如 A 列和 B 列的交互效应列是 AB 列, BC 列和 ABC 列的交互效应列是 A 列. 表2.11给出了正交表 $L_8(2^7)$ 的全部交互效应关系.

表 2.11: $L_8(2^7)$ 两列的交互效应

1	2	3	4	5	6	7	列号
3	2	5	4	7	6		1
	1	6	7	4	5		2
	7	6	5	4			3
		1	2	3			4
			3	2			5
				1			6

如果利用表2.10来安排试验方案，每列均安排一个二水平因子，则置换表中的行改变了试验次序而没有改变试验方案；把表中的记号“+”和“-”替换成其符号，也没有改变表2.10的结构。一般地，

- **行置换不变性：**正交表的任意两行之间可以互相置换，即试验的次序可以自由选择；
- **列置换不变性：**正交表的任意两列之间可以互相置换，即试验因子可以自由地安排在正交表的各列上；
- **水平置换不变性：**正交表每一列的水平可以互相置换，即因子的水平可以自由安排。

例如，

- 分别以“1”和“0”代替代替表2.10中的符号“+”和“-”，得到表2.12，它还是正交表 $L_8(2^7)$ ；
- 首先把表2.10中 A 、 B 、 C 三个主效应列的符号“+”和“-”互换，然后分别以“1”和“0”替换“+”和“-”，得到表2.13，它还是正交表 $L_8(2^7)$ 。

表 2.12: $L_8(2^7)$ 正交表

No.	A	B	AB	C	AC	BC	ABC
1	0	0	1	0	1	1	0
2	0	0	1	1	0	0	1
3	0	1	0	0	1	0	1
4	0	1	0	1	0	1	0
5	1	0	0	0	0	1	1
6	1	0	0	1	1	0	0
7	1	1	1	0	0	0	0
8	1	1	1	1	1	1	1

表 2.13: $L_8(2^7)$ 正交表

No.	A	B	AB	C	AC	BC	ABC
1	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	1	1	1	1
3	0	1	1	0	0	1	1
4	0	1	1	1	1	0	0
5	1	0	1	0	1	0	1
6	1	0	1	1	0	1	0
7	1	1	0	0	1	1	0
8	1	1	0	1	0	0	1

由此可见，正交表 $L_8(2^7)$ 并不唯一，可以通过行列置换和水平置换变出许多 $L_8(2^7)$ 。虽然可以变换出很多的正交表 $L_8(2^7)$ ，但文献中一般采用表2.10或表2.13作为正交表 $L_8(2^7)$ ，因为

这两张表的构造方法和交互效应关系都比较清楚.

定义 2.9. 称两张正交表为等价的, 如果对其中一张表进行适当的行置换和列置换可以得到另一张表; 称两张正交表为同构的, 如果对其中一张表进行适当的行置换、列置换和水平置换可以得到另一张表.

显然, 等价的正交表在使用时并无本质差别. 然而, 同构正交表可能有不同的统计推断能力 (方开泰, 马长兴. 2001. 正交与均匀试验设计 [M]. 北京: 科学出版社. 4.4 节).

以上介绍正交表 $L_4(2^3)$ 和 $L_8(2^7)$ 都是通过诸效应的对照系数的符号引入的. 观察表2.10, 它还可以通过以下方式构造:

Step 1 构造二分列 A , 它的前四个元素为“-”, 后四个元素为“+”;

Step 2 构造四分列 B , 并利用对应元素的乘法运算构造 B 与它前面的列 A 的交互效应列 AB ;

Step 3 构造八分列 C , 并利用对应元素的乘法运算依此构造 C 与它前面的 A 列、 B 列和 AB 列的交互效应列 AC 列、 BC 列和 ABC 列.

类似地, 表2.13可以通过以下方式构造:

Step 1 构造二分列 A , 它的前四个元素为“0”, 后四个元素为“1”;

Step 2 构造四分列 B , 并利用对应元素的模 2 加法运算构造 B 与它前面的列 A 的交互效应列 AB ;

Step 3 构造八分列 C , 并利用对应元素的模 2 加法运算依此构造 C 与它前面的 A 列、 B 列和 AB 列的交互效应列 AC 列、 BC 列和 ABC 列.

表2.13中的 A 列、 B 列和 C 列中的符号恰好构成 2^3 设计的全面实施, 因此可用它来安排试验. 与表2.10一样, 它还可用来计算诸效应的平方和, 下面以一个例子来说明如何利用表2.13进行 2^3 设计的方差分析.

例 2.7. 在梳棉机上纺粘锦混纺纱, 为了提高质量, 选了 3 个因子, 每个因子 2 个水平,

A 金属针布: $A_1 =$ 日本产, $A_2 =$ 青岛产;

B 产量水平: $B_1 = 6$ 公斤, $B_2 = 10$ 公斤;

C 锡林速度: $C_1 = 238$ 转/分, $C_2 = 320$ 转/分.

实践经验表明, 因子间可能有二因子交互效应.

这是一个 2^3 因子的试验, 用正交表 $L_8(2^7)$ 来安排这项试验. 因子 A 、 B 和 C 分别放在第一列、第二列和第四列, 其余各列为这些列的交互效应列, 方案如下:

列号	1	2	3	4	5	6	7
因子	A	B	AB	C	AC	BC	ABC

换算成实际的水平, 得到试验方案如下:

试验号	$A(1)$	$B(2)$	$C(4)$
1	日本产	6	238
2	日本产	6	320
3	日本产	10	238
4	日本产	10	320
5	青岛产	6	238
6	青岛产	6	320
7	青岛产	10	238
8	青岛产	10	320

8 次试验结果列于表 2.14. 表中 T_0 行的数字表示相应列中水平为 0 的行对应的试验结

表 2.14: 梳棉机试验结果和计算

试验号	$A(1)$	$B(2)$	$AB(3)$	$C(4)$	$AC(5)$	$BC(6)$	$ABC(7)$	棉结粒数
1	0	0	0	0	0	0	0	$(1) = 0.30$
2	0	0	0	1	1	1	1	$c = 0.35$
3	0	1	1	0	0	1	1	$b = 0.20$
4	0	1	1	1	1	0	0	$bc = 0.30$
5	1	0	1	0	1	0	1	$a = 0.15$
6	1	0	1	1	0	1	0	$ac = 0.50$
7	1	1	0	0	1	1	0	$ab = 0.15$
8	1	1	0	1	0	0	1	$abc = 0.40$
T_0	1.15	1.30	1.20	0.80	1.40	1.15	1.25	$T = 2.35$
T_1	1.20	1.05	1.15	1.55	0.95	1.20	1.10	
m_0	0.2875	0.3250	0.3000	0.2000	0.3500	0.2875	0.3125	
m_1	0.3000	0.2625	0.2875	0.3875	0.2375	0.3000	0.2750	
R	0.0125	0.0625	0.0125	0.1875	0.1125	0.0125	0.0375	

果之和, T_1 行的数字表示相应列中水平为 1 的行对应的试验结果之和, T 表示所有试验结果之和; m_0 行的数字表示相应列中水平为 0 的行对应的试验结果的平均值, m_1 行的数字表示相应列中水平为 1 的行对应的试验结果的平均值. 定义

$$R_i := \max\{m_i\} - \min\{m_i\}$$

为第 i 列的极差. 极差可用来衡量诸效应之间的主次关系. 直观来看, 极差越大表明相应的效应越大, 主次如下:

$$C > AC > B > ABC > A = AB = BC.$$

直观上看, 效应 A 、 AB 和 BC 不显著, 下面利用方差分析来验证这一结论. 有两种方式计算各列的偏差平方和, 一种是采用对照偏差平方和公式(2.20):

$$\begin{aligned} SS_A &= \frac{1}{8} [abc + ab + ac + a - bc - b - c - (1)]^2 \\ &= \frac{1}{8} [0.40 + 0.15 + 0.50 + 0.15 - 0.30 - 0.20 - 0.35 - 0.30]^2 \\ &= 0.0003125; \end{aligned}$$

另一种方式是利用公式

$$SS_A = \frac{T_{A_0}^2 + T_{A_1}^2}{4} - \frac{T^2}{8} = \frac{1.15^2 + 1.20^2}{4} - \frac{2.35^2}{8} = 0.0003125.$$

其余偏差平方和也可以类似地计算, 例如

$$SS_{AB} = \frac{T_{(AB)_0}^2 + T_{(AB)_1}^2}{4} - \frac{T^2}{8} = \frac{1.20^2 + 1.15^2}{4} - \frac{2.35^2}{8} = 0.0003125.$$

很容易验证这两种方式本质上是一致的. 所有偏差平方和计算出来后, 便可对效应的显著性进行 F 检验了. 方差分析表 2.15 显示上述猜测是对的, 只有 C , B 和 AC 显著.

表 2.15: 梳棉机试验方差分析

方差来源	平方和	自由度	均方	F 值	p 值
B	0.0078125	1	0.0078125	8.33	0.0447
C	0.0203125	1	0.0203125	75.00	0.0010
AC	0.0253125	1	0.0253125	27.00	0.0065
误差	0.0037500	4	0.0009375		
A	0.0003125	1			
AB	0.0003125	1			
BC	0.0003125	1			
ABC	0.0028125	1			
总和	0.1071825	7			

2.2.3 2^k 设计与正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$

2^2 设计和 2^3 设计的方法可以类推到一般的 2^k 设计的情形, 它包含 k 个二水平因子, 包含 k 个主效应, C_k^2 个二因子交互效应, C_k^3 个三因子交互效应, …, 以及 1 个 k 因子交互效应, 一共有

$$C_k^1 + C_k^2 + \cdots + C_k^k = 2^k - 1$$

个效应. 每个效应的自由度均为 1. 如果每个处理重复 m 次, 则总自由度为 $2^k m - 1$, 误差自由度为 $2^k m - 1 - 2^k + 1 = 2^k(m - 1)$.

2^k 设计的处理是 k 维空间中顶点坐标用 0 或者 1 表示的立方体的 2^k 个顶点。 2^2 和 2^3 设计的处理记号可类推到此处，按照标准顺序写出处理的记号：从后往前依次引入试验因子，每引入一个新的因子，就依次和已引入的因子组合。例如， 2^4 设计处理记号的标准顺序是

$$(1), d, c, cd, b, bd, bc, bcd, a, ad, ac, acd, ab, abd, abc, abcd.$$

共 $2^4 = 16$ 个处理记号。每一项中出现了的字母表示相应试验因子取 1 水平，否则取 0 水平。例如， ab 表示处理 $(1, 1, 0, 0)$ ，即因子 A 和 B 取水平 1，而因子 C 和 D 取水平 0。

任意效应的无偏估计可以用展开下式右边的方法来确定：

$$AB \cdots K = \frac{1}{2^{k-1}m} (a \pm 1)(b \pm 1) \cdots (k \pm 1), \quad (2.27)$$

式中，如果左边有某个因子时，右边相应括号内取“-”号，否则取“+”号。右侧按代数方法展开后，以 (1) 代替 1，每一字母组合表示对应处理处 m 次试验观察值的总和。例如，可按如下方式计算 2^3 设计中因子 A 与 C 的交互效应的估计：

$$\begin{aligned} AC &= \frac{1}{2^{3-1}m} (a - 1)(b + 1)(c - 1) \\ &= \frac{1}{4m} [abc - ab + ac - a - bc + b - c + (1)]. \end{aligned}$$

根据对照平方和的计算公式，诸效应的平方和为：

$$SS_{AB \cdots K} = \frac{1}{2^k m} [(a \pm 1)(b \pm 1) \cdots (k \pm 1)]^2. \quad (2.28)$$

2^k 设计的试验设计与数据分析都可以借助正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 进行。与 2^3 设计类似的，正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 也有两种构造方法：利用诸效应的对照系数和利用列名运算。

(1) 利用效应的对照系数构造正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 。根据(2.27)式得到所有对照的系数符号，然后列出表格就可得到正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 。根据定义 2.9 可知，正交表的行列次序不重要，我们推荐按照如下方式排列：

- 列的次序，按字母正序，首先引入 A ，其后每引入一个字母，就依次引入它与前面各列的交互效应列；
- 行的次序，按字母反序，首先引入 (1)，每引入一个新的因子，就依次和前面已引入的因子组合。

以 $L_{16}(2^{15})$ 为例，其列可按照

$$A, B, AB, C, AC, BC, ABC, D, AD, BD, ABD, CD, ACD, BCD, ABCD$$

的次序排列，它的行按照

$$(1), d, c, cd, b, bd, bc, bcd, a, ad, ac, acd, ab, abd, abc, abcd.$$

的次序排列. 每列中水平与相应回归系数对应, 例如, A 列的水平由展开式

$$(a-1)(b+1)(c+1)(d+1) = -(1)-d-c-cd-b-bd-bc-cbd+a+ad+ac+acd+ab+abd+abc+acbd$$

的符号确定, 它恰为二分列 $A = [-, -, -, -, -, -, -, +, +, +, +, +, +]^T$.

(2) 利用列名运算构造正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$. 按照基本列和交互效应列的次序依次构造, 其步骤如下:

Step 1 构造二分列, 该列的前 2^{k-1} 行置水平 0, 后 2^{k-1} 行置水平 1, 列名记为 A ;

Step 2 构造四分列, 将二分列的前后两部分再次二分, 列名记为 B ; 然后利用模 2 加法运算依次得到四分列与 A 列的交互效应列, 列名记为 AB ;

\vdots

Step k 构造 2^k 分列, 该列的各行按照 $0, 1, 0, 1, \dots$ 的次序交替安排, 列名记为 K , 并利用模 2 加法运算依次得到 2^k 分列与前面各列的交互效应列 AK, BK, ABK, \dots .

其中, 二分列、四分列、 \dots 、 2^k 分列统称为**基本列**.

根据这两种构造方法, 可归纳出正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 的列名运算规则: 首先按照代数运算化简, 然后将幂指数按照模 2 加法化简. 例如

$$ABC \times BC = AB^2C^2 = AB^0C^0 = A,$$

表明 ABC 列和 BC 列的交互效应列为 A 列. 按照这种运算规则, 可以很方便地得出任意两列的交互效应列. $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 型正交表的构造过程保证了它是完备的.

正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 既可用于安排试验方案, 又可用来分析试验数据. 以 $L_{16}(2^{15})$ 为例, 首先按照第二种方法构造正交表:

Step 1 构造二分列, $A = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1]^T$;

Step 2 构造四分列, $B = [0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1]^T$, 并按照模 2 加法运算得到交互效应列 $AB = [0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 0]^T$;

Step 3 构造八分列, $C = [0, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 1]^T$, 并按照模 2 加法运算得到交互效应列

$$AC = [0, 0, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 0, 0]^T,$$

$$BC = [0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0]^T,$$

$$ABC = [0, 0, 1, 1, 1, 1, 0, 0, 1, 1, 0, 0, 0, 0, 1, 1]^T;$$

Step 4 构造十六分列 $D = [0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 1]^T$, 并按照模 2 加法运算得到交互效应列 $AD, BD, ABD, CD, ACD, BCD, ABCD$, 见表2.16.

试验方案是由四个基本列 A, B, C, D 确定的 2^4 设计的全面实施.

表 2.16: $L_{16}(2^{15})$

列号	A	B	AB	C	AC	BC	ABC	D	…	试验结果
1	0	0	0	0	0	0	0	0	…	$(1) = y_{0000}.$
2	0	0	0	0	0	0	0	1	…	$d = y_{0001}.$
3	0	0	0	1	1	1	1	0	…	$c = y_{0010}.$
4	0	0	0	1	1	1	1	1	…	$cd = y_{0011}.$
5	0	1	1	0	0	1	1	0	…	$b = y_{0100}.$
6	0	1	1	0	0	1	1	1	…	$bd = y_{0101}.$
7	0	1	1	1	1	0	0	0	…	$bc = y_{0110}.$
8	0	1	1	1	1	0	0	1	…	$bcd = y_{0111}.$
9	1	0	1	0	1	0	1	0	…	$a = y_{1000}.$
10	1	0	1	0	1	0	1	1	…	$ad = y_{1001}.$
11	1	0	1	1	0	1	0	0	…	$ac = y_{1010}.$
12	1	0	1	1	0	1	0	1	…	$acd = y_{1011}.$
13	1	1	0	0	1	1	0	0	…	$ab = y_{1100}.$
14	1	1	0	0	1	1	0	1	…	$abd = y_{1101}.$
15	1	1	0	1	0	0	1	0	…	$abc = y_{1110}.$
16	1	1	0	1	0	0	1	1	…	$abcd = y_{1111}.$
T_0	T_{A_0}	T_{B_0}	$T_{(AB)_0}$	T_{C_0}	$T_{(AC)_0}$	$T_{(BC)_0}$	$T_{(ABC)_0}$	T_{D_0}	…	$T = y.....$
T_1	T_{A_1}	T_{B_1}	$T_{(AB)_1}$	T_{C_1}	$T_{(AC)_1}$	$T_{(BC)_1}$	$T_{(ABC)_1}$	T_{D_1}	…	

诸效应的估计和平方和可利用相应的对照来计算. 不过, 在正交表中一般使用下述平方和计算公式:

$$SS_{AB\dots K} = \frac{T_{(AB\dots K)_0}^2 + T_{(AB\dots K)_1}^2}{2^{k-1}m} - \frac{T^2}{2^km},$$

其中, T 表示所有试验数据之和, $T_{(AB\dots K)_0}$ 表示 $AB\dots K$ 列中水平为 0 对应的数据之和, $T_{(AB\dots K)_1}$ 表示 $AB\dots K$ 列中水平为 1 对应的数据之和.

2.2.4 2^k 因子试验的部分实施

2^k 因子试验包含 2^k 个处理组合, 如果全面实施, 它能估计所有的效应. 但当 k 增加时, 全面实施所需的试验次数迅速增大, 以致超出实验者所拥有的资源. 例如, 一个 2^6 设计的全面实施需要 64 次试验, 其 63 个自由度中仅有 6 个与主效应对应, 仅有 15 个与二因子交互效应对应, 其余 42 个自由度与三阶或更高阶交互效应对应. 在实际问题中, 高阶交互效应一般都可忽略不计, 甚至部分两因子交互效应也可忽略不计. 因此只需采用 2^k 设计的部分实施. 当领域知识能够确定某些高阶交互效应可以忽略时, 试验设计就要解决如何采用 2^k 设计的一个试验点数较少的部分实施来估计感兴趣的效应的问题.

以 2^3 因子试验为例, 2^3 设计包括 8 个处理, 全面实施能够估计 3 个因子主效应、3 个两因子交互效应和 1 个三因子交互效应. 当领域知识告诉我们 4 个交互效应都不显著时, 可以减少试验次数, 用较小的正交表 $L_4(2^3)$ 安排试验:

列名	A	B	AB
因子	A	B	C

它的 4 个试验点对应 4 个处理:

$$(0, 0, 0), \quad (0, 1, 1), \quad (1, 0, 1), \quad (1, 1, 0).$$

这个设计只做 2^3 设计中的一半试验, 称它为 2^3 设计的 $1/2$ 实施, 或 2^{3-1} 设计. $L_4(2^3)$ 中的第三列原来是用于估计交互效应 AB 的, 安排因子 C 是因为领域知识告诉我们交互效应 AB 不显著, 因此这一列估计的实际上是交互效应 AB 和主效应 C 的和, 即 $C + AB$.

用正交表安排试验, 如果一列上出现的因子效应和交互效应不止一个, 当该列的效应显著时, 无法识别是哪个因子 (或交互效应) 显著, 称这种现象为混杂现象 (confounded, aliased). 混杂现象造成因果关系混乱, 试验设计时应尽量避免.

因效应 C 与 AB 处于同一列, 我们称 C 为 AB 的别名 (alias), 或 AB 为 C 的别名, 并以 $C = AB$ (或 $AB = C$) 表示别名关系. 在列名运算意义下, 别名关系两端同时乘 C 得到

$$ABC = C^2 = C^0 = \mathbf{I},$$

这里 \mathbf{I} 称为单位元, 其定义如下:

- 如果以“-”和“+”表示两个水平, 且以对应水平的乘法运算表示列与列之间运算时, \mathbf{I} 表示全部由“+”组成的列;
- 如果以“0”和“1”表示两个水平, 且以对应水平的模 2 加法运算表示列与列之间的运算时, \mathbf{I} 表示全部由“0”组成的列.

在 $ABC = \mathbf{I}$ 两端同时乘以 A , 得到别名关系 $BC = A$, 两端同时乘以 B 得到别名关系 $AC = B$, 两端同时乘以 C 得到别名关系 $AB = C$. 由此可见, 关系式 $ABC = \mathbf{I}$ 表达了该方案的全部别名关系, 我们称它为 2^3 设计的这个 $1/2$ 实施的定义关系 (defining relations). 这就是说, 部分实施是由其定义关系确定的. 讨论部分实施时, 都应指出它的定义关系.

由于上述 2^{3-1} 设计的定义关系为 $\mathbf{I} = ABC$, 因此它实质上是正交表 $L_8(2^7)$ 中 ABC 列为 + 号对应的那四行, 即表2.17的上半部分. 从表中可以清晰地看出别名关系 $A = BC$, $B = AC$ 和 $C = AB$. 表2.17的下半部分也构成一个 2^{3-1} 设计, 其定义关系是 $\mathbf{I} = -ABC$. 这两个设计构成互补关系, 即上一个 2^{3-1} 设计的 A 列估计出列的效应是 $A + BC$, 而下一个 2^{3-1} 设计的 A 列估计出来的效应则是 $A - BC$, 它俩共同构成一个 2^3 因子完全实施. 在实践中, 使用这两个 2^{3-1} 设计并无区别.

一般地, 采用正交表 $L_{2^{k-1}}(2^{2^{k-1}-1})$ 是 2^k 设计的 $1/2$ 实施, 采用正交表 $L_{2^{k-2}}(2^{2^{k-2}-1})$ 是 2^k 设计的 $1/4$ 实施, 依此类推. 2^k 设计部分实施的方案不唯一, 挑选合适方案的基本方

表 2.17: 2^3 设计的部分实施

处理组合	I	A	B	AB	C	AC	BC	ABC
c	+	-	-	+	+	-	-	+
b	+	-	+	-	-	+	-	+
a	+	+	-	-	-	-	+	+
abc	+	+	+	+	+	+	+	+
(1)	+	-	-	+	-	+	+	-
bc	+	-	+	-	+	-	+	-
ac	+	+	-	-	+	+	-	-
ab	+	+	+	+	-	-	-	-

法是, 将感兴趣的效应罗列出来, 然后选用一张最小的二水平正交表安排试验, 使这些效应都能估计而不相混杂, 表头设计要求这些效应都互不在同一列, 即它们都不互为别名.

例 2.8. 正交表 $L_8(2^7)$ 最多可安排 7 个二水平因子, 因此可用来安排 2^4 设计的 $1/2$ 实施、 2^5 设计的 $1/4$ 实施、 2^6 设计的 $1/8$ 实施和 2^7 设计的 $1/16$ 实施. 表 2.18 给出了一些可供参考的试验方案. 为了获得表中各方案的定义关系, 可直接从表中观察. 也可写出各设计的设

表 2.18: $L_8(2^7)$ 安排 2^k 的部分实施方案

因子数	A	B	AB	C	AC	BC	ABC	定义关系
4	A	B		C			D	I = ABCD
5	A	B	E	C			D	
6	A	B	E	C	F		D	
7	A	B	E	C	F	G	D	

计矩阵, 通过观察设计矩阵得到定义关系.

以 2^{4-1} 设计为例, 因子 D 安排在交互效应 ABC 列, 故 D 与 ABC 别名, 即 $D = ABC$, 因此其定义关系为 $\mathbf{I} = ABCD$. 2^{4-1} 设计的设计矩阵为

$$\mathbf{D}_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

根据模 2 加法运算, 观察得到其定义关系为 $\mathbf{I} = ABCD$. 定义关系两边分别乘以 A, B, C, D, AB, AC 和 AD , 便得到了这个 2^{4-1} 设计的所有别名关系:

$$A = BCD, \quad B = ACD, \quad D = ABC, \quad AB = CD, \quad AC = BD, \quad BC = AD.$$

2^{5-2} 设计中, ABC 和 D 混杂, AB 和 E 混杂, 故其定义关系为

$$\mathbf{I} = ABCD = ABE = CDE,$$

其中 $\mathbf{I} = CDE$ 是由 $\mathbf{I} = ABCD$ 和 $\mathbf{I} = ABE$ 得到的. 也可通过观察 2^{5-2} 设计的设计矩阵

$$\mathbf{D}_5 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

得到其定义关系. 根据定义关系也可以得到这个 2^{5-2} 的一切别名关系, 作为练习. 同理, 从表 2.18 中可得到 2^{6-3} 设计的定义关系为

$$\mathbf{I} = ABE = ACF = ABCD = \dots,$$

根据列名运算法则, 上述等式中任意两个元素的乘积仍然为单位元, 因此完整的定义关系为

$$\mathbf{I} = ABE = ACF = BDF = CDE = ABCD = BCEF = ADEF.$$

由此也可以得到这个 2^{6-3} 的一切别名关系, 作为练习. 2^{7-4} 设计的定义关系为

$$\mathbf{I} = ABE = ACF = CDE = BDF = ABCD = BCEF = ADEF = BCG = ABG = \dots$$

由此也可以得到这个 2^{7-4} 的一切别名关系, 作为练习.

给定 2^k 因子设计的部分实施, 可以确定它们的定义关系. 反之, 给定定义关系也可以构造出相应的部分因子设计. 定义关系为 $\mathbf{I} = AB \cdots K$ 的 2^{k-1} 设计的构造方法为:

Step 1 以正交表 $L_{2^{k-1}}(2^{2^{k-1}-1})$ 的基本列安排前 $k-1$ 个试验因子;

Step 2 以正交表 $L_{2^{k-1}}(2^{2^{k-1}-1})$ 中 $k-1$ 因子交互效应列作为第 k 个试验因子所在的列.

一般地, 2^{k-p} 设计的构造方法为:

Step 1 以正交表 $L_{2^{k-p}}(2^{2^{k-p}-1})$ 的基本列安排前 $k-p$ 个试验因子;

Step 2 从正交表 $L_{2^{k-p}}(2^{2^{k-p}-1})$ 的交互效应列中, 选择 p 个合适的高阶交互效应列安排剩余的 p 个因子.

按照这种方式构造出来的部分实施的定义关系十分明确. 例如上述 2^{7-4} 设计中, 定义关系为

$$\mathbf{I} = ABCD = ABE = ACF = BCG = \dots$$

从以上讨论中我们发现

- (1) 试验次数压缩得越多, 定义关系就越长, 别名关系也就越多, 即效应混杂越多;
- (2) 定义关系具有对列名运算封闭的性质.

下面借助代数中群的概念来刻画定义关系对列名运算封闭这一性质.

定义 2.10. 设集合 G 为非空集, 如果集合 G 定义了一个二元运算 “*”, 满足

- (1) 若 $a \in G, b \in G$, 则 $a * b \in G$;
- (2) 对任意 $a, b, c \in G$, $a * (b * c) = (a * b) * c$;
- (3) G 中有一单位元 e , 使得对任意 $b \in G$, $b * e = e * b = b$;
- (4) 对任意 $a \in G$, 存在逆元 a^{-1} , 使得 $a * a^{-1} = e$;

则称 G 为一个群 (group), 如果 $a * b = b * a$. 则称 G 为可交换群, 或阿贝尔群 (Abel group).

在部分因子设计中, 称列名记号 A, B 等为字母 (letter), 称字母串 $ABCD, AD$ 等为字 (word), 一个字所含字母的个数称为这个字的字长 (word length). 在一个部分因子设计中, 若一个字经列名运算化简后得到单位元 \mathbf{I} , 则称这个字为这个部分因子设计的生成字 (generator). 例如, $ABE, CDE, ABCD$ 均为设计 D_5 的生成字. 一般地, 任意一个 2^{k-p} 设计的所有生成字和单位元 \mathbf{I} 组成的集合在列名运算意义下构成一个群. 例如, D_5 的生成字和单位元共同组成的集合

$$\{\mathbf{I}, ABE, CDE, ABCD\}$$

构成一个可交换群, 称这个群为 D_5 的定义关系子群; D_6 的生成字和单位元共同组成的集合

$$\{\mathbf{I}, ABE, CDE, ACF, BDF, ABCD, BCEF, ADEF\}$$

也构成一个可交换群, 称这个群为 D_6 的定义关系子群.

注意, 根据 2^{k-p} 设计的构造方法, 任何一个 2^{k-p} 设计都包含 p 个基本生成字. 其它生成字都是由这 p 个生成字按照列名运算得到的. 例如,

- D_5 有两个基本生成字 ABE 和 ABC , 生成字 CDE 是由这两个基本生成字按照列名运算得到的;
- D_6 有三个基本生成字 ABE, ACF 和 $ABCD$;
- D_7 有三个基本生成字 ABE, ACF, BCG 和 $ABCD$.

一般地, 2^{k-p} 设计不唯一. 如果领域知识知道哪些效应不显著, 那么我们选择一个设计使得可能显著的效应之间不产生混杂; 如果试验资源限制了试验次数, 无法保证所有可能显著的效应都能估计, 就只能从诸多 2^{k-p} 设计中挑选一个相对较好的了. 如何比较两个不同的 2^{k-p} 设计呢? 分辨度 (resolution) 是一个常用的衡量部分实施方案优良性的指标.

用 $A_i(\mathbf{D})$ 表示设计 \mathbf{D} 的生成字中字长为 i 的字的个数, 称

$$W(\mathbf{D}) = \{A_1(\mathbf{D}), A_2(\mathbf{D}), \dots, A_k(\mathbf{D})\}$$

为设计 \mathbf{D} 的字长型 (word length pattern). 在一个设计的字长型中, 所有生成字的最小字长为这个设计的分辨度. 即若当 $i < t$ 时 $A_i(\mathbf{D}) = 0$, 而 $A_t(\mathbf{D}) > 0$, 则 t 为设计 \mathbf{D} 的分辨度. 我们用大写罗马数字来表示设计的分辨度. 例如 \mathbf{D}_4 是分辨度 IV 设计, \mathbf{D}_5 是分辨度 III 设计, \mathbf{D}_6 和 \mathbf{D}_7 都是分辨度 III 设计. 一般地

分辨度 III 设计: 在假定二阶和二阶以上交互效应可以忽略的情况下, 主效应之间没有混杂, 但至少有一个主效应与某个二阶交互效应混杂;

分辨度 IV 设计: 在假定三阶和三阶以上交互效应可以忽略的情况下, 主效应之间、主效应和二阶交互效应之间没有混杂, 但至少有一个主效应与某个三阶交互效应混杂;

分辨度 V 设计: 在假定三阶和三阶以上交互效应可以忽略的情况下, 主效应之间、主效应和二阶交互效应之间, 以及任意两对二阶交互效应之间没有混杂.

分辨度在因子设计中有十分重要的意义. 如果大于 t 阶的效应不存在, 则分辨度为 $2t+1$ 的设计中任何不超过 t 阶的效应都是可估计的.

定义 2.11. 称一个 2^{k-p} 设计 \mathbf{D} 有最大分辨度 (maximum resolution), 如果不存在比 \mathbf{D} 分辨度更高的 2^{k-p} 设计. 设 \mathbf{D}_1 和 \mathbf{D}_2 是两个 2^{k-p} 设计, 如果存在整数 r , 使

$$A_i(\mathbf{D}_1) = A_i(\mathbf{D}_2), \quad 1 \leq i < r, \quad A_r(\mathbf{D}_1) < A_r(\mathbf{D}_2),$$

则称 \mathbf{D}_1 比 \mathbf{D}_2 有较小的低阶混杂 (less aberration). 如果不存在比 \mathbf{D}_1 有更小低阶混杂的 2^{k-p} 设计, 则称 \mathbf{D}_1 为最小低阶混杂 (minimum aberration) 设计.

R 添加包 FrF2 的函数 FrF2() 可以用于生成 2^k 设计的部分实施方案, 函数 aliases() 可以给出该方案的全部别名关系. 例如上述设计中的 \mathbf{D}_5 可由代码

```

1 library(FrF2)
2 fracD5 <- FrF2(nruncs = 8, nfactors = 5, generators = c("ABC", "AB"))
3 fracD5
4 #>   A   B   C   D   E
5 #> 1 -1  1  1 -1 -1
6 #> 2 -1 -1  1  1  1
7 #> 3  1  1 -1 -1  1
8 #> 4  1  1  1  1  1
9 #> 5 -1 -1 -1 -1  1
10 #> 6  1 -1  1 -1 -1
11 #> 7  1 -1 -1  1 -1
12 #> 8 -1  1 -1  1 -1
13 #> class=design, type= FrF2.generators

```

其生成的设计本质上与 D_5 是一致的, 将水平记号 1 替换成 0、-1 替换成 1 即可. 可也在函数 FrF2() 的参数中给出每个因子水平的名字:

```
1 library(FrF2)
2 fracD5 <- FrF2(nrungs = 8, nfactors = 5, generators = c("ABC", "AB"),
3   factor.names
4   = list(A = c(1,0), B = c(1,0), C = c(1,0), D = c(1,0), E = c(1,0)))
5 fracD5
6 #> A B C D E
7 #> 1 1 0 0 1 1
8 #> 2 0 1 0 1 1
9 #> 3 0 0 1 1 0
10 #> 4 1 1 0 0 0
11 #> 5 1 0 1 0 1
12 #> 6 1 1 1 1 0
13 #> 7 0 0 0 0 0
14 #> 8 0 1 1 0 1
15 #> class=design, type= FrF2.generators
```

需要指出的是, FrF2() 中生成字 generator 的定义与本书也不相同, 它的原则是尽可能地用前面的因子表示后面的因子.

2.3 3^k 因子设计及其部分实施

如果一个试验选定了 k 个试验因子, 且每个因子有 3 个水平, 则称这种试验问题的设计为 3^k 因子设计. 3^k 因子试验全部的处理共有 3^k 个, 以大写字母 A, B, \dots 表示因子, 以 0、1 和 2 表示因子的三个水平, 以 k 维向量表示一个处理, 其第 i 维上的取值表示第 i 个因子的水平.

2.3.1 3^2 因子设计与正交表 $L_9(3^4)$

首先看最简单的 3^2 设计, 它的两个试验因子记为 A 与 B , 全部处理共 9 个:

$$(0, 0), (0, 1), (0, 2), (1, 0), (1, 1), (1, 2), (2, 0), (2, 1), (2, 2).$$

两个因子主效应的自由度均为 2, 一个二因子交互效应的自由度为 4. 如果每个处理重复 m 次, 则总自由度为 $9m - 1$, 误差自由度为 $9m - 9$. 以 y_{ijk} 表示处理 (i, j) 的第 k 次重复试验的响应值, 则 3^2 试验的固定效应模型为

$$\begin{cases} y_{ijk} = \mu + \tau_i + \beta_j + (\tau\beta)_{ij} + \varepsilon_{ijk}, & \varepsilon_{ijk} \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2), \\ i = 0, 1, 2, \quad j = 0, 1, 2, \quad k = 1, \dots, m, \\ \sum_{i=0}^3 \tau_i = 0, \quad \sum_{j=0}^3 \beta_j = 0, \\ \sum_{i=0}^2 (\tau\beta)_{ij} = 0, \quad j = 0, 1, 2, \\ \sum_{j=0}^2 (\tau\beta)_{ij} = 0, \quad i = 0, 1, 2. \end{cases} \quad (2.29)$$

它是双因子试验统计模型(2.9)的特例, 它的方差分析与参数估计在2.1.2节已有详细论述.

3^2 设计的试验安排和数据分析可借助于正交表 $L_9(3^4)$. 正交表 $L_9(3^4)$ 有 9 行, 见表2.19. 它的构造规律如下:

- 第一列将 9 次试验等分为三份, 每一份安排一个水平, 称为**三分列**, 记列名为 A ;
- 第二列是将第一列的三个相同的水平再分别一分为三, 称为**九分列**, 记列名为 B ;
- 第三列由第一列和第二列按照运算 $x_1 + x_2 \bmod 3$ 生成, 如

$$0 + 0 = 0 \bmod 3, \quad 1 + 1 = 2 \bmod 3,$$

$$1 + 2 = 0 \bmod 3, \quad 2 + 2 = 1 \bmod 3$$

等等, 记列名为 AB ;

- 第四列由第一列和第二列按照 $2x_1 + x_2 \bmod 3$ 生成, 记列名为 A^2B .

表 2.19: 正交表 $L_9(3^4)$

试验号	A	B	AB	A^2B
1	0	0	0	0
2	0	1	1	1
3	0	2	2	2
4	1	0	1	2
5	1	1	2	0
6	1	2	0	1
7	2	0	1	1
8	2	1	0	2
9	2	2	1	0

A 列和 B 列恰好构成 3^2 设计的全面实施, 设计试验时只需这两列即可. AB 列和 A^2B 列构成因子 A 和因子 B 的交互效应 $A \times B$ 的两个成分, 称它们为 A 列和 B 列的交互效应列. 每列的自由度均为 2, 四列一共 8 个自由度, 恰为诸效应的自由度之和. 表 2.19 还有一个重要性质, 任意两列按照两种模 3 加法运算

$$x_1 + x_2 \pmod{3}, \quad 2x_1 + x_2 \pmod{3} \quad (2.30)$$

得到剩余两列, 称这种关系为 **任意两列的交互效应是其余两列**.

如果表 2.19 的第四列按照

$$x_1 + 2x_2 \pmod{3}$$

生成, 记作 AB^2 , 得到正交表 2.20. 这两张正交表有什么区别呢? 根据正交表同构的定义, 将

表 2.20: 正交表 $L_9(3^4)$

试验号	A	B	AB	AB^2
1	0	0	0	0
2	0	1	1	2
3	0	2	2	1
4	1	0	1	1
5	1	1	2	0
6	1	2	0	2
7	2	0	1	2
8	2	1	0	1
9	2	2	1	0

第四列中水平 1 和 2 互相置换, 可知这是两张互相同构的正交表.

除了用于设计试验方案, 正交表 $L_9(3^4)$ 还可以用来作 3^2 设计的方差分析. 首先按

表 2.21: 正交表 $L_9(3^4)$

试验号	A	B	AB	A^2B	试验结果
1	0	0	0	0	$y_{00\cdot}$
2	0	1	1	1	$y_{01\cdot}$
3	0	2	2	2	$y_{02\cdot}$
4	1	0	1	2	$y_{10\cdot}$
5	1	1	2	0	$y_{11\cdot}$
6	1	2	0	1	$y_{12\cdot}$
7	2	0	2	1	$y_{20\cdot}$
8	2	1	0	2	$y_{21\cdot}$
9	2	2	1	0	$y_{22\cdot}$
自由度	2	2	2	2	
T_0	$y_{00\cdot} + y_{01\cdot} + y_{02\cdot}$	$y_{00\cdot} + y_{10\cdot} + y_{20\cdot}$	$y_{00\cdot} + y_{12\cdot} + y_{21\cdot}$	$y_{00\cdot} + y_{11\cdot} + y_{22\cdot}$	
T_1	$y_{10\cdot} + y_{11\cdot} + y_{12\cdot}$	$y_{01\cdot} + y_{11\cdot} + y_{21\cdot}$	$y_{01\cdot} + y_{10\cdot} + y_{22\cdot}$	$y_{01\cdot} + y_{12\cdot} + y_{20\cdot}$	$T = y\ldots$
T_2	$y_{20\cdot} + y_{21\cdot} + y_{22\cdot}$	$y_{02\cdot} + y_{12\cdot} + y_{22\cdot}$	$y_{02\cdot} + y_{11\cdot} + y_{20\cdot}$	$y_{02\cdot} + y_{10\cdot} + y_{21\cdot}$	

表2.21计算诸数据的和, 利用2.1.2节给出的两因子试验平方和计算公式, 可得

$$\left\{ \begin{array}{l} SS_A = 3m \sum_{i=0}^2 (\bar{y}_{i..} - \bar{y}\ldots)^2 = \frac{T_{A_0}^2 + T_{A_1}^2 + T_{A_2}^2}{3m} - \frac{T^2}{9m}, \\ SS_B = 3m \sum_{j=0}^2 (\bar{y}_{.j} - \bar{y}\ldots)^2 = \frac{T_{B_0}^2 + T_{B_1}^2 + T_{B_2}^2}{3m} - \frac{T^2}{9m}, \\ SS_{AB} = \frac{T_{(AB)_0}^2 + T_{(AB)_1}^2 + T_{(AB)_2}^2}{3m} - \frac{T^2}{9m}, \\ SS_{A^2B} = \frac{T_{(A^2B)_0}^2 + T_{(A^2B)_1}^2 + T_{(A^2B)_2}^2}{3m} - \frac{T^2}{9m}, \\ SS_{A \times B} = SS_{AB} + SS_{A^2B}. \end{array} \right. \quad (2.31)$$

其中, $T_{(.).i}$ 分别表示表2.21中对应列的 T_i . 每列的自由度都为 2, 交互效应 $A \times B$ 的自由度为 4, 被分解为两个自由度均为 2 的部分. 为了检验因子 A 的效应是否显著, 可利用 F 统计量

$$F = \frac{SS_A/2}{SS_E/f_E},$$

当原假设 A 的效应不显著成立时, 该统计量服从自由度为 $(2, f_E)$ 的 F 分布, 这里 f_E 表示误差的自由度. 其余各列的显著性也可以构造相应的 F 统计量来检验, 作为习题.

在2.2节中, 我们以 “ AB ” 表示两因子交互效应, 原因在于二水平因子交互效应的自由度为 1. 两个三水平因子的交互效应自由度为 4, 因而我们以 “ $A \times B$ ” 表示, AB 和 A^2B 分别表示它的两个互相正交的部分.

2.3.2 3^k 因子设计与正交表 $L_{3^k}(3^{\frac{3^k-1}{3-1}})$

对于 3^k 因子试验而言, 每个因子的主效应的自由度为 2; 有 C_k^2 个二因子交互效应, 每个的自由度为 $(3-1)^2 = 4$; 有 C_k^3 个三因子交互效应, 每个的自由度为 $(3-1)^3 = 8$; 一般地, 有 $C_k^h (h \leq k)$ 个 h 因子交互效应, 每个的自由度为 $(3-1)^h = 2^h$. 诸效应的自由度之和为

$$\sum_{h=1}^k C_k^h 2^h = 3^k - 1.$$

如果每个处理均重复 m 次试验, 则总偏差平方和的自由度为 $3^k m - 1$, 误差自由度为

$$(3^k m - 1) - (3^k - 1) = 3^k(m - 1).$$

以 3^3 因子试验为例, 以 A, B, C 分别表示三个因子的主效应, $A \times B, B \times C, A \times C$ 分别表示三个二因子交互效应, $A \times B \times C$ 表示三因子交互效应. 每个因子的主效应的自由度为 2, 二因子交互效应的自由度为 4, 三因子交互效应的自由度为 8. 如果每个处理组合均重复试验 m 次, 则总自由度为 $3^3 m - 1$, 误差自由度为 $3^3(m - 1)$.

下面讨论用于设计和分析 3^k 因子试验的正交表 $L_{3^k}(3^{\frac{3^k-1}{3-1}})$. 正交表 $L_{3^k}(3^{\frac{3^k-1}{3-1}})$ 可按照下述步骤构造得到:

Step 1 构造三分列, 该列的前 3^{k-1} 行置水平 0, 中间 3^{k-1} 行置水平 1, 后 3^{k-1} 行置水平 2, 列名记作 A ;

Step 2 构造九分列, 列名记作 B , 并按照(2.30)式中的两种两种模 3 加法运算构造交互效应列 AB 和 A^2B ;

...

Step k 构造 3^k 分列, 该列的各行按照 $0, 1, 2, 0, 1, 2, \dots$ 的次序交替排列, 列名记作 K , 并利用(2.30)式中的两种模 3 加法运算依此得到 3^k 分列与前面各列的交互效应列 $AK, A^2K, BK, B^2K, \dots$.

其中, 三分列、九分列、 2^k 分列统称为**基本列**.

例 2.9. 与 3^3 设计对应的正交表是 $L_{27}(3^{13})$, 它一共有 27 行 13 列, 第一列、第二列和第五列为 3^3 设计的全面实施, 其余 10 列为交互效应列. 其构造步骤如下:

Step 1 构造三分列 $A = [0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2, 2]^T$;

Step 2 构造九分列 $B = [0, 0, 0, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 2, 2, 2, 0, 0, 0, 1, 1, 1, 2, 2, 2]^T$, 并利用两种模 3 加法运算得到第三列 AB 和第四列 A^2B ;

Step 3 构造二十七分列 $C = [0, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 1, 2, 0, 1, 2]^T$, 并利用两种模 3 加法运算依此得到第六列 AC 、第七列 A^2C 、第八列 BC 、第九列 B^2C 、第十列 ABC 、第十一列 A^2B^2C 、第十二列 A^2BC 和第十三列 AB^2C .

3^3 因子设计的固定效应模型是(2.13)式的特列, 它的统计分析在2.1.3节已经叙述过了. A 列、 B 列和 C 列即可用于安排试验, 也可用于计算三个主效应的偏差平方和. AB 和 A^2B 两列可用于计算交互效应 $A \times B$ 的偏差平方和, 即

$$SS_{A \times B} = SS_{AB} + SS_{A^2B};$$

AC 和 A^2C 两列可用于计算交互效应 $A \times C$ 的偏差平方和, 即

$$SS_{A \times C} = SS_{AC} + SS_{A^2C};$$

BC 和 B^2C 两列可用于计算交互效应 $B \times C$ 的偏差平方和, 即

$$SS_{B \times C} = SS_{BC} + SS_{B^2C};$$

ABC 、 A^2B^2C 、 A^2BC 和 AB^2C 四列可用于计算交互效应 $A \times B \times C$ 的偏差平方和, 即

$$SS_{A \times B \times C} = SS_{ABC} + SS_{A^2B^2C} + SS_{A^2BC} + SS_{AB^2C}.$$

各列的偏差平方和计算公式与 3^2 中一样, 只是试验次数不同. 以试验因子 A 为例, 其偏差平方和计算公式为

$$SS_A = \frac{T_{A_0}^2 + T_{A_1}^2 + T_{A_2}^2}{9m} - \frac{T^2}{27m}$$

其中, T_{A_0} 表示 A 列中水平为 0 对应的数据的总和, T_{A_1} 表示 A 列中水平为 1 对应的试验数据的总和, T_{A_2} 表示 A 列中水平为 2 对应的试验数据的总和, m 表示每个处理的重复次数, T 表示所有试验数据的总和.

称一个列名为**标准化列名**, 如果它最后一个字母的指数是 1. 反之, 如果列名的最后一个字母的指数不是 1, 则称为**非标准化列名**. 称一组列名为**完备的**, 如果该组列名包含所有基本列的列名和任意两列的列名运算得到的列名. 称一组列名为**标准化完备列名**, 如果它们既是标准化的又是完备的. 按照前面介绍的标准化方法构造的正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 和 $L_{3^k}(3^{\frac{3^k-1}{3-1}})$ 的列名都是标准化完备列名, 而从这些正交表中抽取部分列得到的正交表的列名则不是完备的.

例 2.10. 表 2.19 的列名都是标准化列名; 表 2.20 中的列名 AB^2 为非标准化列名.

- (1) $L_8(2^7)$ 的列名组成的集合 $\{A, B, AB, C, AC, BC, ABC\}$ 是标准化完备的;
- (2) 从正交表 $L_8(2^7)$ 中挑选出的列名集合 $\{A, BC, ABC\}$ 是不完备的, 它虽然对列名运算封闭, 但是没有包含基本列名 B 和 C ;
- (3) $L_9(3^4)$ 的列名组成的集合 $\{A, B, AB, A^2B\}$ 是标准化完备的.

在 3^k 因子设计中, 标准化列名与非标准化列名可通过列名的平方互相转化:

$$(A^2B)^2 = A^4B^2 = AB^2, \quad (AB^2)^2 = A^2B^4 = A^2B.$$

列名的平方运算恰好对应水平置换: $0 \rightarrow 0, 1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1$. 这表明标准化列名与非标准化列名对应的正交表互相同构. 需要注意的是, 二水平正交表的列名运算与三水平正交表的列名运算是不同的, 二水平正交表列名运算是对代数运算的基础上对幂指数进行模 2 运算, 而三水平正交表的列名运算是对代数运算的基础上对幂指数进行模 3 运算.

2.3.3 3^k 因子试验的部分实施

k 越大, 3^k 设计中的高阶交互效应越多, 全面实施次数也越多, 往往只能采用部分实施. 如果有高阶交互效应不显著的先验信息, 那么采取部分实施不存在逻辑问题. 如果没有高阶交互效应不显著的先验信息, 部分实施不可避免地造成效应混杂, 这时通常假定:

- 实际问题中, 往往只有少部分两因子交互效应存在, 而其它两因子交互效应和高阶因子交互效应都不存在, 此即**效应稀疏原则**;
- 受试验资源限制, 只能选择一些处理进行试验. 这时, 统计学家们的原则是尽量考虑低阶交互效应而放弃高阶交互效应, 即**效应有序原则**.

关于效应稀疏原则和效应有序原则, 2.4节还将继续讨论.

例 2.11. 当已知 3^3 设计的因子间的交互效应都不存在时, 可使用正交表 $L_9(3^4)$ 安排试验, 有两种可供选择的表头设计方案:

列名	A	B	AB	A^2B	定义关系	分辨度
方案一	A	B	C		$\mathbf{I} = ABC^2$	III
方案二	A	B		C	$\mathbf{I} = A^2BC^2$	III

这里 \mathbf{I} 表示全部由 0 组成的列. 表中还有一个空白列, 在作方差分析时, 这个列的平方和可以作为误差平方和. 表中两个方案都只包含 3^3 设计的 9 个试验点, 都称为 3^3 试验的一个 $1/3$ 实施, 或 3^3 试验的一个 3^{3-1} 部分因子设计. 它们的分辨度都为 III(字的平方也只能算一个字). 当 3^4 设计的因子间的交互效应不存在时, 可以采用正交表 $L_9(3^4)$ 安排试验, 表头设计如下:

列名	A	B	AB	A^2B	定义关系	分辨度
因子	A	B	C	D	$\mathbf{I} = ABC^2 = A^2BD^2$	III

表中已没有空白列, $L_9(3^4)$ 的 8 个自由度全部用来估计因子主效应了. 如果要作方差分析, 需要作重复试验, 才能计算误差平方和. 这个设计只包含 3^4 设计的 9 个试验点, 称为 3^4 试验的一个 $1/9$ 实施, 或 3^4 试验的一个 3^{4-2} 部分因子设计.

3^k 试验的 3^{k-p} 部分因子设计的别名关系比较复杂, 受篇幅和作者水平的限制, 这里就不讨论了.

2.4 正交设计的一般讨论

2.2节和**2.3节**分别从 2^k 设计和 3^k 设计的角度引入了正交表的概念，本节将从多因子设计的部分实施的角度，介绍如何利用正交表设计试验方案和分析试验数据。

2.4.1 正交表的基本性质

定义**2.7**给出了正交表的定义。一般地，一个正交表 $L_n(q_1^{m_1} \times \cdots \times q_r^{m_r})$ 是一个 $n \times m$ 的矩阵，其中 $m = m_1 + \cdots + m_r$ ， $q_i \geq 2$ 为正数， m_i 个列有 q_i 个不同的符号，使得任意两列组成的符号对出现的次数相同。记号 $L_n(q_1^{m_1} \times \cdots \times q_r^{m_r})$ 中各参数的含义为：

L : 表示正交表；

n : 正交表的行数，也表示试验总数；

q_i : 列中不同符号的个数，对应该列可安排因子的水平数；

m_i : 包含 q_i 个不同符号的列数，表示最多能容纳的 q_i 水平因子的个数；

r : 表中不同水平数的数目。

称所有的因子水平数相同的正交表为**对称正交表**或**等水平正交表**。若对称正交表的水平数为 q ，则记作 $L_n(q^m)$ ，**2.2节**和**2.3节**介绍的正交表都是对称正交表。称

$$L_{q^k}(q^{\frac{q^k-1}{q-1}}), \quad k = 2, 3, \dots, \quad (2.32)$$

型对称正交表为**完备正交表**，用这类正交表安排试验可以考察因子间的交互效应。 $L_9(3^4)$ 和 $L_8(2^7)$ 都是完备正交表。前面已经提到，完备正交表在行数不变的情况下不能增加列。当正交表 $L_n(q_1^{m_1} \times \cdots \times q_r^{m_r})$ 中 $r > 1$ 时，称它为**非对称正交表**或**混合水平正交表**。可通过**对称正交表的并列**得到混合正交表。例如，把正交表 $L_8(2^7)$ 的 A 列和 B 两列构成的四对水平组合替换成4个水平： $(0, 0) \rightarrow 0, (0, 1) \rightarrow 1, (1, 0) \rightarrow 2, (1, 1) \rightarrow 3$ ，并删去它们的交互效应列 AB ，得到混合水平正交表 $L_8(4 \times 2^4)$ 。

表 2.22: 混合水平正交表 $L_8(4 \times 2^4)$

No.	1	2	3	4	5
1	0	0	0	0	0
2	0	1	1	1	1
3	1	0	0	1	1
4	1	1	1	0	0
5	2	0	1	0	1
6	2	1	0	1	0
7	3	0	1	1	0
8	3	1	0	0	1

利用正交表 $L_n(q_1^{m_1} \times \cdots \times q_r^{m_r})$ 设计试验时, 最多可安排 m_1 个 q_1 水平因子、 m_2 个 q_2 水平因子、 \dots , 总共做 n 次试验. 可从以下两个网站中查阅更多的正交表:

- <http://www.research.att.com/~njas/oadir/>;
- <http://support.sas.com/techsup/technote/ts723.html>.

正交表的正交性使得其安排的试验方案具有**均衡分散**和**整齐可比**的特点. 均衡分散是指挑选出来的处理在全部处理中的分布比较均匀; 整齐可比是指每一个因子的各水平间具有可比性. 例如, 利用正交表2.19的前三列来安排例2.1中的试验, 得到试验方案:

			B_1	C_1				B_1	C_2				B_1	C_3			
			A_1	B_2	C_2				A_2	B_2	C_3				A_3	B_2	C_1
			B_3	C_3				B_3	C_1				B_3	C_2			

在这个试验方案中,

- 结合图2.3和表2.19的前三列可以看出, 在立方体中, 任一平面内都包含 3 个试验点, 任一直线上都包含 1 个试验点, 即试验点是均衡分散的.
- 当比较 A 因子不同水平时, B 因子不同水平的效应相互抵消, C 因子不同水平的效应也相互抵消. 所以 A 因子 3 个水平间具有可比性. 同样, B 、 C 因子 3 个水平间亦具有综合可比性. 这体现了试验方案的整齐可比性.

利用正交表设计试验时, 最关键的是选择合适的正交表并进行表头设计. 自由度原则和避免混杂原则是表头设计需要考虑的两个基本原则.

自由度原则 因子主效应和交互效应的自由度是指其偏差平方和作为统计量所服从的 χ^2 分布的自由度, 例如误差的自由度就是误差平方和 SS_E 所服从 χ^2 分布的自由度. 因子主效应的自由度为该因子水平数减一, 交互效应的自由度为该交互效应中各因子主效应自由度的乘积. 定义正交表的自由度为试验次数减一, 表中各列的自由度为该列的水平数减一. 表头设计的自由度原则有以下三条:

- (1) 因子主效应的自由度应等于因子所在列的自由度;
- (2) 交互效应的自由度应等于所在列的自由度或其之和;
- (3) 所有因子主效应与交互效应的自由度之和不能超过所选正交表的自由度.

避免混杂原则 用正交表安排试验, 如果一列上出现的因子主效应和交互效应不止一个, 当该列的效应显著时, 无法识别是哪个因子(或交互效应)显著, 即造成了因果关系的混乱, 称这种现象为**混杂现象** (confounded, aliased). 表头设计时应尽量避免出现混杂现象.

实际工作中, 由于经费、时间、人力等试验资源的限制, 试验次数可能成了一个硬约束. 如果试验之前能够明确哪些效应不显著, 则部分实施也有可能识别出所有显著的效应.

例 2.12. 为了提高某化工产品的转化率, 试验者选择了影响转化率的 4 个主要因子

- A : 催化剂种类, $A_1 = 1$, $A_2 = 2$;
 B : 反应时间, $B_1 = 1.5\text{h}$, $B_2 = 2.5\text{h}$;

C : 反应温度, $C_1 = 80^\circ\text{C}$, $C_2 = 90^\circ\text{C}$;

D : 加减量, $D_1 = 5\%$, $D_2 = 7\%$.

这是一个 2^4 设计, 如果采用 $L_{16}(2^{15})$ 设计, 虽然可以估计出所有的效应, 但试验次数至少需要 16 次. 由于经费所限, 需要试验次数更少的试验方案.

如果经验告诉我们, 没有三因子和四因子交互效应, D 和其它三个因子没有交互效应, 而 A, B, C 之间可能有交互效应. 也就是说, 总共需要考虑 A, B, C, D 四个主效应和 AB, AC, BC 三个两因子交互效应, 共 7 个自由度. 我们知道正交表 $L_8(2^7)$ 的自由度恰为 7, 能否利用正交表 $L_8(2^7)$ 来规划这个试验呢?

回顾 $L_8(2^7)$ 的交互效应表 2.11, 建立如下的列号与各因子主效应及交互效应的对应关系:

列号	1	2	3	4	5	6	7	定义关系	分辨度
方案一	A	B	AB	C	AC	BC	D	$\mathbf{I} = ABCD$	IV
			\Updownarrow		\Updownarrow	\Updownarrow	\Updownarrow		
			CD		BD	AD	ABC		

从表中可以看出, 交互效应 AB 与 CD 混杂、 AC 与 BD 混杂、 BC 与 AD 混杂、 D 与 ABC 混杂, 但经验告诉我们 CD, BD, AD 以及 ABC 不显著, 因而实际上并不存在混杂效应, 该方案是可行的.

如果试验者在试验之前无法明确哪些主效应和交互效应可以忽略, 则混杂现象在部分实施中是不可避免的. 这种情况下统计学家们建议采取忽略高阶交互效应、保证主效应和低价交互效应的效应稀疏原则和有序原则, 即

- **效应稀疏原则** (effect sparsity principle): 在因子试验中, 重要效应的个数不会太多;
- **效应有序原则** (hierarchical ordering principle): 主效应比交互效应重要, 低阶交互效应比高阶交互效应重要, 同阶交互效应的重要性相同.

效应稀疏原则和效应有序原则不是来自工程实践的先验信息, 而是一种指导性原则. 首先保证估计主效应, 其次保证估计低阶交互效应, 让混杂发生在次要的交互效应之间, 这种办法称为混杂技术.

例 2.13. 继续讨论例 2.12 中的试验设计问题, 下面是另一种 2^{4-1} 方案:

列号	1	2	3	4	5	6	7	定义关系	分辨度
方案二	A	B	C	D	AD	BD	CD	$\mathbf{I} = ABC$	III
	\Updownarrow	\Updownarrow	\Updownarrow						
	BC	AC	AB						

若二阶交互效应可能存在, 例 2.12 中的方案一可以估计 4 个因子的主效应, 但所有的二阶交互效应互相混杂. 方案二只能估计 D 的主效应和三个二阶交互效应. 按照效应稀疏原则和效应有序原则, 我们应该选择方案一, 优先保证主效应的估计.

一般地, 从一个正交表 $L_n(q^m)$ 中取出 s 列组成的 C_m^s 个试验方案可能有不同的效果. 比较不同的正交设计是试验设计领域的研究热点, 现有的一些比较准则包括最大分辨度准则、最小低阶混杂准则、纯净效应、估计容量、均匀性等. 2.2.4节已经介绍了最大分辨率准则和最小低阶混杂准则, 第四章将介绍均匀性准则. 至于其它准则本书就不再介绍了, 感兴趣的读者可自行查阅相关文献.

2.4.2 等水平试验的正交设计

等水平正交表的使用在2.2节和2.3节中已经介绍过了. 本节再通过两个例子来介绍无交互效应和有交互效应情形下等水平正交表的使用方法.

例 2.14. 考虑例2.1中的试验, 假设根据过去的经验, 所有交互效应都不显著. 共有 3 个三水平因子, 效应的自由度等于 3 个三水平因子主效应自由度的和, 即 $(3-1)+(3-1)+(3-1) = 6$, 根据自由度原则, 需要选择一张行数不小于 7 的正交表来安排试验. 由于不需考虑交互效应, 所选正交表的列数不小于 3 即可. 我们选用正交表 $L_9(3^4)$ 的前三列安排试验, 试验方案和试验结果列于表2.23中.

表 2.23: 试验方案与结果

试验号	A	B	C	转化率 (CP)
1	0(80°C)	0(90min)	0(5%)	31%
2	0(80°C)	1(120min)	1(6%)	54%
3	0(80°C)	2(150min)	2(7%)	38%
4	1(85°C)	0(90min)	1(6%)	53%
5	1(85°C)	1(120min)	2(7%)	49%
6	1(85°C)	2(150min)	0(5%)	42%
7	2(90°C)	0(90min)	2(7%)	57%
8	2(90°C)	1(120min)	0(5%)	62%
9	2(90°C)	2(150min)	1(6%)	64%
T_1	123%	141%	135%	
T_2	144%	165%	171%	
T_3	183%	144%	144%	
m_1	41%	47%	45%	
m_2	48%	55%	57%	
m_3	61%	48%	48%	
R	20%	8%	12%	

一、试验结果的直观分析

本例试验目的是增加转化率, 转化率越大表明水平组合越好. 9 次试验结果中以第 9 号试验的转化率为最好, 高达 64%, 相应的水平组合是当前最好的水平搭配. 通过直观分析, 也许能找到更好的水平搭配. 其步骤如下:

(A) 计算诸因子在每个水平下的平均转化率和极差. 以表 2.23 的第一列为例, “ T_1 ” 行给出在反应温度 80°C 下三次试验转化率之和,

$$T_1 = 32 + 54 + 38 = 123,$$

其均值

$$m_1 = T_1/3 = 123/3 = 41,$$

类似地, 在反应温度 85°C 和 90°C 下三次试验的平均转化率为 48 和 61, 极差

$$R = \max\{41, 48, 61\} - \min\{41, 46, 61\} = 20$$

列在表的最后一行. 类似地计算应用于因子 B 和 C , 详见表 2.23.

(B) 画平均转化率图. 将 3 个因子的 3 个平均转化率点在一张图上, 立即有如下的结论:

- 温度越高, 转化率越高, 以 90°C 为最好, 还应进一步探索温度更高的情况;
- 反应时间以 120min 转化率最高;
- 用碱量以 6% 转化率最高.

综合起来以处理 (A_3, B_2, C_2) 最好.

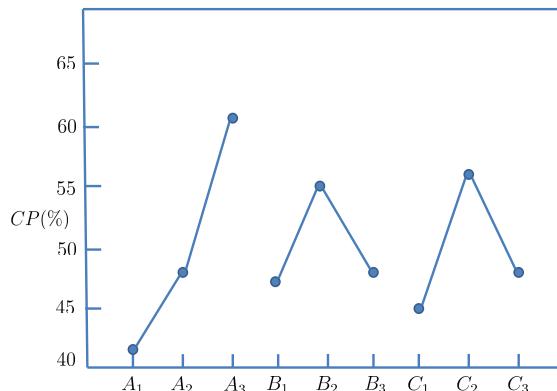


图 2.10: 转化率与三因子关系图

(C) 将因子对响应的影响排序. 直观上来看, 一个因子对转化率影响大, 那么这个因子不同的水平相应的转化率之间差异就大. 反映在图上, 点散布范围大的因子是主要的, 散布范围小的是次要的. 从图 2.10 易看出主次关系是 $A > C > B$. 其实, 这个主次关系可用极差 R 来表达, 由表 2.23 的最后一行, A 、 B 、 C 三个因子的极差分布为 20、8、12, 由此即可将它们对转化率的影响排序为 $A > C > B$.

(D) 追加试验. 通过上述分析, 推断最佳水平组合为 (A_3, B_2, C_2) . 可惜, 在 9 次试验中没有包含这个水平组合, 故要追加试验. 最简单的方法是在处理 (A_3, B_2, C_2) 处补充几次试验, 看看平均转化率是否高于已作的 9 次试验.

通过上述分析可以看出, 利用直观分析可以获得最佳或满意的水平组合, 还可以区分因子对响应影响的主次.

二、固定效应模型与参数估计

直观分析是否合理, 还需要定量的分析来验证. 根据试验者的经验, 3 个因子之间没有交互效应, 令因子 A 的 3 个水平的主效应为 τ_1, τ_2, τ_3 , B 和 C 的 3 个水平的主效应分别 $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ 和 $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$, y_{ijk} 表示在水平组合 (A_i, B_j, C_k) 的转化率, 于是固定效应模型为:

$$\begin{cases} y_{ijk} = \mu + \tau_i + \beta_j + \gamma_k + \varepsilon_{ijk}, & \varepsilon_{ijk} \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(0, \sigma^2), \\ i = 1, 2, 3, \quad j = 1, 2, 3, \quad k = 1, 2, 3, \\ \tau_1 + \tau_2 + \tau_3 = 0, \\ \beta_1 + \beta_2 + \beta_3 = 0, \\ \gamma_1 + \gamma_2 + \gamma_3 = 0. \end{cases} \quad (2.33)$$

表 2.23 中的 9 次试验数据可用矩阵表示为

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_{111} \\ y_{122} \\ y_{133} \\ y_{212} \\ y_{223} \\ y_{212} \\ y_{313} \\ y_{321} \\ y_{332} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \tau_1 \\ \tau_2 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{111} \\ \varepsilon_{122} \\ \varepsilon_{133} \\ \varepsilon_{212} \\ \varepsilon_{223} \\ \varepsilon_{212} \\ \varepsilon_{313} \\ \varepsilon_{321} \\ \varepsilon_{332} \end{pmatrix} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.34)$$

由最小二乘法可得

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = (50, -9, -2, -3, 5, -5, 7)^T,$$

即 $\hat{\mu} = 50$,

$$\hat{\tau}_1 = -9, \quad \hat{\tau}_2 = -2, \quad \hat{\tau}_3 = -(\hat{\tau}_1 + \hat{\tau}_1) = 11,$$

$$\hat{\beta}_1 = -3, \quad \hat{\beta}_2 = 5, \quad \hat{\beta}_3 = -(\hat{\beta}_1 + \hat{\beta}_2) = -2,$$

$$\hat{\gamma}_1 = -5, \quad \hat{\gamma}_2 = 7, \quad \hat{\gamma}_3 = -(\hat{\gamma}_1 + \hat{\gamma}_2) = -2,$$

利用这些估计值来预测最佳水平组合 (A_3, B_2, C_2) 的响应值:

$$\hat{y}_{322} = \hat{\mu} + \hat{\tau}_3 + \hat{\beta}_2 + \hat{\gamma}_2 = 50 + 11 + 5 + 7 = 73,$$

确实比所有试验结果都好.

最优回归设计认为, 应以试验获得未知参数的估计的精度来衡量试验设计的有效性. 下面来看 $\hat{\beta}$ 的协方差阵. 由回归分析理论可知 $\hat{\beta}$ 的协方差矩阵为

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} = \sigma^2 \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{2}{9} & -\frac{1}{9} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{9} & \frac{2}{9} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{2}{9} & -\frac{1}{9} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{9} & \frac{2}{9} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{9} & -\frac{1}{9} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{9} & \frac{2}{9} \end{pmatrix}$$

这表明

$$\text{Var}(\hat{\mu}) = \text{Var}(\hat{\tau}_i) = \text{Var}(\hat{\beta}_i) = \text{Var}(\hat{\gamma}_i) = \frac{2}{9}\sigma^2, i = 1, 2,$$

$$\text{Cov}(\hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2) = \text{Cov}(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2) = \text{Cov}(\hat{\gamma}_1, \hat{\gamma}_2) = -\frac{1}{9}\sigma^2,$$

从而

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\tau}_3) &= \text{Var}(\hat{\tau}_1 + \hat{\tau}_2) \\ &= \text{Var}(\hat{\tau}_1) + \text{Var}(\hat{\tau}_2) + \text{Cov}(\hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2) \\ &= \left(\frac{2}{9} + \frac{2}{9} - 2 \times \frac{1}{9} \right) \sigma^2 = \frac{2}{9}\sigma^2. \end{aligned}$$

类似地,

$$\text{Var}(\hat{\beta}_3) = \frac{2}{9}\sigma^2, \quad \text{Var}(\hat{\gamma}_3) = \frac{2}{9}\sigma^2,$$

在 A_1 的平均转化率为 $\mu_{A_1} = \mu + \tau_1$, 它由 “ m_1 ” 行的值 $\hat{\mu}_{A_1} = \hat{\mu} + \hat{\tau}_1$ 估计, 易知

$$\text{Var}(\hat{\mu}_{A_1}) = \text{Var}(\hat{\mu} + \hat{\tau}_1) = \frac{1}{3}\sigma^2,$$

类似地, $\text{Var}(\hat{\mu}_{A_1}) = \text{Var}(\hat{\mu}_{A_3}) = \dots = \text{Var}(\hat{\mu}_{C_3}) = \frac{1}{3}\sigma^2$. σ^2 的估计由回归分析理论给出,

$$\hat{\sigma}^2 = \mathbf{y}^T (\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T) \mathbf{y} / (9 - 7) = 18/2 = 9.$$

从而 $\hat{\sigma} = 3$. 由此可见, 虽然试验方案中每个水平组合只做了一次试验, 但参数估计的效果相当于每个水平组合都重复了 3 次. 这一结果充分显示了正交设计的高效率.

二、方差分析

考虑反应温度 A 对转化率是否有显著的影响，就是检验：

$$H_0^A : (\tau_1, \tau_2, \tau_3) = \mathbf{0}, \quad H_1^A : (\tau_1, \tau_2, \tau_3) \neq \mathbf{0}.$$

利用方差分析和 F 验，不难获得有关的 F 统计量，由于正交表的特殊结构，使得有关计算平方和公式变得十分容易和简单，这里利用定义来计算偏差平方和、总平方和

$$\bar{y} = \frac{1}{9} \sum_{i=1}^9 y_i = 50, \quad SS_T = \sum_{i=1}^9 (y_i - \bar{y})^2 = 984.$$

因子 A 的平方和是它们的 3 个均值， m_1^A, m_2^A, m_3^A 的偏差平方和乘以 3，因为每个均值是由 3 次试验的结果平均而得，即

$$\begin{aligned} SS_A &= 3[(m_1^A - \bar{y})^2 + (m_2^A - \bar{y})^2 + (m_3^A - \bar{y})^2] \\ &= 3[(41 - 50)^2 + (48 - 50)^2 + (61 - 50)^2] = 618. \end{aligned}$$

类似的，由 B 和 C 的均值可算得 $SS_B = 114, SS_C = 234$. 误差平方和 SS_E 可通过平方和分解公式获得

$$SS_E = SS_T - SS_A - SS_B - SS_C = 984 - 618 - 114 - 234 = 18.$$

于是获得方差分析表 2.24. 可以看到，只有因子 A 在水平 $\alpha = 0.05$ 下显著。因子 B 和因子

表 2.24: 转化率试验的方差分析表

方差来源	自由度	平方和	均方	F	p 值
A	2	618	309	34.33	0.0283
B	2	114	57	6.33	0.1364
C	2	234	117	13.00	0.0714
误差	2	18	9		
总和	8	984			

C 在 $\alpha = 0.05$ 下均不显著。假设检验理论告知，检验不显著不一定意味着该因子对响应没有显著影响，可能是试验数目太少，使得 F 检验的敏感度较差，这一问题，在试验设计中十分普遍，故有时通过提高 α 值来解决，例如取 $\alpha = 0.10$ 或甚至 $\alpha = 0.20$. 所以直观分析有时反而比方差分析能给出更合理的结论。

四、回归模型

本试验中，3 个因子都是定量因子，响应值 y 也是定量的，故可以用回归模型来建模。最直接的想法是用线性回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 A + \beta_2 B + \beta_3 C + \varepsilon$$

来拟合，相应的回归方程为

$$\hat{y} = -131 + 2.00A + 0.017B + 1.50C.$$

检验 3 个因子的线性项是否显著的 t 统计量分别为

$$t_A = 2.85, \quad t_B = 0.14, \quad t_C = 0.43,$$

相应的 p 值

$$p_A = 0.036, \quad p_B = 0.892, \quad p_C = 0.687.$$

只有 A 是线性显著的。注意到 p_B, p_C 都相当大，于是进一步考虑二次模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 A + \beta_2 B + \beta_3 C + \beta_{11} A^2 + \beta_{22} B^2 + \beta_{33} C^2 + \beta_{12} AB + \beta_{13} AC + \beta_{23} BC + \varepsilon$$

用回归分析中筛选变量的技术，并将数据中心化，得回归方程

$$\hat{y} = 62 + 2.00(A - 85) - 0.00833(B - 120)^2 - 10.5(C - 6)^2$$

其 p 值为 $p_A = 0.001, p_B = 0.021, p_C = 0.006$ ，均十分显著，全相关系数 $R^2 = 94.8\%$ ，残差标准差 $s = 3.194$ ，均属合理范围。用方程拟合的回归方程来预测最佳水平组合就是对 \hat{y} 求极大，显然，当 $A = 90, B = 120, C = 6$ 时 \hat{y} 达到极大，相应的 y 的极大估计值为 72%，与方差分析模型一致。

例 2.15. 考虑例 2.12 中的试验，该试验是希望提高转化率，其值越大越好。假设根据经验，认为可能存在交互效应 AB 和 AC 。

如果全部交互效应都显著，则需要采用正交表 $L_{16}(2^{15})$ 。由于经验表明只存在两个二因子交互效应，采用 2^{4-1} 实施即可。由于交互效应 CD, BD, AD 均不显著，因而采用例 2.12 提供的方案一可以达到要求。在试验安排时，只需将 A, B, C 和 D 所在的四列换算成实际水平即可，试验方案和试验结果见表 2.25。

一、试验结果的直观分析

仿表 2.23 计算 m_1, m_2 和 R ，其结果列于表 2.25 的下半部分。需要说明的是， m_1 和 m_2 的值对 A, B, C, D 所在的四列反映了四个因子分别在两个水平下的均值，而 AB 和 AC 所在的两列的 m_1 和 m_2 是没有统计意义的，但由它们计算的极差 R 是有统计意义的，就是 2.2.2 节定义的效应的估计，因此仍可以用 R 的值来衡量四个因子以及其交互效应的主次关系。主次关系如下：

$$D > A > AC > C > B > AB.$$

直观来看，第 7 号试验的转化率最高，该试验条件为 (A_2, B_2, C_1, D_1) ，其中 D 因子的极差 $R_D = 7.25$ 最大，表明加减量对转化率影响最大，其次是催化剂种类 A 对转化率的影响。主

表 2.25: 2^4 因子转化率试验方案

试验号	$A(1)$	$B(2)$	$AB(3)$	$C(4)$	$AC(5)$	$D(7)$	转化率/%
1	1	1(1.5h)	1	1(80°C)	1	1	82
2	1	1(1.5h)	1	2(90°C)	2	2	78
3	1	2(2.5h)	2	1(80°C)	1	2	76
4	1	2(2.5h)	2	2(90°C)	2	1	85
5	2	1(1.5h)	2	1(80°C)	2	2	83
6	2	1(1.5h)	2	2(90°C)	1	1	86
7	2	2(2.5h)	1	1(80°C)	2	1	92
8	2	2(2.5h)	1	2(90°C)	1	2	79
m_1	80.25	82.25	82.75	83.25	80.75	86.25	
m_2	85.00	83.00	82.50	82.00	84.50	79.00	
R	4.75	0.75	0.25	1.25	3.75	7.25	

效应 B 和交互效应 AB 的极差都很小, 表明它们对提高转化率不起显著作用. 从各因子的平均转化率大小来看, (A_2, B_2, C_1, D_1) 也是最好的试验条件.

二、试验结果的方差分析

本试验的方差分析表列于表 2.26. 从表中可以看出, 交互效应 AB 的 p 值 0.7952 最大, 其次是因子 B 的 p 值 0.5000 也较大, 然后就是因子 C 的 p 值 0.3440. 可以断定交互效应 AB 是不显著的, 但因子 B 和 C 的显著性还需要进一步考察, 方法是把最不显著的 AB 删除后再重新作方差分析. 新的方差分析表明因子 B 是不显著的, 需要剔除. 剔除 B 后得到的方差分析表见表 2.27. 从该表可以看到, D, A, AC, C 的 p 值依次为 0.0014, 0.0048, 0.0094, 0.1411, 可以认为它们都是显著的.

表 2.26: 2^4 因子转化率试验方差分析表

方差来源	平方和	自由度	均方	F 值	p 值
A	45.125	1	45.125	40.11	0.0997
B	1.125	1	1.125	1.00	0.5000
C	3.125	1	3.125	2.78	0.3440
D	105.125	1	105.125	93.44	0.0656
AB	0.125	1	0.125	0.11	0.7952
AC	28.125	1	28.125	25.00	0.1257
误差	1.125	1	1.125		
总和	183.875	7			

下面介绍如何判断最佳水平组合. 由于因子 D 和 A 最显著, 从它们两个水平的平均响

表 2.27: 剔除 B 、 AB 后的方差分析表

方差来源	平方和	自由度	均方	F 值	p 值
A	45.125	1	45.125	57.00	0.0048
C	3.125	1	3.125	3.95	0.1411
D	105.125	1	105.125	132.79	0.0014
AC	28.125	1	28.125	35.35	0.0094
误差	2.375	3	0.792		
$\begin{cases} B \\ AB \\ BC \end{cases}$	0.125 1.125 1.125	1 1 1			
总和	183.875	7			

应值可知, D 因子应取水平 D_1 , A 因子取水平 A_2 . 进一步由于 AC 也比较显著, 根据 AC 来确定 C 的水平. A 和 C 共有四种搭配 $(A_1, C_1), (A_1, C_2), (A_2, C_1), (A_2, C_2)$, 从表 2.25 中可以看到每种水平搭配下有两次试验, 相应的都有两个响应值, 试验结果总结如下:

	A_1		A_2	
C_1	82	76	83	92
C_2	78	85	86	79

从上表可以看出, 由交互效应 AC 得到 A 和 C 的最佳水平搭配为 (A_2, C_1) , 其中 A 因子的最优水平与单独考虑 A 因子时的结果一致, 而 C 的最优水平与从表 2.25 中单独看 C 的最优水平也是一致的, 于是得到最优条件 (A_2, C_1, D_1) . 反应时间 B 的水平对转化率没有显著影响, 但还是可以从表 2.25 中选择平均转化率稍大的反应时间 B_2 , 最终得到最好的试验条件为 (A_2, B_2, C_1, D_1) , 它与直观分析的结果一致, 且恰好是第 7 号试验.

2.4.3 不等水平试验的正交设计

实际问题中, 由于客观条件的限制或者对因子重视的程度不同, 使各个因子的水个数可能不全相等, 这时如何利用正交表制定试验方案呢? 通常有两种办法:

- 利用混合水平的正交表;
- 拟水平法.

$L_8(4 \times 2^4)$, $L_{16}(4 \times 2^{12})$, $L_{16}(4^4 \times 2^3)$ 等正交表都是混合水平的正交表, 如果选的水平数符合这些表的要求, 便可直接套用.

例 2.16. 为了探索缝纫机胶压板的制造工艺, 选了如下的因子和水平:

因子水平	压力 (A)	温度 (B)	时间 (C)
1	8kg	95°C	9min
2	10kg	90°C	12min
3	11kg		
4	12kg		

在不考虑交互效应的前提下，本试验的方案可以直接套用正交表 $L_8(4 \times 2^4)$ ，四水平的因子放在第一列，其余两个因子放在后四列的任两列，例如放在第二列和第三列，即

列号	1	2	3	4	5
因子	A	B	C		

该试验由四位有经验的专家打分，最高 6 分，最低 1 分。试验结果见表 2.28.

表 2.28: 胶压板试验的方案、结果和分析

试验号	A(kg)	B(°C)	C(min)	打分	总分
1	8(0)	95(0)	9(0)	6 6 6 4	22
2	8(0)	90(1)	12(1)	6 5 4 4	19
3	10(1)	95(0)	9(0)	4 3 2 2	11
4	10(1)	90(1)	12(1)	4 4 3 2	13
5	11(2)	95(0)	9(0)	2 1 1 1	5
6	11(2)	95(0)	9(0)	4 4 4 2	14
7	12(3)	95(0)	12(1)	4 3 2 1	10
8	12(3)	90(1)	9(0)	6 5 4 2	17
T_1	41	48	64		
T_2	24	63	47		
T_3	19				
T_4	27				
m_1	5.1	3.0	4.0		
m_2	3.0	3.9	2.9		
m_3	2.4				
m_4	3.4				
R	2.7	0.9	1.1		

在等水平试验中，用极差 R 来衡量所选因子对响应影响的大小。当水平数不同时，即使两个因子对指标有等同影响，水平多的因子极差应该也要大一些，直接比较 R 是不符合直观。统计学家们采用一个折算公式

$$R' = \sqrt{m} \times R \times \rho \quad (2.35)$$

来解决这一问题, 其中 m 表示在该因子在每一水平下的重复试验次数, ρ 为折算系数, 不同水平数因子的折算系数为:

水平数	2	3	4	5	6	7	8	9
折算系数	0.71	0.52	0.45	0.40	0.37	0.35	0.34	0.32

因子 A 是 4 水平, 其折算系数是 0.45, 折算结果

$$R'_A = \sqrt{m_A} \times R_A \times 0.45 = \sqrt{8} \times 2.7 \times 0.45 = 3.4,$$

这里 R_A 为表 2.28 最后一行所列的因子 A 的水平极差. B 和 C 是二水平, 折算系数是 0.71, 折算结果为

$$R'_B = \sqrt{m_B} \times R_B \times 0.71 = \sqrt{16} \times 0.9 \times 0.71 = 2.6,$$

$$R'_C = \sqrt{m_C} \times R_C \times 0.71 = \sqrt{16} \times 1.1 \times 0.71 = 3.1,$$

最后用 R'_A , R'_B , R'_C 的大小来分主次关系, 得到主次关系 $A > B > C$. 由表 2.28 及上述分析, 最佳参数组合为压力 8kg(A_1), 温度 90°C(B_2), 时间 9min(C_1).

试验的方差分析结果如下, 结果表明 3 个因子对胶压板质量都有显著的影响.

方差来源	自由度	平方和	均方	F	p 值
压力	3	33.34375	11.11460	9.46	0.0002
温度	1	7.03125	7.03125	5.98	0.0215
时间	1	9.03125	9.03125	7.68	0.0102
误差	26	30.56250	1.17755		
总和	31	79.96875			

如果在例 2.14 的试验中还要考虑搅拌速度 D 这个因子, 而电动机只有快和慢两挡, 这时能否还用 $L_9(3^4)$ 来安排呢? 这是可以的, 解决的方法就是给搅拌速度凑足 3 个水平. 让搅拌速度快的 (或慢的) 一挡多重复一次, 凑成第 3 个水平, 然后把 A , B , C , D 分别安放在 $L_9(3^4)$ 的四列上, 便得到了试验方案:

因子水平	温度 (A)	时间 (B)	加碱量 (C)	搅拌速度 (D)
1	80°C	90min	5%	快速
2	85°C	120min	6%	慢速
3	90°C	150min	7%	快速

这样一种凑足水平的方法叫做拟水平法. 下面在看一个利用拟水平法的例子.

例 2.17. 玻璃绝缘子钢化试验选的因子水平如下:

因子水平	1	2	3	4	5
保温温度 (°C)	700	685	670	710	720
保湿时间 (h)	5.5	4.5	3.5	2.5	1.5
上风压 (kPa)	130	80	110	160	180
下风压 (kPa)	240	300	340	380	440
风栅形状	I	II	III	IV	
主风嘴大小 (mm)	9	6	12		

其中前 4 个因子是 5 水平的, 后 2 个因子是 4 水平和 3 水平, 没有现成的正交表可以套用. 比较合适办法是选正交表 $L_{25}(5^6)$, 将最后两个因子凑足 5 个水平. 在风栅形状这个因子中, 工程师估计形状 II 效果较好, 将它重复一次, 凑成第五个水平; 在主风嘴大小因子中, 估计 9 和 12 比较好, 将它们分别重复一次, 凑成五个水平, 于是因子、水平变成如下的分布:

因子水平	1	2	3	4	5
保温温度 (°C)	700	685	670	710	720
保湿时间 (h)	5.5	4.5	3.5	2.5	1.5
上风压 (kPa)	130	80	110	160	180
下风压 (kPa)	240	300	340	380	440
风栅形状	I	II	III	IV	II
主风嘴大小 (mm)	9	6	12	9	12

将 6 个因子分别放在正交表 $L_{25}(5^6)$ 的六列上, 便得到了试验方案.

拟水平法在实行时方法简单, 但处理组合出现的频率不平衡, 有时会给试验数据分析带来一些困难, 这里就不再叙述了.

2.5 习题

2.1 单因子固定效应模型(2.1)中, 如果将一般均值定义为

$$\mu := \frac{1}{a} \sum_{i=1}^a \mu_i,$$

会产生什么后果?

2.2 例2.2中, 如果将五个战士当作一个五水平的因子, 则它是一个双因子试验, 试利用 R 绘制交互效应图, 能否对其进行方差分析判断两个因子主效应和交互效应的显著性?

2.3 利用最小二乘法获得双因子固定效应模型中参数的估计(2.10).

2.4 证明双因子试验的偏差平方和分解式(2.12).

2.5 利用极大似然法获得三因子固定效应模型(2.13)中参数的估计.

2.6 证明三因子试验的偏差平方和分解式(2.15).

2.7 利用 R 分析例2.5的试验数据.

2.8 写出 2^2 因子设计和 2^3 因子设计的方差分析表.

2.9 计算例2.7中各效应的平方和, 并补全方差分析表2.15

2.10 请根据2.2.3节提供的方法构造正交表 $L_{16}(2^{15})$.

2.11 证明平方和分解式(2.31)式.

2.12 利用正交表 $L_{27}(3^{15})$ 可以把 $SS_{A \times B \times C}$ 分解为 $SS_{ABC} + SS_{A^2B^2C} + SS_{A^2BC} + SS_{AB^2C}$, 试写出每一分量的表达式.

2.13 试利用正交表 $L_{27}(3^{15})$ 分析例2.5的数据.

2.14 能否根据正交表 $L_{2^k}(2^{2^k-1})$ 和 $L_{3^k}(3^{\frac{3^k-1}{3-1}})$ 的构造规律, 归纳出一般的完备正交表 $L_{q^k}(q^{\frac{q^k-1}{q-1}})$ 的构造方法.

2.15 请尝试利用并列方法得到混合水平正交表 $L_{16}(4^4 \times 2^3)$ 和 $L_{16}(4 \times 2^{12})$.

第三章 回归试验设计

本章目标:

- (1) 学会对试验数据进行回归分析;
- (2) 利用二水平正交表实现正交回归设计;
- (3) 了解最优回归设计的基本思想;
- (4) 掌握 D -最优设计及其算法;
- (5) 了解响应曲面分析法的基本思想和方法.

如果存在连续的试验因子, 则试验空间包含无限多个处理. 如果采用第二章的比较试验模型, 每个处理都对应一个效应, 需做无穷多次试验才能把所有参数估计出来, 这是不可能的. 回归分析利用变量之间连续依赖的约束, 建立因子与响应之间的参数模型, 将估计一个无穷维的函数转化为估计有限个参数, 利用这个模型去解决预测、控制和优化的问题. 回归试验的基本思想是把试验安排、数据处理和参数估计的精度统一考虑, 包括正交回归设计、旋转回归设计、响应曲面法以及最优回归设计等.

假定试验区域 \mathcal{X} 为 \mathbb{R}^p 的连通子集, 根据响应模型 $y = F(\mathbf{x}, s, \omega)$ 的具体形式, 可对其进行分类. 如果随机因素 ω 可以分离, 则模型(1.1)变成

$$y = f(\mathbf{x}, s_1) + \varepsilon(\mathbf{x}, s_2, \omega), \quad (3.1)$$

其中 $\varepsilon(\mathbf{x}, s_2, \omega)$ 为零均值随机过程, s_2 表示其分布中的参数; s_1 和 s_2 共同组成了待估参数 s . 因误差 ε 与 \mathbf{x} 有关, 称模型(3.1)为**空间相关模型** (spatial related model). 进一步, 如果模型(1.1)可化简为如下形式:

$$y = f(\mathbf{x}, s_1) + \varepsilon(s_2, \omega), \quad (3.2)$$

则得到**回归模型** (regression model), 其中 s_1 表示回归函数 $f(\mathbf{x}, s_1)$ 中的参数, s_2 表示零均值随机变量 $\varepsilon(s_2, \omega)$ 的分布中的参数, s_1 和 s_2 共同构成抽象的未知参数 s . 一般我们假定 $\varepsilon(s_2, \omega)$ 为零均值的 Gauss 随机变量, 其方差为 σ^2 , 当 σ^2 未知时 $s_2 = \sigma^2$, 而当 σ^2 已知时 s_2 为空. 根据对回归函数 f 认知程度的不同, 回归模型可分为以下两类:

- (1) 知道 f 的形式而不知道其中部分参数, 即 $f(\mathbf{x}, s_1) = f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})$, 其中 $s_1 = \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^m$ 为未知参数组成的, 称为**参数回归模型** (parametric regression model). 当 $f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})$ 是

β 的非线性函数时, 称为**非线性回归模型** (nonlinear regression model); 当

$$y = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\beta} + \varepsilon(\omega) \quad (3.3)$$

时称为**线性回归模型** (linear regression model), $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ 为已知的线性无关函数向量.

- (2) 不知道 f 的形式, 仅知道 f 属于某一函数类 \mathcal{F} , 如单调函数类、光滑函数类等, 称为**非参数回归模型** (nonparametric regression model).

注意, “线性回归模型” 中的“线性”一词针对的是参数而不是自变量, 如

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1^2 x_2 + \varepsilon$$

是线性回归模型.

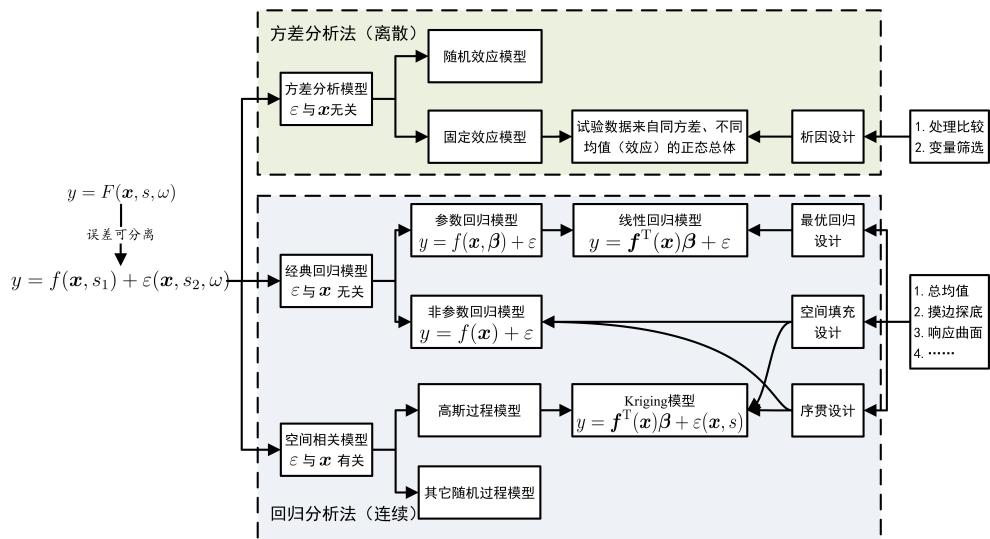


图 3.1: 响应模型的分类

从响应模型、试验目标以及数据分析方法三个维度对试验设计分类, 得到图3.1. 第二章讨论了方差分析法与因子设计, 本章主要研究基于模型(3.3)的实验设计与分析. 当然, 因子设计和方差分析法也可以用在连续的情形, 这在第二章的部分例子中已经遇到过了. 本章3.1节以线性回归模型为例介绍回归分析的基本思想, 并简要介绍非线性回归的迭代算法. 3.2介绍正交回归设计及其统计分析. 3.3节介绍最优回归设计. 3.4介绍响应曲面分析法, 它本质上是一种序贯设计方法. 3.5节简单介绍非参数回归分析的基本思想.

3.1 数据的回归分析

考虑线性回归模型

$$y = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\beta} + \varepsilon,$$

其中 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})]^T$ 由 m 个线性独立的已知函数组成, 即不存在 m 个不完全为 0 的实数 c_1, c_2, \dots, c_m , 使得

$$c_1 f_1(\mathbf{x}) + c_2 f_2(\mathbf{x}) + \dots + c_m f_m(\mathbf{x}) \equiv 0,$$

$\boldsymbol{\beta} = [\beta_1, \dots, \beta_m]^T$ 为待估计的参数向量. 多元线性回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p$$

是上述线性回归模型在 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = [1, x_1, \dots, x_p]^T$ 时的一个特例, 其中 β_0 称为截距项 (intercept term).

对回归模型有两种理解: (1) 它体现的是响应变量 y 与试验因子 \mathbf{x} 之间的一种相关关系, 带有一定的随机性, 即同一个试验点得到的响应值不同; (2) 它体现的是响应变量 y 与试验因子 \mathbf{x} 之间的函数关系, 只是由于其它噪声因子的影响, 使得 y 与 \mathbf{x} 之间的关系不能直接观测到, 通过一个随机变量 ε 对噪声因子的影响建模.

例 3.1. (1) 我们知道, 居民收入水平 x 与高档消费品的消费量 y 有相关关系. 居民收入越高, 高档消费品也就越大. 但居民收入不能完全确定高档消费品销售量, y 还与其它很多因素有关, 比如时代的潮流等.

(2) 两个质点之间的万有引力与它们之间的距离 r 、各自的质量 m_1 和 m_2 有关, 而且它们之间的关系是确定的. 但由于其它物体的干扰, 以及测量误差等因素的影响, 还是需要引入随机变量 ε 对这种关系进行建模.

设有 n 组样本 (\mathbf{x}_i, y_i) , 即

$$y_i = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta} + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (3.4)$$

记 $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_n]^T$, $\boldsymbol{\varepsilon} = [\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n]^T$, 以及

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{x}_1) & f_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & f_m(\mathbf{x}_1) \\ f_1(\mathbf{x}_2) & f_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & f_m(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(\mathbf{x}_n) & f_2(\mathbf{x}_n) & \cdots & f_m(\mathbf{x}_n) \end{bmatrix},$$

称 \mathbf{X} 为广义设计矩阵 (generalized design matrix), 它由设计 $\xi_n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 决定. (3.4)式可改写为矩阵形式

$$\begin{cases} \mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}, \\ \boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, \mathbf{C}). \end{cases} \quad (3.5)$$

其中 $\mathbf{C} = \text{Cov}(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\varepsilon})$ 为 $n \times n$ 阶对称正定矩阵. 这里略去了向量和矩阵的维数记号, 请根据上下文辨识.

3.1.1 线性回归模型的参数估计

注意到模型(3.5)可改写成 $\mathbf{y} \sim N(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \mathbf{C})$, 于是 $\boldsymbol{\beta}$ 的极大似然估计为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ML}} = \arg \max_{\boldsymbol{\beta}} \left\{ \frac{1}{(2\pi)^{\frac{n}{2}} \det(\mathbf{C})^{\frac{1}{2}}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \right\} \right\}.$$

假定协方差阵 \mathbf{C} 与参数 $\boldsymbol{\beta}$ 无关, 则

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ML}} = \arg \min_{\boldsymbol{\beta}} \{ (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \}.$$

令

$$Q(\boldsymbol{\beta}) := (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$$

它表示加权残差平方和 (weighted residual sum of squares), 因此 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ML}}$ 也称为参数 $\boldsymbol{\beta}$ 的**加权最小二乘估计** (Weighted Least Square Estimator, WLS).

对目标函数 $Q(\boldsymbol{\beta})$ 求导, 并令梯度向量等于零向量, 得到正规方程

$$\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{0}, \quad (3.6)$$

为使该正规方程有唯一解, 即模型**可辨识** (identifiable), 要求 \mathbf{X} 列满秩, 即 $\text{rank}(\mathbf{X}) = m$, $n \geq m$ 是列满秩的必要条件. 求解该正规方程, 可得到 $\boldsymbol{\beta}$ 的加权最小二乘估计:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{WLS}} = \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ML}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{y}. \quad (3.7)$$

可见, 线性回归模型参数的加权最小二乘估计是数据 \mathbf{y} 的线性变换.

设 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 为参数 $\boldsymbol{\beta}$ 的某种估计, $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的**均方误差** (Mean Square Error, MSE) 定义为

$$\text{MSE}(\hat{\boldsymbol{\beta}}) := \mathbb{E} [(\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})^T (\hat{\boldsymbol{\beta}} - \boldsymbol{\beta})]. \quad (3.8)$$

对于一维参数而言,

$$\begin{aligned} \text{MSE}(\hat{\beta}) &= \mathbb{E} [(\hat{\beta} - \mathbb{E}(\hat{\beta}) + \mathbb{E}(\hat{\beta}) - \beta)^2] \\ &= \mathbb{E}(\hat{\beta} - \mathbb{E}(\hat{\beta}))^2 + 2(\mathbb{E}(\hat{\beta}) - \beta)\mathbb{E}(\hat{\beta} - \mathbb{E}(\hat{\beta})) + (\mathbb{E}(\hat{\beta}) - \beta)^2 \\ &= \text{Var}(\hat{\beta}) + \text{bias}^2(\hat{\beta}), \end{aligned}$$

即**均方误差等于偏差的平方与方差的和**.

为方便起见, 以下记 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ML}}$ 为 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$. 注意到

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\beta}} &= (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}) \\ &= \boldsymbol{\beta} + (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

马上可得到下述结论.

定理 3.1. 线性模型(3.5)中, 参数 β 的加权最小二乘估计 $\hat{\beta}$ 具有如下性质:

- (1) $\hat{\beta} \sim N(\beta, (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1})$;
- (2) 对任意 $\mathbf{c} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{c}^T \hat{\beta} \sim N(\mathbf{c}^T \beta, \mathbf{c}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{c})$;
- (3) 对任意 $k \times m$ 阶矩阵 \mathbf{A} , $\mathbf{A} \hat{\beta} \sim N(\mathbf{A} \beta, \mathbf{A} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{A}^T)$;
- (4) 设 $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_m$ 为 $\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X}$ 的特征值, 则 $MSE(\hat{\beta}) = \sum_{k=1}^m \lambda_k^{-1}$.

Proof. 利用(3.9)式, $\mathbb{E}(\hat{\beta}) = \beta + (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbb{E}(\varepsilon) = \beta$,

$$\begin{aligned}\text{Cov}(\hat{\beta}) &= \mathbb{E}((\hat{\beta} - \beta)(\hat{\beta} - \beta)^T) \\ &= \mathbb{E}((\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \varepsilon ((\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \varepsilon)^T) \\ &= \mathbb{E}((\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \varepsilon \varepsilon^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1}) \\ &= (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1}.\end{aligned}$$

(1) 得证. 根据正态随机向量的性质, (2) 和 (3) 均可由 (1) 得到. 再次利用(3.9)式, 可得

$$\begin{aligned}MSE(\hat{\beta}) &= \mathbb{E}[((\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \varepsilon)^T (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \varepsilon] \\ &= \mathbb{E}[\varepsilon^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \varepsilon] \\ &= \text{tr}((\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1}).\end{aligned}$$

注意到 $\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X}$ 为正定阵, 故存在正交矩阵 \mathbf{P} , 使得 $\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X} = \mathbf{P} \Lambda \mathbf{P}^T$, 其中 $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)$, 于是,

$$MSE(\hat{\beta}) = \text{tr}((\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1}) = \text{tr}(\Lambda^{-1}) = \sum_{k=1}^m \lambda_k^{-1}.$$

□

由此可见, 估计量 $\hat{\beta}$ 的性质由广义设计矩阵 \mathbf{X} 和随机误差的方差 \mathbf{C} 决定. 记 $(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} = (M_{ij})$, $\hat{\beta} = (\hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_m)^T$, 则 $\text{Var}(\hat{\beta}_i) = M_{ii}$, $\text{Cov}(\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_j) = M_{ij}$. 因 $\hat{\beta}_i$ 为 β_i 的无偏估计, 于是 $\text{Var}(\hat{\beta}_i)$ 的大小可作为 $\hat{\beta}_i$ 好坏的标准. 只要 $\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X}$ 有一个很小的特征值 λ_1 , 就会导致 $MSE(\hat{\beta})$ 很大. 这提示我们: **试验设计应使得矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X}$ 没有很小的特征值.**

得到 β 的估计 $\hat{\beta}$ 后, 可以以 $\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \hat{\beta}$ 作为点 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ 处响应值 $y(\mathbf{x})$ 的预测. 根据定理3.1的性质 (2),

$$\hat{y}(\mathbf{x}) \sim N\left(\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \beta, \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x})\right),$$

即 $\hat{y}(\mathbf{x})$ 的预测方差为 $\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x})$.

得到 β 的估计 $\hat{\beta}$ 后, 可以计算出响应变量的回归值为

$$\hat{y} = \mathbf{X} \hat{\beta} = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{y} \quad (3.10)$$

称 $\mathbf{H} = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1}$ 为 **帽子矩阵** (hat matrix), 因为它形式上给 \mathbf{y} 加了一顶“帽子”. 由于

$$\mathbf{H}^2 = \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} = \mathbf{H},$$

故 $\mathbf{H}^2 = \mathbf{H}$ 为幂等矩阵. 根据幂等矩阵的性质,

$$\text{rank}(\mathbf{H}) = \text{tr}(\mathbf{H}) = \text{tr}\left(\mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1}\right) = \text{tr}(\mathbf{I}_{m \times m}) = m,$$

因而也可以将帽子矩阵的迹 $\text{tr}(\mathbf{H})$ 定义为线性回归模型的自由度.

称 $\mathbf{e} := \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{y}$ 为 **残差向量** (residual vector). 注意到

$$\hat{\mathbf{y}}^T \mathbf{e} = \mathbf{y}^T \mathbf{H}(\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{y} = 0,$$

$$\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{e} = \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{y} = \mathbf{0}$$

且

$$\mathbf{e}^T \mathbf{e} + \hat{\mathbf{y}}^T \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y}^T (\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{y} + \mathbf{y}^T \mathbf{H}\mathbf{y} = \mathbf{y}^T \mathbf{y},$$

可将 \mathbf{e} 、 $\hat{\mathbf{y}}$ 和 \mathbf{y} 理解为直角三角形的三条边, 观测向量 \mathbf{y} 向矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1}$ 的像空间的投影得到 $\hat{\mathbf{y}}$. 当 $\mathbf{C} = \sigma^2 \mathbf{I}$, 且 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ 中有常数 1 (对应回归方程中有截距项) 时, $\sum_{i=1}^n e_i = 0$.

以上讨论中均假定 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的方差矩阵已知, 如果 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 的方差矩阵为 $\sigma^2 \mathbf{C}$, 其中 σ^2 未知, 该如何估计 σ^2 呢? 此时, 对数似然函数为:

$$\ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2) = -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln(\sigma^2) - \frac{1}{2} \ln \det(\mathbf{C}) - \frac{1}{2\sigma^2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}).$$

求导, 并令导数等于 0, 得到

$$\begin{cases} \frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2)}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{\sigma^2} + \frac{1}{\sigma^4} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = 0 \\ \frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2)}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -\frac{1}{2\sigma^2} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{0}, \end{cases}$$

故参数的极大似然估计为

$$\begin{cases} \hat{\boldsymbol{\beta}}_{\text{ML}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{y}, \\ \hat{\sigma}_{\text{ML}}^2 = \frac{1}{n} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}). \end{cases} \quad (3.11)$$

可见, $\boldsymbol{\beta}$ 的估计并没有发生改变. 2.1.1 节已经知道, σ^2 的极大似然估计不是无偏的. 事实上,

$$\begin{aligned} & (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \\ &= (\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon})^T \mathbf{C}^{-1} (\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\varepsilon}) \\ &= \boldsymbol{\varepsilon}^T [\mathbf{C}^{-1} - \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1}] \boldsymbol{\varepsilon}, \end{aligned}$$

令 $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \sigma^{-1} \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\varepsilon}$, 则 $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 为 n 维标准 Gauss 随机向量, 且

$$\begin{aligned}\text{RSS} &:= (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \\ &= \sigma^2 \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}^T \left[\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \right] \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}},\end{aligned}$$

故 RSS/σ^2 服从 χ^2 分布, 其自由度为矩阵 $\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}}$ 的秩. 容易验证 $\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}}$ 为幂等矩阵, 故

$$\begin{aligned}\text{rank} \left(\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \right) &= \text{tr} \left(\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \right) \\ &= n - \text{tr} \left(\mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \right) \\ &= n - m.\end{aligned}$$

又由于

$$(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \left[\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \right] = \mathbf{0},$$

故 RSS/σ^2 与 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 互相独立. 综上所述, 根据引理1.5, 得到如下定理:

定理 3.2. RSS/σ^2 与 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 独立, 且服从自由度为 $n - m$ 的 χ^2 分布.

由此可知, $\mathbb{E}(\text{RSS}) = (n - m)\sigma^2$, 统计量

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\text{RSS}}{n - m}$$

是 σ^2 的无偏估计.

3.1.2 线性回归模型的假设检验

对问题建立回归模型后, 需要对回归模型进行检验, 包括对回归模型的显著性检验和对回归系数的显著性检验.

为简单起见, 本节作以下假定:

- (1) 向量函数 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ 含有常数分量 1, 即 $f_1(\mathbf{x}) \equiv 1$;
- (2) 假定 $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$.

事实上, 如果 $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{C})$, 则可通过令

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{y}, \quad \widetilde{\mathbf{X}} = \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{X}, \quad \tilde{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{C}^{-\frac{1}{2}} \boldsymbol{\varepsilon}$$

转化为 $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$ 的情形.

回归模型的显著性检验

对回归模型的显著性检验即检验自变量从整体上对因变量是否有明显的影响,为此提出假设

$$H_0: \beta_{-1} = \mathbf{0}, \quad H_1: \beta_{-1} \neq \mathbf{0}. \quad (3.12)$$

如果通过检验接受了假设 H_0 , 则 y 与 \mathbf{x} 之间的关系由模型(3.4)表示不合适. 这里, β_{-1} 表示去除了常数项 1 对应的回归系数 β_1 后的回归系数向量, 称 β_1 为截距 (intercept).

检验方法是作方差分析. 注意到总平方和

$$SS_T = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + 2 \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y}) + \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2$$

而

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y}) = \sum_{i=1}^n e_i \hat{y}_i - \bar{y} \sum_{i=1}^n e_i$$

由 $\mathbf{e} \perp \hat{\mathbf{y}}$ 可知上式第一项 0; 由 $\mathbf{X}^T \mathbf{e} = \mathbf{0}$ 且 $f_1(\mathbf{x}) \equiv 0$ 可知, 第二项也为 0. 因此有平方和分解式

$$SS_T = SS_E + SS_R,$$

其中 $SS_E = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$ 为恰为残差平方和 RSS; $SS_R = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2$ 为回归平方和.

定理 3.3. 如果回归函数中 $f_1(\mathbf{x}) \equiv 1$, 则当 H_0 为真时,

$$F := \frac{SS_R/(m-1)}{SS_E/(n-m)} \sim F(m-1, n-m).$$

特别地, 对于给定的显著性水平 α , 检验问题(3.12)的拒绝域为 $F > F_{1-\alpha}(m-1, n-m)$.

定理的证明留到本节的最后.

回归系数的逐个检验

如果回归模型中包含一些对 y 影响不大的自变量, 会增加待估参数的个数而使得参数估计的精度降低. 因此, 通过回归模型的显著性检验后还需对每个自变量进行检验, 剔除不重要的自变量, 建立更简单的线性回归模型.

检验向量函数 $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ 的第 j 个分量 $f_j(\mathbf{x})$ 是否显著就等价于检验

$$H_{0j}: \beta_j = 0, \quad \text{v.s.} \quad H_{1j}: \beta_j \neq 0, \quad j = 1, 2, \dots, m.$$

若原假设成立, 则 $f_j(\mathbf{x})$ 可从回归方程中剔除.

我们知道, $\hat{\beta} \sim N(\beta, \sigma^2(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1})$. 因此, 根据多元正态分布的性质1.2, 如果用 M_{jj} 表示矩阵 $(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1}$ 的第 j 个主对角元, 则 $\hat{\beta}_j \sim N(\beta_j, \sigma^2 M_{jj})$. 从而

$$\frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\sigma \sqrt{M_{jj}}} \sim N(0, 1).$$

因上式中 σ 未知, 不能直接以它作为统计量来检验假设 H_0 . 利用定理3.2和 t 分布的定义可知,

$$t_j := \frac{\hat{\beta}_j - \beta_j}{\sqrt{M_{jj}\text{RSS}/(n-m)}} \sim t(n-m).$$

因此, 给定检验水平 α , 当

$$|t_j| = \left| \frac{\hat{\beta}_j}{\sqrt{M_{jj}\text{RSS}/(n-m)}} \right| \geq t_{\alpha/2}(n-m)$$

时, 拒绝原假设 H_0 , 认为 β_0 显著异于 0; 否则接受 H_0 , 认为 $f_j(\mathbf{x})$ 对 y 无显著影响.

回归系数的分组检验

除逐个对自变量的显著性进行检验外, 还可以分批次检验. 设 $r \in \{1, 2, \dots, m-1\}$, $k+r=m$, 将矩阵 \mathbf{X} 和向量 $\boldsymbol{\beta}$ 进行分块

$$\mathbf{X} = [\mathbf{X}_k, \mathbf{X}_r], \quad \boldsymbol{\beta} = [\boldsymbol{\beta}_k^T, \boldsymbol{\beta}_r^T]^T,$$

其中, \mathbf{X}_k 和 \mathbf{X}_r 分别为 $n \times k$ 和 $n \times r$ 的列满秩矩阵. 称

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}_k \boldsymbol{\beta}_k + \mathbf{X}_r \boldsymbol{\beta}_r + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.13)$$

为**全模型**, 相应的

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = [\hat{\boldsymbol{\beta}}_k^T, \hat{\boldsymbol{\beta}}_r^T]^T, \quad \text{RSS} = \mathbf{y}^T [\mathbf{I} - \mathbf{X} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T] \mathbf{y}.$$

称

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}_k \boldsymbol{\beta}_k + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.14)$$

为**选模型**. 相应的

$$\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k = (\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^T \mathbf{y}, \quad \text{RSS}_{H_0} = \mathbf{y}^T [\mathbf{I} - \mathbf{X}_k (\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^T] \mathbf{y}.$$

考虑检验问题

$$H_0 : \boldsymbol{\beta}_r = \mathbf{0}, \quad \text{v.s.} \quad H_1 : \boldsymbol{\beta}_r \neq \mathbf{0}. \quad (3.15)$$

有如下定理:

定理 3.4. 当假设 $H_0 : \boldsymbol{\beta}_r = \mathbf{0}$ 成立时, RSS 与 $\text{RSS}_{H_0} - \text{RSS}$ 相互独立, 且

$$\frac{\text{RSS}_{H_0} - \text{RSS}}{\sigma^2} \sim \chi^2(r), \quad \frac{(\text{RSS}_{H_0} - \text{RSS})/r}{\text{RSS}/(n-m)} \sim F(r, n-m).$$

Proof. 记

$$\mathbf{H} = \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T, \quad \mathbf{H}_k = \mathbf{X}_k(\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^T,$$

则 $\mathbf{I} - \mathbf{H}$ 和 $\mathbf{I} - \mathbf{H}_k$ 分别为秩为 $n - m$ 和 $n - k$ 的对称正定幂等矩阵. 根据对称正定幂等矩阵的性质, 存在正交矩阵 \mathbf{P}_1 , 使得

$$\mathbf{P}_1 (\mathbf{I} - \mathbf{H}_k) \mathbf{P}_1^T = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{(n-k) \times (n-k)} & \\ & \mathbf{0}_{k \times k} \end{bmatrix}.$$

利用分块矩阵的求逆公式

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}^{-1} + \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} (\mathbf{D} - \mathbf{C} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{C} \mathbf{A}^{-1} & -\mathbf{A}^{-1} \mathbf{B} (\mathbf{D} - \mathbf{C} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \\ -(\mathbf{D} - \mathbf{C} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \mathbf{C} \mathbf{A}^{-1} & (\mathbf{D} - \mathbf{C} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{B})^{-1} \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

得到

$$\begin{aligned} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} &= \begin{bmatrix} \mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k & \mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_r \\ \mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_k & \mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_r \end{bmatrix}^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} (\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} + (\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_r \mathbf{G}^{-1} \mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_k (\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} & -(\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_r \mathbf{G}^{-1} \\ -\mathbf{G}^{-1} \mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_k (\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} & \mathbf{G}^{-1} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

其中 $\mathbf{G} = \mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_r - \mathbf{X}_r^T \mathbf{H}_k \mathbf{X}_r$, 代入 \mathbf{H} 中得到

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_k & \mathbf{X}_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k & \mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_r \\ \mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_k & \mathbf{X}_r^T \mathbf{X}_r \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \mathbf{X}_k^T \\ \mathbf{X}_r^T \end{bmatrix} = \mathbf{H}_k + (\mathbf{I} - \mathbf{H}_k) \mathbf{X}_r \mathbf{G}^{-1} \mathbf{X}_r^T (\mathbf{I} - \mathbf{H}_k).$$

于是

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_1 (\mathbf{I} - \mathbf{H}) \mathbf{P}_1^T &= \mathbf{P}_1 [\mathbf{I} - \mathbf{H}_k - (\mathbf{I} - \mathbf{H}_k) \mathbf{X}_r \mathbf{G}^{-1} \mathbf{X}_r^T (\mathbf{I} - \mathbf{H}_k)] \mathbf{P}_1^T \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{(n-k) \times (n-k)} & \\ & \mathbf{0}_{k \times k} \end{bmatrix} (\mathbf{I} - \mathbf{P}_1 \mathbf{X}_r \mathbf{G}^{-1} \mathbf{X}_r^T \mathbf{P}_1^T) \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{(n-k) \times (n-k)} & \\ & \mathbf{0}_{k \times k} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{(n-k) \times (n-k)} & \\ & \mathbf{0}_{k \times k} \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

其中 \mathbf{C} 为秩为 $n - m$ 的对称幂等矩阵. 设 \mathbf{Q} 为使得

$$\mathbf{Q} \mathbf{C} \mathbf{Q}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{(n-m) \times (n-m)} & \\ & \mathbf{0}_{(m-k) \times (m-k)} \end{bmatrix}$$

的正交矩阵, 令 $\mathbf{P}_2 = \text{diag}\{\mathbf{Q}, \mathbf{I}_{k \times k}\}$, $\mathbf{P} = \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1$, 则

$$\begin{aligned} \mathbf{P} (\mathbf{I} - \mathbf{H}_k) \mathbf{P}^T &= \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 (\mathbf{I} - \mathbf{H}_k) \mathbf{P}_1^T \mathbf{P}_2^T = \mathbf{P}_2 \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{(n-k) \times (n-k)} & \\ & \mathbf{0}_{k \times k} \end{bmatrix} \mathbf{P}_2^T \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{(n-k) \times (n-k)} & \\ & \mathbf{0}_{k \times k} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

且

$$\begin{aligned} \mathbf{P}(\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{P}^T &= \mathbf{P}_2\mathbf{P}_1(\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{P}_1^T\mathbf{P}_2^T = \mathbf{P}_2 \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{(n-k) \times (n-k)} & \\ & \mathbf{0}_{k \times k} \end{bmatrix} \mathbf{P}_2^T \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{(n-m) \times (n-m)} & \\ & \mathbf{0}_{m \times m} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

由此可见,

$$\mathbf{P}[(\mathbf{I} - \mathbf{H}_k) - (\mathbf{I} - \mathbf{H})]\mathbf{P}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{(n-m) \times (n-m)} & & \\ & \mathbf{I}_{(m-k) \times (m-k)} & \\ & & \mathbf{0}_{k \times k} \end{bmatrix},$$

故 $(\mathbf{I} - \mathbf{H}_k) - (\mathbf{I} - \mathbf{H})$ 为秩为 $m - k = r$ 的对称幂等矩阵.

注意到 $\text{RSS} = \boldsymbol{\varepsilon}^T(\mathbf{I} - \mathbf{H})\boldsymbol{\varepsilon}$, 而当 H_0 成立时, $\text{RSS}_{H_0} = \boldsymbol{\varepsilon}^T(\mathbf{I} - \mathbf{H}_k)\boldsymbol{\varepsilon}$, 利用引理 1.5 立即得到本定理的结论. \square

定理的证明用到了分块矩阵的求逆公式, 实际上是不必要的. 如果熟悉以下结论, 可使证明过程更加简单: 设 $\mathbf{A}_{n \times n}$ 和 $\mathbf{B}_{n \times n}$ 均为对称幂等正定矩阵, 且 $r_1 = \text{rank}(\mathbf{A}) \geq \text{rank}(\mathbf{B}) = r_2$, 则存在正交矩阵 \mathbf{P} , 使得

$$\mathbf{P}\mathbf{A}\mathbf{P}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{r_1 \times r_1} & \\ & \mathbf{0}_{(n-r_1) \times (n-r_1)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}\mathbf{B}\mathbf{P}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{r_2 \times r_2} & \\ & \mathbf{0}_{(n-r_2) \times (n-r_2)} \end{bmatrix}.$$

根据该定理的结论, 取 $r = 1$, 可以依次检验各变量的显著性, 将不显著的变量剔除, 达到简化模型的目的; 取 $r = m - 1$, 则可以证明定理 3.3. 事实上, 当 $r = m - 1$ 且 H_0 成立时, $\hat{\beta}_1 = \bar{y}$, 即 \bar{y} 是使得

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \beta_1)^2$$

达到最小的 β_1 的值. 于是

$$\text{RSS}_{H_0} - \text{RSS} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = SS_R$$

恰为回归平方和, 故知定理 3.3 成立. 此处也可以看出本节假定 $f_1(\mathbf{x}) \equiv 1$ 的用意.

注 3.5. 一般地, 考虑若干个自变量线性变换的显著性检验问题, 也就是检验线性假设

$$H_0 : \mathbf{G}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0}; \quad H_1 : \mathbf{G}\boldsymbol{\beta} \neq \mathbf{0}; \tag{3.17}$$

其中, \mathbf{G} 为 $r \times m$ 矩阵, $r \leq m$, $\text{rank}(\mathbf{G}) = r$. 称此类检验问题为回归方程的线性检验问题. 由矩阵论的知识, 存在 $(m - r) \times m$ 的矩阵 \mathbf{L} , 使得

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \mathbf{L} \\ \mathbf{G} \end{bmatrix}$$

为 m 阶满秩矩阵. 令

$$\mathbf{Z} = \mathbf{X}\mathbf{D}^{-1} = (z_1, \dots, z_m), \quad \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{D}\boldsymbol{\beta} = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)^T,$$

则 $\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{Z}\boldsymbol{\alpha}$, 得到新的回归模型 $\mathbf{y} = \mathbf{Z}\boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\varepsilon}$. 记

$$\mathbf{Z}^* = (z_1, \dots, z_{m-r}), \quad \boldsymbol{\alpha}^* = (\alpha_1, \dots, \alpha_{m-r})^T,$$

则假设(3.17)等价于

$$H_0 : \alpha_{m-r+1} = \alpha_{m-r+2} = \dots = \alpha_m = 0. \quad (3.18)$$

于是可以利用定理3.4的结论.

例 3.2. 国家财政收入是国民经济发展的重要组成部分, 影响一个国家或地区财政收入的因素包括国内生产总值、财政支出、商品零售价指数等. 选择包括中央和地方税收的“国家财政收入”中的“各项税收”作为响应变量, 以反映国家税收的增长. 表3.1是来源于《中国统计年鉴》1978-2011年有关财政收入 y 、国内生产总值 x_1 、财政支出 x_2 、商品零售物价指数 x_3 的数据. 其中变量 y, x_1, x_2 的单位都是亿元人民币.

表 3.1: 国家财政收入数据

年份	y	x_1	x_2	x_3	年份	y	x_1	x_2	x_3
1978	519.28	3645.2	1122.09	100.7	1995	6038.04	60793.7	6823.72	114.8
1979	537.82	4062.6	1281.79	102.0	1996	6909.82	71176.6	7937.55	106.1
1980	571.70	4545.6	1228.83	106.0	1997	8234.04	78973.0	9233.56	100.8
1981	629.89	4891.6	1138.41	102.4	1998	9262.80	84402.3	10798.18	97.4
1982	700.02	5323.4	1229.98	101.9	1999	10682.58	89677.1	13187.67	97.0
1983	775.59	5962.7	1409.52	101.5	2000	12581.51	99214.6	15886.50	98.5
1984	947.35	7208.1	1701.02	102.8	2001	15301.38	109655.2	18902.58	99.2
1985	2040.79	9016.0	2004.25	108.8	2002	17636.45	120332.7	22053.15	98.7
1986	2090.73	10275.2	2204.91	106.0	2003	20017.31	135822.8	24649.95	99.9
1987	2140.36	12058.6	2262.18	107.3	2004	24165.68	159878.3	28486.89	102.8
1988	2390.47	15042.8	2491.21	118.5	2005	28778.54	184937.4	33930.28	100.8
1989	2727.40	16992.3	2823.78	117.8	2006	34804.35	216314.4	40422.73	101.0
1990	2821.86	18667.8	3083.59	102.1	2007	45621.97	265810.3	49781.35	105.9
1991	2990.17	21781.5	3386.62	102.9	2008	54223.79	314045.4	62592.66	98.8
1992	3296.91	26923.5	3742.20	105.4	2009	59521.59	340902.8	76299.93	103.1
1993	4255.30	35333.9	4642.30	113.2	2010	73210.79	401512.8	89874.16	104.9
1994	5126.88	48197.9	5792.62	121.7	2011	89738.39	472881.6	109247.79	103.8

用 R 软件建立响应变量 y 关于向量值函数 $[1, x_1, x_2, x_3]^T$ 的多元线性回归模型, 操作步骤如下.

(1) 读入数据. 将表 3.1 中的 Excel 类型的数据保存为文本文档 `data1.txt`, 然后使用代码

```

1 yx <- read.table("data1.txt", header = T);
2 y <- yx[,2];
3 x1 <- yx[,3];
4 x2 <- yx[,4];
5 x3 <- yx[,5];

```

读入数据.

(2) 拟合模型并展示结果. 使用代码

```

1 fm <- lm(y ~ x1 + x2 + x3, data = yx);
2 summary(fm)

```

得到结果如下:

```

Call:
lm(formula = y ~ x1 + x2 + x3, data = yx)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-2928.0 -637.3   87.6  422.4 3082.8 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) -4.936e+03 3.163e+03 -1.560 0.129187    
x1           4.298e-02 1.092e-02 3.934 0.000457 ***  
x2           6.336e-01 4.915e-02 12.891 9.12e-14 ***  
x3           4.257e+01 2.962e+01 1.437 0.160996    
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1 

Residual standard error: 1004 on 30 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9982, Adjusted R-squared:  0.9981 
F-statistic: 5690 on 3 and 30 DF, p-value: < 2.2e-16

```

拟合的线性回归方程为:

$$\hat{y} = -4936 + 0.04298x_1 + 0.6336x_2 + 42.57x_3.$$

从输出结果可以看出, 变量 x_1, x_2, x_3 的 t 统计量的值分别为 3.934, 12.891 和 1.437, 其 p 值对应为 0.000457, 9.12×10^{-14} 和 0.160996, 由此可见, x_1 和 x_2 对响应变量的影响是显著的, 而 x_3 对响应变量的影响是不显著的. F 统计量的值为 5690, p 值 $< 2.2 \times 10^{-16} < 0.05$, 可以认为所建立的回归方程显著有效. *Multiple R-Squared* 称为复相关系数, 其定义为

$$R^2 := \frac{SS_R}{SS_T} = 1 - \frac{RSS}{SS_T},$$

它衡量了各自变量对响应变量变动的解释程度, 其值越接近于 1, 自变量的解释程度越高. 本例中 $R^2 = 0.9982$, 表明回归方程拟合效果较好.

我们知道, 自变量个数越多, 残差就越小. 当自变量个数与观测数据个数相同时, 残差平方和可以为 0, $R^2 = 1$. 因此, 复相关系数仅表达了模型的拟合程度, 这未必合适. 为消除自变量个数的影响, 统计学家提出调整的相关系数 (*Adjusted R-squared*) 的概念, 其定义为

$$R_A^2 := 1 - \frac{RSS/(n-m)}{SS_T/(n-1)},$$

注意, 计算自变量个数 m 时, 应当把截距项也算进来, 即本例中 $m = 3 + 1 = 4$. 本例中, $R_A^2 = 0.9981$, 表明回归方程拟合较好.

最后做个简单总结: R 语言 lm() 函数输出结果中的 t 统计量是检验变量的显著性的, F 统计量是检验回归方程整体的显著性的, 而复相关系数和修正的相关系数是表征回归方程的拟合程度的.

3.1.3 病态性及其处理方法

由3.1.1节的内容可知, 当矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 存在小的特征值, 即病态时, 最小二乘估计 $\hat{\beta}$ 的均方误差可能会变得很大. 造成矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 病态的原因有两个:

- 一是 $n < m$, 即样本量比参数维数还少, 这类问题在高维数据中常常出现, 近 20 年来已成为统计学家研究的热点问题之一;
- 二是矩阵 \mathbf{X} 的复共线性 (multicollinearity), 即存在不全为 0 的常数 c_1, \dots, c_m , 使得

$$\|c_1 \mathbf{X}_1 + \dots + c_m \mathbf{X}_m\|_2 \approx 0, \quad (3.19)$$

其中 $X_j (j = 1, 2, \dots, m)$ 表示广义设计矩阵 \mathbf{X} 的第 j 列. 复共线性将使得 $\det(\mathbf{X}^T \mathbf{X}) \approx 0$, 这也可以作为复共线性的诊断判据.

“multicollinearity”一词最初是由统计学家 Frish 于 1934 年在其论文《借助于完全回归系统的统计合流分析》中提出的. 它的原意是指回归模型中的一些或部分解释变量之间存在一种“完全”或准确的共线性, 即存在不全为 0 的 m 个数 c_1, c_2, \dots, c_m , 使得

$$\sum_{j=1}^m c_j \mathbf{X}_j = \mathbf{0},$$

这种完全的复共线性在实际问题中是很少遇到的, 更多的是(3.19)式给出的近似复共线性的情况. 复共线性体现了因果性的复杂性, 即多个原因之间可能不是独立的, 有相关关系.

例 3.3. 假设 x_1, x_2 与 y 之间存在模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon$$

所示的关系, 其中 $\beta_0 = 10, \beta_1 = 2, \beta_2 = 3$. 考虑如下设计矩阵

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 & 1.0 \\ 1.1 & 1.4 & 1.7 & 1.7 & 1.8 & 1.8 & 1.9 & 2.0 & 2.3 & 2.4 \\ 1.1 & 1.5 & 1.8 & 1.7 & 1.9 & 1.8 & 1.8 & 2.1 & 2.4 & 2.5 \end{bmatrix}^T,$$

显然, 该设计矩阵的列之间存在较强的相关性. 用随机模拟产生正态分布的随机误差的 10 次观测值

$$\varepsilon = [0.8, -0.5, 0.4, -0.05, 0.2, 1.9, 1.9, 0.6, -1.5, -0.5]^T.$$

由模型 $y = 10 + 2x_1 + 3x_2 + \varepsilon$ 得到 y 的 10 次观测值:

$$\mathbf{y} = [16.3, 16.8, 19.2, 18.0, 19.5, 20.9, 21.1, 20.9, 20.3, 22.0]^T.$$

利用最小二乘法得到 β 的估计为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = [11.292, 11.307, -6.591]^T,$$

与参数真值之间差异很大. 其原因正是设计矩阵 \mathbf{X} 的各列之间相关性太强. 当然, 从试验设计的角度而言, 我们会尽量避免这种情况的出现. 但是如果 x_1 或者 x_2 之间只有一个可控的变量, 另一个变量与之有很强烈的内在的联系, 则这种复共线性是难以避免的.

从理论上来看, 当线性回归模型存在复共线性时, 若仍然采用普通的最小二乘法估计模型参数, 会产生如下不良后果:

- (1) 完全复共线性下模型参数的最小二乘估计不存在. 这是由于当(3.19)中等号成立时, 矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 不可逆.
- (2) 复共线性下模型参数的最小二乘估计非有效. 这是由于存在复共线性时, $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的方差矩阵 $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$ 的对角元会变得很大.
- (3) 复共线性下自变量的显著性检验没有意义.
- (4) 模型的预测变得不可靠.

下面看一个实例.

例 3.4. 表 3.2 给出了我国 1991-2006 年猪肉价格及其影响因素数据. 其中: y 表示猪肉价格, 单位为元/千克; x_1 表示消费价格指数, 即 CPI; x_2 表示人口数量, 单位为亿; x_3 表示年末存栏量, 单位为万头; x_4 表示城镇居民可支配收入, 单位为元; x_5 表示玉米价格, 单位为元/吨; x_6 表示猪肉生产量, 单位为万吨.

记 $y^* = \log y$, $z_1 = \log x_1, \dots, z_6 = \log x_6$. 对表 3.2 中的数据建立如下线性回归模型:

$$y^* = \beta_0 + \sum_{j=1}^6 \beta_j z_j + \varepsilon.$$

将表 3.2 中数据存储为 txt 格式, 并将文件命名为 “porkpricedata.txt”. 在 R 中利用代码块

```

1 porkpricedata <- read.table("porkpricedata.txt");
2 y <- log(porkpricedata[,2]);
3 z1 <- log(porkpricedata[,3]);
4 z2 <- log(porkpricedata[,4]);
5 z3 <- log(porkpricedata[,5]);
6 z4 <- log(porkpricedata[,6]);
7 z5 <- log(porkpricedata[,7]);
8 z6 <- log(porkpricedata[,8]);
9 ppd_result <- lm(y ~ z1 + z2 + z3 + z4 + z5 + z6);
10 summary(ppd_result)

```

可得到结果如下:

表 3.2: 我国 1991-2006 年猪肉价格及其影响因素

年份	y	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
1990	9.84	103.1	14.39	36241	1510.2	686.7	2281
1991	10.32	103.4	12.98	36965	1700.6	590	2452
1992	10.65	106.4	11.60	38421	2026.6	625	2635
1993	10.49	114.7	11.45	39300	2577.4	726.7	2854
1994	9.16	124.1	11.21	41462	3496.2	1004.2	3205
1995	10.18	117.1	10.55	44169	4283	1576.7	3648
1996	14.96	107.9	10.42	36284	4838.9	1481.7	3158
1997	11.81	102.8	10.06	40035	5160.3	1150.8	3596
1998	10.77	99.2	9.14	42256	5425.1	1269.2	3884
1999	8.38	98.6	8.18	43020	5854	1092.5	3891
2000	8.74	100.4	7.58	44682	6280	887.5	4031
2001	10.18	100.7	6.95	45743	6859.6	1060	4184
2002	9.85	99.2	6.45	46292	7702.8	1033.3	4327
2003	10.7	101.2	6.01	46602	8472.2	1087.5	4519
2004	13.97	103.9	5.87	48189	9421.6	1288.3	4702
2005	13.39	101.8	5.89	50335	10493	1229.2	5011
2006	14.03	101.5	5.28	49441	13172	1280	5197

```

1 Call:
2 lm(formula = y ~ z1 + z2 + z3 + z4 + z5 + z6)
3
4 Residuals:
5   Min     1Q   Median     3Q    Max
6 -0.240615 -0.094805  0.003942  0.100881  0.201397
7
8 Coefficients:
9   Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
10 (Intercept) 15.03498 17.44684 0.862 0.409
11 z1          0.26583  1.02862 0.258 0.801
12 z2         -0.89505  1.00900 -0.887 0.396
13 z3          0.08584  3.12736 0.027 0.979
14 z4          0.46123  1.08240 0.426 0.679
15 z5          0.42119  0.36391 1.157 0.274
16 z6         -2.40388  3.08755 -0.779 0.454
17
18 Residual standard error: 0.156 on 10 degrees of freedom
19 Multiple R-squared: 0.4684, Adjusted R-squared: 0.1494
20 F-statistic: 1.468 on 6 and 10 DF, p-value: 0.2817

```

从结果中可以看出, 部分参数的估计标准误差极大, 如 $\hat{\beta}_3 = 0.08584$, 但其标准误差为 3.12736. 这可能是由于变量之间存在复共线性造成的, 我们希望对这一问题是否存在复共线性进行诊断.

下面介绍用于诊断回归方程是否存在复共线性的方差膨胀因子法. 首先对广义设计矩阵

\mathbf{X} 作中心标准化处理, 即

$$X_{ij}^* = \frac{X_{ij} - \bar{X}_{\cdot j}}{\sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(X_{ij} - \bar{X}_{\cdot j} \right)^2}},$$

得到中心标准化后的设计矩阵 \mathbf{X}^* . 中心化标准化可借助添加包 “MASS” 中的函数 “scale()” 来实现. 则 $(\mathbf{X}^*)^T \mathbf{X}^*$ 为诸各列 $f_j(\mathbf{x}_i)$ 之间的相关阵. 记

$$\mathbf{C} = (c_{ij}) = [(\mathbf{X}^*)^T \mathbf{X}^*]^{-1}.$$

自变量 $f_j(\mathbf{x})$ 的方差膨胀因子 (*variance inflation factor, VIF*) 定义为

$$\text{VIF}_j := c_{jj}.$$

由于最小二乘估计的方差阵为 $\text{Var}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}$, 可以验证

$$\text{Var}(\hat{\beta}_j) = c_{jj} \sigma^2 / L_{jj},$$

其中

$$L_{jj} = \sum_{i=1}^n \left(X_{ij} - \bar{X}_{\cdot j} \right)^2$$

表示矩阵 \mathbf{X} 的第 j 列的离差平方和, 它完全由 \mathbf{X} 的第 j 列决定. 因而用 c_{jj} 作为度量 $f_j(\mathbf{x})$ 的方差膨胀程度的因子是非常合适的. 记 R_j^2 为利用其余自变量来拟合第 j 个自变量的复相关系数, 可以证明

$$c_{jj} = \frac{1}{1 - R_j^2},$$

故 VIF_j 越大, 表明第 j 个自变量越容易由其余自变量线性表出, 复共线性程度也就越强. 而 VIF_j 越接近与 1, 表明复共线性越弱. 在实际操作中, 如果 $\text{VIF}_j \geq 10$, 则可以认为存在复共线性.

添加包 DAAG 提供了计算 VIF 的函数, 其代码为:

```
1 install.packages("DAAG")
2 library(DAAG)
3 vif(ppd_result, digits = 3)
```

其中第一行是安装添加包 “DAAG”, 必须在联网状态下才行. 如果已经安装完毕, 则不需要此行. 得到结果如下:

1	z_1	z_2	z_3	z_4	z_5	z_6
2	2.92	66.30	73.40	315.00	7.47	385.00

z_6 的方差膨胀因子高达 385.00, 表明本例自变量之间的复共线性非常强.

根据病态性产生的原因, 其处理方法一般从以下几个角度着手.

- 从数据着手, 增加样本量;
- 从模型着手, 剔除一些不重要的自变量, 或引入一些先验信息, 或干脆改变模型的形式;
- 从参数估计方法着手, 如引入有偏估计, 通过降低方差来减小均方误差.

尽管这些方法的角度不同, 但其数学形式可能一致. 例如有偏估计的形式可能与引入参数先验信息后得到的估计形式一致. 后两节简单介绍自变量选择方法和惩罚最小二乘估计方法.

3.1.4 自变量选择方法

从向量值函数 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})]^T$ 中挑选一部分分量 $f_j(\mathbf{x})$ 构成新的线性回归模型, 每个 $f_j(\mathbf{x})$ 都有选中和未选中两种可能, 因而所有可能的回归方程有 2^m 个. 自变量选择的意图是从这 2^m 个回归方程中挑选出某种准则下最好的那一个.

如果真实模型是选模型(3.14)式, 那么删掉 \mathbf{X}_r 是必要的. 而如果真实模型是全模型(3.13)式, 错误地删除一些自变量会造成什么影响呢? 请看以下命题.

命题 3.6. 设真实模型为全模型(3.13)式, 但误选选模型(3.14)式, 则

- (1) 如果 \mathbf{X}_k 与 \mathbf{X}_r 相关, 即 $\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_r \neq \mathbf{0}$, 则最小二乘估计 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k$ 是 $\boldsymbol{\beta}_k$ 的有偏估计, 且预测也是有偏的;
- (2) $\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_k) - \text{Var}(\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k)$ 为正定矩阵, 选模型的预测残差的方差也比全模型的预测残差的方差小;
- (3) 如果 $\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_r) \geq \boldsymbol{\beta}_r \boldsymbol{\beta}_r^T$, 则 $\text{Var}(\hat{\boldsymbol{\beta}}_k) \geq \mathbb{E}[(\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k - \boldsymbol{\beta}_k)(\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k - \boldsymbol{\beta}_k)^T]$.

其中, $\hat{\boldsymbol{\beta}}_k$ 为利用全模型估计得到的 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的前 k 个分量, 而 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k$ 为直接利用选模型得到的参数估计值.

结论 (1) 可通过直接对 $\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k$ 求期望得到:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k) &= (\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^T \mathbb{E}(\mathbf{y}) = (\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^T \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} \\ &= \boldsymbol{\beta}_k + (\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_r \boldsymbol{\beta}_r,\end{aligned}$$

可见当 $\mathbf{X}_k^T \mathbf{X}_r \neq \mathbf{0}$ 时, $\tilde{\boldsymbol{\beta}}_k$ 是 $\boldsymbol{\beta}_k$ 的有偏估计. 结论 (2) 和结论 (3) 都要用到分块矩阵的求逆公式(3.16)式, 这里就不再证明了, 读者可自行验证. 结论 (1) 和结论 (2) 表明, 尽管全模型正确而误用选模型会使得参数估计和模型预测都不是无偏的, 但参数估计的方差和预测残差的方差都下降了, 结论 (3) 则说明丢掉一些难以估计的自变量会降低其它自变量对应的回归系数的最小二乘估计的均方误差. 下面给出几种常用的自变量选择准则.

残差准则 从数据与模型的拟合程度来看, 使残差平方和达到最小的回归方程就是最好的模型了. 然而, 可以证明当自变量个数增加时, 残差平方和单调下降. 如果认为残差平方和越小越好, 自变量的数目无疑越多越好. 因而不能简单地以残差平方和作为自变量选择的准则. 注意到 σ^2 的无偏估计为

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\text{RSS}}{n-m},$$

其分子和分母都随着自变量个数的增加而减小。一般来说，当 m 较小时，RSS 随着 m 增加而下降的速度比较快，使得 $\hat{\sigma}$ 整体呈下降的趋势；而当 m 较大时，增加一个自变量对 RSS 的改善作用较小，使得 $\hat{\sigma}$ 反而呈上升的趋势。因此可以以 $\hat{\sigma}^2$ 作为自变量选择的准则，以最小 $\hat{\sigma}^2$ 对应的回归方程作为最优回归方程。

C_p 准则 Mallows 于 1964 年从预测的角度提出自变量选择的 C_p 准则。考虑全模型(3.13)和选模型(3.14)的比较。假如选择最优模型的目的是为了给出响应 $\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$ 的最优估计，那么应使

$$\begin{aligned}\mathbb{E} \left\| \mathbf{X}_k \tilde{\boldsymbol{\beta}}_k - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \right\|^2 &= \left\| \mathbf{X}_k (\mathbf{X}_k^\top \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^\top (\mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}) - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} \right\|^2 \\ &= \left\| [\mathbf{X}_k (\mathbf{X}_k^\top \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^\top \mathbf{X}_r - \mathbf{X}_r] \boldsymbol{\beta}_r + \mathbf{X}_k (\mathbf{X}_k^\top \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^\top \boldsymbol{\varepsilon} \right\|^2 \quad (3.20) \\ &= k\sigma^2 + \left\| \mathbf{X}_{rr} \boldsymbol{\beta}_r \right\|^2\end{aligned}$$

最小，其中 $\mathbf{X}_{rr} = \mathbf{X}_r - \mathbf{X}_k (\mathbf{X}_k^\top \mathbf{X}_k)^{-1} \mathbf{X}_k^\top \mathbf{X}_r$ 。上式中的 σ^2 和 $\boldsymbol{\beta}_r$ 未知，以它们的估计值 $\hat{\sigma}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\beta}}_r$ 来代替。利用分块矩阵的求逆公式(3.16)式可以得到

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_r = (\mathbf{X}_{rr}^\top \mathbf{X}_{rr})^{-1} \mathbf{X}_{rr}^\top \mathbf{y} = \boldsymbol{\beta}_r + (\mathbf{X}_{rr}^\top \mathbf{X}_{rr})^{-1} \mathbf{X}_{rr}^\top \boldsymbol{\varepsilon},$$

故

$$\mathbb{E} \left\| \mathbf{X}_{rr} \hat{\boldsymbol{\beta}}_r \right\|^2 = \left\| \mathbf{X}_{rr} \boldsymbol{\beta}_r \right\|^2 + (n-k)\sigma^2.$$

构造统计量

$$J_k = k\hat{\sigma}^2 + \left\| \mathbf{X}_{rr} \hat{\boldsymbol{\beta}}_r \right\|^2 - (n-k)\hat{\sigma}^2 = \left\| \mathbf{X}_{rr} \hat{\boldsymbol{\beta}}_r \right\|^2 + (2k-n)\hat{\sigma}^2.$$

若 J_k 达到最小，则可以认为式(3.20)达到最小。记

$$C_k = \frac{1}{\hat{\sigma}^2} \left\| \mathbf{y} - \mathbf{X}_k \tilde{\boldsymbol{\beta}}_k \right\|^2 + 2k - n,$$

则可以证明 $C_k = J_k/\hat{\sigma}^2$ 。由此得到一个选择变量的准则，即 C_k 准则：选择使 C_k 最小的自变量子集，这个自变量子集所对应的回归方程就是最优回归方程。

需要指出的是， C_p 统计量是基于最小二乘估计的。最小二乘估计对异常值及偏离误差正态性假定有关的其他假设条件十分敏感。因此， C_p 准则在存在异常值、或误差假定不成立时，可能会选择不恰当的自变量子集。

AIC 准则 日本学者 Akaike 从极大似然估计的角度出发，于 1974 年提出了一种可用于一般的模型选择的准则：AIC(Akaike Information Criterion)。设参数模型的似然函数为 $L(\boldsymbol{\theta}, \mathcal{D}_n)$ ， $\boldsymbol{\theta}$ 为 m 维参数， \mathcal{D}_n 为样本，则 AIC 定义为

$$\text{AIC} := -2 \log \left(L(\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{MLE}}, \mathcal{D}_n) \right) + 2m, \quad (3.21)$$

其中 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\text{MLE}}$ 为参数的极大似然估计，引入数字“2”是为了计算方便。(3.21)式的第一项表示模型对数据的拟合程度(fitness)，第二项为惩罚项，可以理解为对模型复杂度的惩罚，很多模

型选择准则都可以表示为拟合项和惩罚项加和的形式。AIC 选择使 AIC 达到最小的模型作为最优模型。对于误差服从正态分布 $N(0, \sigma^2)$ 的线性模型(3.4), 其对数似然函数为

$$\log L_{\max} = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log(\hat{\sigma}_{\text{MLE}}^2) - \frac{1}{2\hat{\sigma}_{\text{MLE}}^2} \|\hat{\beta}_{\text{MLE}} - \beta\|^2.$$

将 $\hat{\sigma}_{\text{MLE}}^2 = \frac{1}{n} \|\hat{\beta}_{\text{MLE}} - \beta\|^2$ 代入上式, 可得

$$\log L_{\max} = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log\left(\frac{1}{n} \|\hat{\beta}_{\text{MLE}} - \beta\|^2\right) - \frac{n}{2}.$$

将上式代入 AIC 准则并略去与 m 无关的项, 得到

$$\text{AIC} = n \log\left(\|\hat{\beta}_{\text{MLE}} - \beta\|^2\right) + 2m.$$

BIC 准则 理论分析表明, 当样本量趋于无穷时, AIC 选择的模型不收敛于真实模型, 即 AIC 不是相合的, 它选择的模型通常比真实模型未知参数的个数要多。为了弥补 AIC 的不足, Akaike(1976) 和 Haman(1979) 等学者提出了 BIC(Bayesian Information Criterion):

$$\text{BIC} := -2 \log(L(\hat{\theta}_{\text{MLE}}, \mathcal{D}_n)) + m \log n. \quad (3.22)$$

与 AIC 相比, BIC 对模型参数个数的惩罚加强了, 从而在选择变量加入模型上更加谨慎。

逐步回归法 采用自变量选择准则确定回归方程时, 需要比较 2^m 个回归方程的优劣。当 m 较大时, 要求出所有的回归方程是非常困难的。为此, 学者们提出了一些简便、实用、快捷的方法。如向前法: 变量由少到多, 利用 F 检验每次增加一个, 直到没有可以引用的变量为止; 向后法: 首先利用 m 个变量建立回归方程, 然后利用 F 检验逐个剔除变量; 逐步回归法: 变量有入有出, 将自变量一个个地引入回归方程, 每引入一个自变量后, 都对已选入的自变量进行逐个检验, 当先引入的自变量由于后引入的自变量而变得不再显著时, 就将其剔除。从回归方程中引入或剔除一个自变量是逐步回归法的一步, 而每一步都要进行 F 检验, 直到既无显著变量引入方程, 也无不显著变量从回归方程中剔除为止。

例 3.5. 在研究国家财政收入时, 把财政收入分为: 各项税收收入、企业收入、债务收入、国家能源交通重点建设基金收入、基本建设贷款归还收入、国家预算调节基金收入、其它收入等。为了建立国家财政收入回归模型, 以财政收入 y 为响应变量, 单位为亿元。自变量包括: 农业增加值 x_1 , 单位为亿元; 工业增加值 x_2 , 单位为亿元; 建筑业增加值 x_3 , 单位为亿元; 人口数量 x_4 , 单位为万人; 社会消费总额 x_5 , 单位为亿元; 受灾面积 x_6 , 单位为万公顷。从《中国统计年鉴》中获得 1978-2007 年共 30 年的统计数据, 如表 3.3 所示。

采用逐步回归法来分析该数据。将表 3.3 中的数据保存为文本文档 *FinancialData.txt*, 然后使用代码

表 3.3: 1978-2007 年的部分经济数据

年份	y	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6
1978	1132.30	1027.5	1607.0	138.2	96259	2239.1	50790
1979	1146.40	1270.2	1769.7	143.8	97542	2633.7	39370
1980	1159.90	1371.6	1996.5	195.5	98705	3007.9	44526
1981	1175.80	1559.5	2048.4	207.1	100072	3361.5	39790
1982	1212.30	1777.4	2162.3	220.7	101654	3714.8	33130
1983	1367.00	1978.4	2375.6	270.6	103008	4126.4	34710
1984	1642.90	2316.1	2789.0	316.7	104357	4846.3	31890
1985	2004.80	2564.4	3448.7	417.9	105851	5986.3	44365
1986	2122.00	2788.7	3967.0	525.7	107507	6821.8	47140
1987	2199.40	3233.0	4585.8	665.8	109300	7804.6	42090
1988	2357.20	3865.4	5777.2	810.0	111026	9839.5	50870
1989	2664.90	4265.9	6484.0	794.0	112704	11164.2	46991
1990	2937.10	5062.0	6858.0	859.4	114333	12090.5	38474
1991	3149.48	5342.2	8087.1	1015.1	115823	14091.9	55472
1992	3483.37	5866.6	10284.5	1415.0	117171	17203.3	51333
1993	4348.95	6963.8	14188.0	2266.5	118517	21899.9	48829
1994	5218.10	9572.7	19480.7	2964.7	119850	29242.2	55043
1995	6242.20	12135.8	24950.6	3728.8	121121	36748.2	45821
1996	7407.99	14015.4	29447.6	4387.4	122389	43919.5	46989
1997	8651.14	14441.9	32921.4	4621.6	123626	48140.6	53429
1998	9875.95	14817.6	34018.4	4985.8	124761	51588.2	50145
1999	11444.08	14770.0	35861.5	5172.1	125786	55636.9	49981
2000	13395.23	14944.7	4003.6	5522.3	126743	61516.0	54688
2001	16386.04	15781.3	43580.6	5931.7	127627	66878.3	52215
2002	18903.64	16537.0	47431.3	6465.5	128453	71691.2	47119
2003	21715.25	17381.7	54945.5	7490.8	129227	77449.5	54506
2004	26396.47	21412.7	65210.0	8694.3	129988	87032.9	37106
2005	31649.29	22420.0	76912.9	10133.8	130756	96918.1	38818
2006	38760.20	24040.0	91310.9	11851.1	131448	110595.3	41091
2007	51321.78	28095.0	107367.2	14014.1	132129	128444.6	48992

```

1 finadata <- read.table("FinancialData.txt");
2 y <- finadata[,2];
3 x1 <- finadata[,3];
4 x2 <- finadata[,4];
5 x3 <- finadata[,5];
6 x4 <- finadata[,6];
7 x5 <- finadata[,7];
8 x6 <- finadata[,8];
9 finadata1 <- data.frame(y, x1, x2, x3, x4, x5, x6)

```

将数据读入数据框 finadata1 中。

首先利用向前回归方法分析该数据，代码为

```

1 lm.reg <- lm(y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6, data = finadata1)
2 forward_results <- step(lm.reg, direction = "forward")

```

得到结果为

```

1 Start: AIC=441.3
2 y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6

```

表明如果用向前法选择自变量，则所有的自变量都选入，且 $AIC = 441.3$ 。调用 `summary()` 函数提取相关信息如下：

```

> summary(forward_results)
Call:
lm(formula = y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6, data = finadata1)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-2382.9 -526.2 -224.4  492.5 3454.3 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) -3.612e+03 8.721e+03 -0.414 0.683    
x1          -1.960e+00 3.415e-01 -5.740 7.60e-06 ***  
x2           5.644e-02 4.326e-02 1.305  0.205    
x3           5.641e+00 1.166e+00 4.839  6.96e-05 ***  
x4           7.820e-02 9.241e-02 0.846  0.406    
x5           9.740e-02 1.117e-01 0.872  0.392    
x6          -2.862e-02 4.645e-02 -0.616  0.544    
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1 

Residual standard error: 1414 on 23 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.99, Adjusted R-squared:  0.9874 
F-statistic: 378.8 on 6 and 23 DF, p-value: < 2.2e-16

```

从提取的结果可以看出，回归方程的显著性不高，很多自变量都没有通过检验，这说明把全部自变量都选入结果并不好。

考虑向后回归法，其代码和结果为

```

> backward_results <- step(lm.reg, direction = "backward")
Start: AIC=441.3
y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6

Df Sum of Sq   RSS   AIC
- x6  1    759889 46772643 439.79
- x4  1   1432622 47445375 440.22
- x5  1   1522055 47534809 440.27
<none>          46012754 441.30
- x2  1   3405883 49418637 441.44
- x3  1   46846456 92859210 460.36
- x1  1   65908063 111920817 465.96

Step: AIC=439.79
y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5

Df Sum of Sq   RSS   AIC
- x4  1    931831 47704475 438.38
- x5  1   1518392 48291035 438.75
<none>          46772643 439.79
- x2  1   4237664 51010307 440.39
- x3  1   46405452 93178096 458.46
- x1  1   65192444 111965087 463.98

Step: AIC=438.38
y ~ x1 + x2 + x3 + x5

```

```

28      Df Sum of Sq   RSS   AIC
29 - x5  1  2274461 49978936 437.78
30 <none>           47704475 438.38
31 - x2  1  4205527 51910001 438.91
32 - x3  1  51607279 99311754 458.38
33 - x1  1 121260265 168964739 474.32
34
35 Step: AIC=437.78
36 y ~ x1 + x2 + x3
37
38      Df Sum of Sq   RSS   AIC
39 - x2  1  2771471 52750407 437.40
40 <none>           49978936 437.78
41 - x1  1 150278809 200257745 477.42
42 - x3  1 240778293 290757229 488.60
43
44 Step: AIC=437.4
45 y ~ x1 + x3
46
47      Df Sum of Sq   RSS   AIC
48 <none>           52750407 437.40
49 - x1  1 184435530 237185937 480.49
50 - x3  1 654483842 707234249 513.27

```

从结果中可以看出：在第一步时，如果用全部变量做回归方程， $AIC = 441.3$ ；如果剔除变量 x_5 ，则 $AIC = 440.27$ ；如果剔除变量 x_1 ，则 $AIC = 465.96$ ；等等。由于剔除变量 x_6 能够使得 AIC 达到最低值 439.78，因此 R 软件会自动剔除 x_6 ，并进入下一步的计算。如此反复迭代后，最后只保留了 x_1 和 x_3 。调用函数 `summary()`，结果展示为

```

1 > summary(backward_results)
2
3 Call:
4 lm(formula = y ~ x1 + x3, data = finadata1)
5
6 Residuals:
7   Min     1Q Median     3Q    Max
8 -2186.7 -931.4 -410.1  706.7 2893.0
9
10 Coefficients:
11             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
12 (Intercept) 3067.8676 564.2449 5.437 9.43e-06 ***
13 x1          -1.7086   0.1759 -9.716 2.62e-10 ***
14 x3          6.6621   0.3640 18.303 < 2e-16 ***
15 ---
16 Signif. codes: 0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1
17
18 Residual standard error: 1398 on 27 degrees of freedom
19 Multiple R-squared: 0.9885, Adjusted R-squared: 0.9877
20 F-statistic: 1162 on 2 and 27 DF, p-value: < 2.2e-16

```

最后考虑逐步回归法进行变量选择，其代码和结果为

```

1 > both_results <- step(lm.reg, direction = "both")
2 Start: AIC=441.3
3 y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5 + x6
4
5      Df Sum of Sq   RSS   AIC
6 - x6  1  759889 46772643 439.79
7 - x4  1 1432622 47445375 440.22
8 - x5  1 1522055 47534809 440.27
9 <none>           46012754 441.30
10 - x2  1 3405883 49418637 441.44

```

```

11 - x3 1 46846456 92859210 460.36
12 - x1 1 65908063 111920817 465.96
13
14 Step: AIC=439.79
15 y ~ x1 + x2 + x3 + x4 + x5
16
17 Df Sum of Sq RSS AIC
18 - x4 1 931831 47704475 438.38
19 - x5 1 1518392 48291035 438.75
20 <none> 46772643 439.79
21 - x2 1 4237664 51010307 440.39
22 + x6 1 759889 46012754 441.30
23 - x3 1 46405452 93178096 458.46
24 - x1 1 65192444 111965087 463.98
25
26 Step: AIC=438.38
27 y ~ x1 + x2 + x3 + x5
28
29 Df Sum of Sq RSS AIC
30 - x5 1 2274461 49978936 437.78
31 <none> 47704475 438.38
32 - x2 1 4205527 51910001 438.91
33 + x4 1 931831 46772643 439.79
34 + x6 1 259099 47445375 440.22
35 - x3 1 51607279 99311754 458.38
36 - x1 1 121260265 168964739 474.32
37
38 Step: AIC=437.78
39 y ~ x1 + x2 + x3
40
41 Df Sum of Sq RSS AIC
42 - x2 1 2771471 52750407 437.40
43 <none> 49978936 437.78
44 + x5 1 2274461 47704475 438.38
45 + x4 1 1687901 48291035 438.75
46 + x6 1 147066 49831870 439.69
47 - x1 1 150278809 200257745 477.42
48 - x3 1 240778293 290757229 488.60
49
50 Step: AIC=437.4
51 y ~ x1 + x3
52
53 Df Sum of Sq RSS AIC
54 <none> 52750407 437.40
55 + x2 1 2771471 49978936 437.78
56 + x4 1 1323462 51426944 438.63
57 + x5 1 840405 51910001 438.91
58 + x6 1 556888 52193518 439.08
59 - x1 1 184435530 237185937 480.49
60 - x3 1 654483842 707234249 513.27

```

调用 `summary()` 函数, 得到

```

1 > summary(both_results)
2
3 Call:
4 lm(formula = y ~ x1 + x3, data = finadata1)
5
6 Residuals:
7   Min    1Q Median    3Q   Max
8 -2186.7 -931.4 -410.1  706.7 2893.0
9
10 Coefficients:
11             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
12 (Intercept) 3067.8676 564.2449 5.437 9.43e-06 ***

```

```

13 | x1      -1.7086  0.1759 -9.716 2.62e-10 ***
14 | x3      6.6621  0.3640 18.303 < 2e-16 ***
15 | ---
16 | Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
17 |
18 | Residual standard error: 1398 on 27 degrees of freedom
19 | Multiple R-squared: 0.9885, Adjusted R-squared: 0.9877
20 | F-statistic: 1162 on 2 and 27 DF, p-value: < 2.2e-16

```

可以看到，本例中逐步回归法和向后法计算路径完全一致，它们得到的回归方程均为

$$\hat{y} = 3067.8676 - 1.7086x_1 + 6.6621x_2.$$

且回归方程和选中的变量都通过了 $\alpha = 0.001$ 的显著性检验。

3.1.5 惩罚最小二乘估计

在最小二乘目标函数 $Q(\beta)$ 中引入 **惩罚项** (penalization term) 或**正则项** (regularization term)，构造新的优化模型：

$$Q^*(\beta) := (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) + \lambda P(\beta) \quad (3.23)$$

其中， $P(\beta)$ 是 β 的某种范数。上式中，第二项为惩罚项，称第一项为**拟合项** (fitness term)，它刻画了模型与数据之间的拟合程度。 λ 称为**惩罚因子**，它控制了惩罚与拟合之间的均衡。称使得 $Q^*(\beta)$ 达到最小的 $\hat{\beta}_\lambda$ 为**惩罚最小二乘估计** (penalized least square estimation)。

惩罚最小二乘估计是如何克服复共线性的呢？对目标函数 $Q^*(\beta)$ 求关于 β 的偏导数，得到新的正规方程：

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \beta - \frac{\lambda}{2} \frac{\partial P}{\partial \beta} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}.$$

求解上述方程一般需要利用迭代算法，除非 $P(\beta)$ 为 β 的二次型。可见，惩罚最小二乘估计将求矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 的逆转化为求矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 与某一矩阵的和的逆。如果惩罚项构造得比较恰当，新的矩阵将不再是病态的。

惩罚项 P 通常由 β 的先验信息得到，常见的惩罚项包括 ℓ_1 范数 $\|\beta\|_1$, ℓ_2 范数 $\|\beta\|_2$ ，以及它们的组合等等。 ℓ_1 范数对应 LASSO (Tibshirani, 1996), ℓ_2 范数对应**岭估计** (ridge estimation, Hoerl 1962)，它们的组合如 CSDA 等。岭估计将 β 的估计向原点压缩，LASSO 能使 β 部分分量的估计为零，因而自动实现变量选择的效果。

定义 3.7. 设 $0 < \lambda < \infty$, 称

$$\hat{\beta}_\lambda = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \quad (3.24)$$

为 β 的**岭估计** (ridge estimation)。

显然, 当 $\lambda = 0$ 时, 岭估计退化为普通的最小二乘估计, 而当 $\lambda \rightarrow \infty$ 时, $\hat{\beta}_\lambda \rightarrow \mathbf{0}$. 如果 λ 与 \mathbf{y} 无关, 则它还是 β 的线性估计. 记 $\mathbf{W}_\lambda = (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1}$. 如果 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$, 则 \mathbf{W}_λ^{-1} 的特征值为 $\lambda_1 + \lambda, \lambda_2 + \lambda, \dots, \lambda_m + \lambda$. 由于 $0 < \lambda < \infty$, 所以当 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 奇异时, \mathbf{W}_λ^{-1} 能有效地克服奇异性.

由于

$$\begin{aligned}\hat{\beta}_\lambda &= (\mathbf{X}^T \mathbf{X} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \\ &= [\mathbf{I} + \lambda (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}]^{-1} (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} \\ &= [\mathbf{I} + \lambda (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1}]^{-1} \hat{\beta},\end{aligned}$$

从而, 当考虑 λ 为与 \mathbf{y} 无关的常数时, $\hat{\beta}_\lambda$ 是 $\hat{\beta}$ 的一个线性变换, 并且当 $\lambda \neq 0$ 时, $\hat{\beta}_\lambda$ 是 β 的有偏估计. 为了使岭估计优于最小二乘估计, 需要找到某个 $\lambda > 0$, 使得 $\text{MSE}(\hat{\beta}_\lambda) < \text{MSE}(\hat{\beta})$. 可以证明,

- (1) 对任意 $\lambda > 0$, 都有 $\|\hat{\beta}_\lambda\|_2 < \|\hat{\beta}\|_2$;
- (2) 存在 $\lambda > 0$, 使得 $\text{MSE}(\hat{\beta}_\lambda) < \text{MSE}(\hat{\beta})$ 成立.

结论 (1) 表明 $\hat{\beta}_\lambda$ 可看成是由 $\hat{\beta}$ 进行某种向原点的压缩. 结论 (2) 则表明选择合适的惩罚因子, 岭估计能够改善最小二乘估计. 在实际操作中, λ 的确定可采用交叉验证法, 将在3.5节中介绍.

例 3.6. 表3.4是 Malinvand 于 1966 年用来研究法国经济问题的一组数据. 所考虑的响应变量为进口总额 y , 三个解释变量分别为: 国内生产总值 x_1 , 储存量 x_2 和总消费量 x_3 , 单位均为 10 亿法郎. 如果直接采用最小二乘法, 得到 y 关于 x_1, x_2 和 x_3 的回归方程为

表 3.4: 1949-1959 年法国进出口总额与相关变量的数据

年份	x_1	x_2	x_3	y
1949	149.3	4.2	108.1	15.9
1950	171.5	4.1	114.8	16.4
1951	175.5	3.1	123.2	19.0
1952	180.8	3.1	126.9	19.1
1953	190.7	1.1	132.1	18.8
1954	202.1	2.2	137.7	20.4
1955	202.1	2.1	146.0	22.7
1956	212.4	5.6	154.1	26.5
1957	226.1	5.0	162.3	28.1
1958	231.9	5.1	164.3	27.6
1959	239.0	0.7	167.6	26.3

$$\hat{y} = -10.128 - 0.051x_1 + 0.587x_2 + 0.287x_3.$$

x_1 的回归系数为负, 表明国内生产总值越大, 法国的进口总额反而越低. 这不符合经济意义, 因为法国是一个原料进口国. 产生这一结果的原因是三个自变量 x_1, x_2 和 x_3 之间存在复共线性, 这可从三者的相关矩阵

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1.0 & 0.026 & 0.997 \\ 0.026 & 1.0 & 0.036 \\ 0.997 & 0.036 & 1.0 \end{bmatrix}$$

中看出, 也可利用例 3.4 中提到的复共线性诊断方法进行诊断. 实际上, 国内生产总值 x_1 和总消费量 x_3 之间存在很强的正相关性, 这在经济上很容易理解. 国内生产总值提高了, 会导致消费总量上升.

下面利用岭估计来处理本例. 首先对数据进行标准化, 这可以利用 R 语言添加包 “MASS” 提供的函数 “*scale()*” 来实现. 假设标准化回归方程为

$$\hat{y}^* = \hat{\beta}_1^* x_1^* + \hat{\beta}_2^* x_2^* + \hat{\beta}_3^* x_3^*.$$

对不同的岭参数 λ , 分别计算响应的回归系数的岭估计. 代码如下

```

1 library(MASS)
2 FranceData <- read.table("FranceI0Data.txt");
3 sd_FD <- scale(FranceData);
4 x1 <- sd_FD[,2];
5 x2 <- sd_FD[,3];
6 x3 <- sd_FD[,4];
7 y <- sd_FD[,5];
8 ridge_result <- lm.ridge(y ~ 0 + x1 + x2 + x3, data = data.frame(sd_FD), lambda =
  c(seq(0, 0.01, 0.001), seq(0.02, 0.1, 0.01), seq(0.2, 1, 0.1)))

```

输出 *ridge_result*, 得到结果

	x_1	x_2	x_3
1	0.000	-0.45558549	0.1852785
2	0.001	-0.44781292	0.1857963
3	0.002	-0.44017037	0.1863051
4	0.003	-0.43265461	0.1868051
5	0.004	-0.42526252	0.1872965
6	0.005	-0.41799108	0.1877796
7	0.006	-0.41083737	0.1882545
8	0.007	-0.40379856	0.1887214
9	0.008	-0.39687192	0.1891806
10	0.009	-0.39005478	0.1896322
11	0.010	-0.38334459	0.1900764
12	0.020	-0.32161253	0.1941461
13	0.030	-0.26825747	0.1976353
14	0.040	-0.22168765	0.2006546
15	0.050	-0.18069056	0.2032878
16	0.060	-0.14432634	0.2056002
17	0.070	-0.11185523	0.2076431
18	0.080	-0.08268699	0.2094573
19	0.090	-0.05634495	0.2110760
20	0.100	-0.03243997	0.2125261
21	0.200	0.12317434	0.2212633
22	0.300	0.20333098	0.2248062
23	0.400	0.25175125	0.2261851
24	0.500	0.28385248	0.2264681
25			0.6539301

```

26 | 0.600 0.30646148 0.2261275 0.6271454
27 | 0.700 0.32306619 0.2254043 0.6064026
28 | 0.800 0.33563447 0.2244341 0.5897331
29 | 0.900 0.34536079 0.2232988 0.5759418
30 | 1.000 0.35301215 0.2220508 0.5642612

```

利用代码

```

1 plot(ridge_result, xlab = "lambda", ylab = "coefficients")
2 legend(x=0.8,y=1.4, legend = c("beta1", "beta2", "beta3"), lwd = c(2,2,2), lty = c
(1,2,3), col = c('black','red','green'))

```

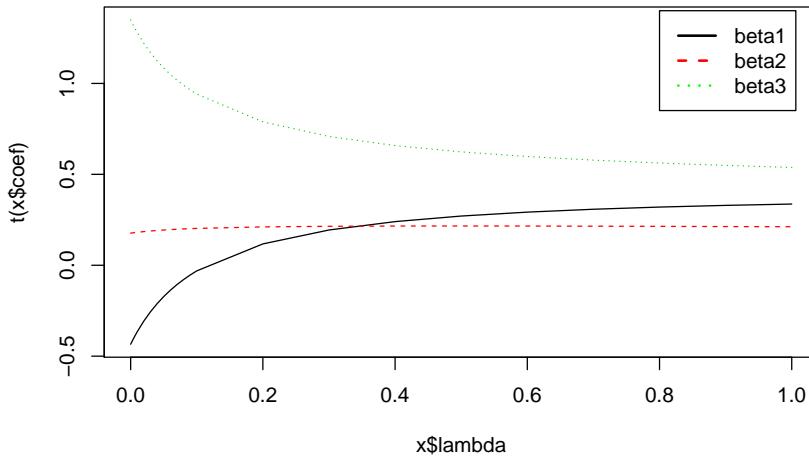


图 3.2: 岭迹图

得到岭迹图 3.2, 从图中可以看出, 随着 λ 的增大, 各岭迹很快趋于稳定. 当 $k \geq 0.6$ 时, 三条岭迹均已较平稳了. 故我们取 $k = 0.6$ 来建立岭迹回归方程, 此时的标准化回归方程为

$$\hat{y}^* = 0.306x_1^* + 0.226x_2^* + 0.627x_3^*.$$

由于 $\bar{x}_1 = 198.31$, $\bar{x}_2 = 3.30$, $\bar{x}_3 = 139.74$, $\bar{y} = 21.89$, $\sigma_{x_1} = 27.91$, $\sigma_{x_2} = 1.65$, $\sigma_{x_3} = 20.63$, $\sigma_y = 4.54$, 因此, 将标准回归方程还原后得到线性回归模型

$$y = -9.63 + 0.05x_1 + 0.62x_2 + 0.14x_3.$$

与普通最小二乘法得到的回归方程相比, 自变量 x_1 的系数由负变为正. 这说明由岭估计得到的回归方程较最小二乘法得到的回归方程有了更合理的经济解释, 其预测效果也更好.

3.1.6 非线性回归分析简介

非线性回归模型一般可记为

$$y_i = f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (3.25)$$

其中, y_i 为因变量; $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip})^T$ 是自变量; $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_m)^T \in \Theta$ 为未知参数向量; ε_i 为随机误差项并且满足独立同分布假定, 即

$$\mathbb{E}(\varepsilon_i) = 0, \quad \text{Cov}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = \sigma^2 \delta_{ij}.$$

使用最小二乘法估计参数 $\boldsymbol{\theta}$, 即求使得

$$Q(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{i=1}^n [y_i - f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta})]^2$$

达到最小的 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, 称它为 $\boldsymbol{\theta}$ 的非线性最小二乘估计. 注意, 在正态假设下, 非线性最小二乘估计也是极大似然估计.

非线性最小二乘解一般不存在解析表达式, 只能采用迭代算法求近似解. 为了便于采用传统的基于导数的优化算法, 我们假定函数 f 关于参数 $\boldsymbol{\theta}$ 至少存在连续的二阶偏导数.

Gauss-Newton 算法

Gauss-Newton 算法用回归函数的 Taylor 展开的线性项来近似非线性模型, 然后用普通的小二乘法估计参数.

通过对 Q 求关于 $\boldsymbol{\theta}$ 的导数建立正规方程组

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial Q}{\partial \theta_1} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - f(\mathbf{x}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}})) \frac{\partial f}{\partial \theta_1} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}} = 0, \\ \vdots \\ \frac{\partial Q}{\partial \theta_m} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - f(\mathbf{x}_i, \hat{\boldsymbol{\theta}})) \frac{\partial f}{\partial \theta_m} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}} = 0, \end{array} \right. \quad (3.26)$$

假设 $\boldsymbol{\theta}$ 的初值为 $\boldsymbol{\theta}^{(0)}$, 将 $f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta})$ 在初值 $\boldsymbol{\theta}^0$ 附近展开得

$$f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}) \approx f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta}^{(0)}) + \frac{\partial f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^0} (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^0)$$

记 $\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}^{(0)})$ 为由 $\frac{\partial f(\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{\theta}^0}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) 作为行向量组成的矩阵. 则有

$$\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^{(0)}) \approx \mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}^{(0)}) (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{(0)}) + \boldsymbol{\varepsilon}.$$

采用线性最小二乘方法得到上述模型的解, 并由此更新 $\boldsymbol{\theta}$ 为

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(1)} = \boldsymbol{\theta}^{(0)} + [\mathbf{D}^T(\boldsymbol{\theta}^{(0)}) \mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}^{(0)})]^{-1} \mathbf{D}^T(\boldsymbol{\theta}^{(0)}) [\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^{(0)})].$$

重复上述过程, 可得求 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 的迭代公式:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}^{(t+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(t)} + [\mathbf{D}^T(\boldsymbol{\theta}^{(t)}) \mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}^{(t)})]^{-1} \mathbf{D}^T(\boldsymbol{\theta}^{(t)}) [\mathbf{y} - \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}^{(t)})], \quad (3.27)$$

直到迭代收敛为止. 停止准则可限定 $\boldsymbol{\theta}^{(t)}$ 与 $\boldsymbol{\theta}^{(t-1)}$ 之间的距离, 也可以限定最大迭代次数.

由于

$$\mathbb{E} \frac{\partial^2 Q}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^T} = 2 \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} \right)^T \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T}$$

为正定矩阵, (3.26)的解必然是极小值点. 在实际应用中, 尽管不能保证找到的点就是极小值点, 但可以通过改变初值来获得不同极小值点并加以比较的方法, 来提高找到真正极小值点的机会.

为了获得非线性回归模型参数 $\boldsymbol{\theta}$ 最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$ 的渐近分布, 即当 $n \rightarrow \infty$ 时, $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$ 的极限分布, 对模型需要作如下假设:

- (1) $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$ 独立同分布, 均值为 0, 方差为 σ^2 ;
- (2) $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ 关于 \mathbf{x} 连续, 且关于 $\boldsymbol{\theta}$ 存在二阶连续偏导数;
- (3) 矩阵 $\mathbf{D}(\boldsymbol{\theta})$ 满足

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \mathbf{D}^T(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{D}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{K}(\boldsymbol{\theta}),$$

且 $\mathbf{K}(\boldsymbol{\theta})$ 为正定矩阵.

通常称上述条件为非线性回归模型的正则条件. 在正则条件下, 非线性模型的最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n$ 渐近服从均值为 $\boldsymbol{\theta}$ 、方差 $\Sigma = \hat{\sigma}^2 \left[\mathbf{D}^T(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \mathbf{D}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) \right]^{-1}$ 的正态分布, 其中 $\hat{\sigma}^2 = Q(\hat{\boldsymbol{\theta}})/(n-m)$. 该结论可以用于构造参数的置信区间或作假设检验.

Newton-Raphson 算法

与 Gauss-Newton 算法不同, Newton-Raphson 算法基于目标函数 $Q(\boldsymbol{\theta})$ 的二阶 Taylor 展开:

$$Q(\boldsymbol{\theta}) \approx Q(\boldsymbol{\theta}^{(0)}) + \left. \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right|_{\boldsymbol{\theta}^{(0)}}^T (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{(0)}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{(0)})^T \left. \frac{\partial^2 Q}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^T} \right|_{\boldsymbol{\theta}^{(0)}} (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^{(0)}).$$

记

$$\mathbf{H}(\boldsymbol{\theta}^{(0)}) = \left. \frac{\partial^2 Q}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^T} \right|_{\boldsymbol{\theta}^{(0)}},$$

利用二次型理论, 可知当

$$\boldsymbol{\theta}^{(1)} = \boldsymbol{\theta}^{(0)} - \mathbf{H}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^{(0)}) \left. \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right|_{\boldsymbol{\theta}^{(0)}}$$

时, $Q(\boldsymbol{\theta})$ 取得极小值. 如果 $Q(\boldsymbol{\theta})$ 是 $\boldsymbol{\theta}$ 的二次函数, 则上式恰为参数 $\boldsymbol{\theta}$ 的最小二乘估计. 非线性情况下, 上式只是给出最小二乘估计的 Newton-Raphson 算法迭代公式:

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(t)} - \mathbf{H}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^{(t)}) \left. \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right|_{\boldsymbol{\theta}^{(t)}}, \quad t = 0, 1, 2, \dots$$

在非线性优化中, 上式中向量 $-\mathbf{H}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^{(t)}) \left. \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right|_{\boldsymbol{\theta}^{(t)}}$ 称为下降方向. 为加速收敛, 通常再引入迭代步长 λ_t , 改进的迭代公式为

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(t)} - \lambda_t \mathbf{H}^{-1}(\boldsymbol{\theta}^{(t)}) \left. \frac{\partial Q}{\partial \boldsymbol{\theta}} \right|_{\boldsymbol{\theta}^{(t)}}, \quad t = 0, 1, 2, \dots$$

由此得到的迭代算法也称为非线性最小二乘的 L-M(Levenberg-Marquardt) 算法.

Gauss-Newton 算法、Newton-Raphson 算法和 L-M 算法在非线性规划都属于下降算法, 即在当前点 $\boldsymbol{\theta}^{(t)}$ 处找到一下降方向, 沿着这一下降方向找到最优步长, 移动到下一点后继续迭代. 我们知道, 函数的梯度是函数值下降的方向, 基于梯度的下降算法迭代公式可统一表示为:

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(t)} - \lambda_t \mathbf{P}_t \mathbf{r}_t,$$

这里 \mathbf{r}_t 为目标函数的梯度, \mathbf{P}_t 为正定矩阵, λ_t 为步长. 梯度在正定矩阵变化下得到的方向, 仍然为下降方向.

3.1.7 含定性变量的回归模型

许多实际问题中, 人们常常碰到一些定性变量. 比如, 性别、受教育程度、职业、民族、季节、天气状况等. 很多难以刻画的物理量人们也会选择分级的方式来刻画, 例如, 对复杂电磁环境的复杂性进行分级, 对无人集群系统的自主性进行分级, 等等. 在对试验数据进行回归分析时, 常常需要考虑这些定性变量. 本节简要介绍两种包含定性变量的回归模型: 自变量即试验因子中包含定性变量的回归模型, 以及因变量即响应为定性变量的回归模型.

自变量包含定性变量的回归模型

如1.2.1节所述, 当一些自变量为定性变量时, 应当首先通过引入哑变量将这些定性变量数量化. 例如, 在粮食产量问题研究中, 我们知道施肥量和气候对水稻的产量都有很大的影响. 而气候是不可控的, 根据水稻这一物种的特性, 可以将气候分为正常和干旱两种情况. 首先引入一个 0-1 型哑变量 D 将气候这一定性因子数量化: $D_i = 1$ 表示第 i 年为正常年份; 而 $D_i = 0$ 表示这一年为干旱年份. 然后对粮食产量建立如下回归模型

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \beta_2 D_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.28)$$

其中随机误差 $\varepsilon_i \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2)$. 由此可得, 干旱年份粮食的平均产量为

$$\mathbb{E}(y_i | D_i = 0) = \beta_0 + \beta_1 x_i,$$

而正常年份粮食的平均产量为

$$\mathbb{E}(y_i | D_i = 1) = \beta_0 + \beta_2 + \beta_1 x_i.$$

模型(3.28)将干旱年份与正常年份回归直线的斜率 β_1 认为是相等的, 也就是说不论是干旱年份还是正常年份, 施肥量 x 每增加一个单位, 粮食产量 y 的平均值都增加相同的数量 β_1 . 可以采用此前介绍的最小二乘估计法来得到模型参数的估计, 也可以用同样的方法讨论模型参数的假设检验.

表 3.5: 每个季节下的 6 组酿酒数据

序号	季节	x_1	x_2	y	序号	季节	x_1	x_2	y
1	冬	130	200	7.5	10	春	138	240	5.6
2	冬	136	200	4.2	11	春	139	220	4.6
3	冬	140	215	1.5	12	春	141	260	3.9
4	冬	138	265	3.7	13	夏	130	205	11.0
5	冬	134	235	5.3	14	夏	140	265	6.0
6	冬	142	260	1.2	15	夏	139	250	6.5
7	春	136	215	6.2	16	夏	136	245	9.1
8	春	137	250	7.0	17	夏	135	235	9.3
9	春	136	180	5.5	18	夏	137	220	7.0

我们知道, 定性变量还可能取多个水平. 1.2.1 节已经给出 q 水平定性变量数量化的方法, 即引入 $q - 1$ 个取值于 $\{0, 1\}$ 的哑变量. 下面看一个案例.

例 3.7. 在酿酒工艺中, 要将大麦浸在水中吸收一定的水分 x_1 , 为了提高产量还要加入某种化学溶剂浸泡一定的时间 x_2 , 然后测量大麦吸入化学溶剂的量 y . 控制 y 的量对酿酒质量有重要影响. 根据经验可知, y 和 (x_1, x_2) 有较好的线性关系, 但随着季节的不同会有些差异, 在三个季节下各收集了 6 组数据, 如表 3.5 所示.

为了对该数据建立线性回归模型并考虑季节因素对 y 的影响, 引入哑变量 z_1, z_2 , $(z_1, z_2) = (1, 0)$ 表示冬季, $(z_1, z_2) = (0, 1)$ 表示春季, $(z_1, z_2) = (0, 0)$ 表示夏季. 考虑如下线性回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \delta_1 z_1 + \delta_2 z_2 + \varepsilon.$$

根据该模型和数据集, 采用线性回归模型的最小二乘法可得到回归方程

$$\hat{y} = 90.31 - 0.64x_1 + 0.024x_2 - 3.83z_1 - 1.39z_2.$$

其残差平方和为 $RSS = 1.4923$, 自由度 $f_E = 13$. 为了考察季节因素对因变量有无影响, 考虑如下检验

$$H_0 : (\delta_1, \delta_2) = (0, 0), \quad v.s. \quad H_1 : (\delta_1, \delta_2) \neq (0, 0).$$

原假设成立的条件下, 模型为

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \varepsilon.$$

其对应的残差平方和 $RSS_{H_0} = 46.1945$, 自由度为 15. 根据定理 3.4, 可构造检验统计量

$$F = \frac{(46.1945 - 1.4923)/2}{1.4923/13} = 194.91 > F_{0.95}(2, 13) = 3.81.$$

此结果表明在显著性水平 0.05 下, 季节因素对 y 是有影响的. 从而总的回归模型可写为

$$y = \begin{cases} 86.48 - 0.64x_1 + 0.024x_2, & \text{冬季;} \\ 88.92 - 0.64x_1 + 0.024x_2, & \text{春季;} \\ 90.31 - 0.64x_1 + 0.024x_2, & \text{夏季;} \end{cases}$$

需要指出的是, 虽然哑变量取具体的数值, 但这一数值没有任何数量意义, 它仅用来说明观察单位的性质或属性. 以模型(3.28)为例, 哑变量的实质意义是对模型进行分类:

$$y_i = \begin{cases} \beta_0 + \beta_1 x_i, & \text{干旱年份;} \\ \beta_0 + \beta_2 + \beta_1 x_i, & \text{正常年份.} \end{cases}$$

如果觉得上述模型假设比较强, 可以建立如下非线性回归模型:

$$y_i = \begin{cases} f_1(x_i, \theta_1), & \text{干旱年份;} \\ f_2(x_i, \theta_2), & \text{正常年份.} \end{cases}$$

一般地, 对包含 p_1 个定性因子 $(x_1, x_2, \dots, x_{p_1})$ 和 $p - p_1$ 个定量因子 $(x_{p_1+1}, x_{p_2+1}, \dots, x_p)$ 的试验, 也可也建立类似的回归模型:

$$y(x) = \begin{cases} f_1(x_{p_1+1}, x_{p_1+2} \dots, x_p, \theta_1), & \text{定性因子的第 1 个处理组合;} \\ f_2(x_{p_1+1}, x_{p_1+2} \dots, x_p, \theta_2), & \text{定性因子的第 2 个处理组合;} \\ \vdots \\ f_N(x_{p_1+1}, x_{p_1+2} \dots, x_p, \theta_N), & \text{定性因子的第 } N \text{ 个处理组合.} \end{cases}$$

这种认为定性因子的不同处理组合对应回归模型完全不同的建模方式, 可能会导致模型参数个数的爆炸式增加, 从而需要大量试验数据才能进行回归分析. 可通过挖掘定性因子不同处理组合下定量因子模型之间的关系, 达到约减参数个数的目的. 例如模型(3.28)中假定干旱年份和正常年份施肥量对应的斜率参数 β_1 相等, 就减少了一个参数. 如何挖掘模型之间的这种关联关系, 留在第四章再予论述.

响应变量为定性变量的回归模型

以打靶试验为例, 一次试验可能有两种结果: 0 表示脱靶, 1 表示命中. 以突防试验为例, 一次试验有两种可能的结果: 0 表示突防失败, 1 表示突防成功. 当然, 如同包含定性因子的情形相似, 这里的 0 和 1 也没有数量意义, 它是哑变量的取值.

假如还用简单的线性回归模型来对响应为定性变量的试验问题建模:

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i, \quad \mathbb{E}(\varepsilon_i) = 0.$$

由于 y_i 为 0-1 型伯努利随机变量, 因此若假设 $P(y_i = 1) = \pi_i$, $P(y_i = 0) = 1 - \pi_i$, 则

$$\mathbb{E}(y_i) = 1 \times \pi_i + 0 \times (1 - \pi_i) = \pi_i$$

于是, $\mathbb{E}(y_i|x_i) = \beta_0 + \beta_1 x_i = \pi_i$. 从而误差项 $\varepsilon_i = y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)$ 也只能取两个值, 即

- 当 $y_i = 1$ 时, $\varepsilon_i = 1 - \beta_0 - \beta_1 x_i = 1 - \pi_i$;
- 当 $y_i = 0$ 时, $\varepsilon_i = 0 - \beta_0 - \beta_1 x_i = -\pi_i$.

如此一来, 关于误差的正态假设就不成立了. 此外, 由于 $\mathbb{E}(y_i) = \beta_0 + \beta_1 x_i$, 回归方程需满足

$$0 \leq \beta_0 + \beta_1 x_i \leq 1.$$

种种限制使得当响应变量为定性变量时, 不能采用简单的线性回归模型.

为了解决回归函数取值区间的问题, 可以借助于 $(-\infty, \infty) \mapsto [0, 1]$ 的函数来解决. 符合这一要求的函数有很多, 随机变量的分布函数就满足这一性质, 标准正态分布的分布函数就是一个常用的函数. 除此之外, 统计学家们还常用 **Logit 函数**

$$\text{logit}(x) = \log \frac{x}{1-x}$$

建立一种叫作 **Logistic 回归模型** 的模型对 0-1 型响应变量的问题建模, 其形式为

$$\text{logit}(\pi_i) = \log \frac{\pi_i}{1 - \pi_i} = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.29)$$

该模型有时又称为**评定模型**. $\pi_i/(1 - \pi_i)$ 是“事件发生”的概率与“事件没发生”的概率之比, 当 π_i 接近于 0 时或 1 时, $\log \frac{\pi_i}{1 - \pi_i}$ 变化较快, 这在实际问题中可能会给参数估计的精度造成一些不利的影响.

下面来探讨 Logistic 回归模型中参数的估计. 假定 n 次独立试验的数据为 $\{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, 2, \dots, n\}$, Logistic 回归模型也可以表示为

$$\mathbb{E}(y_i|\mathbf{x}_i) = \pi_i = \frac{1}{1 + \exp\{-\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i)\boldsymbol{\beta}\}}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.30)$$

$\boldsymbol{\pi} = (\pi_1, \dots, \pi_n)$ 的似然函数为

$$L(\boldsymbol{\pi}) = \prod_{i=1}^n \pi_i^{y_i} (1 - \pi_i)^{1-y_i}.$$

其对数似然函数为

$$\ell(\boldsymbol{\pi}) = \sum_{i=1}^n [y_i \log \pi_i + (1 - y_i) \log(1 - \pi_i)].$$

将(3.30)代入, 得到

$$\ell(\boldsymbol{\beta}) = \sum_{i=1}^n \left[y_i \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\beta} - \log \left\{ 1 + \exp(\mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \boldsymbol{\beta}) \right\} \right]. \quad (3.31)$$

求 β 的极大似然估计就是要找到使 $\ell(\beta)$ 达到最大的 $\hat{\beta}$. 为此, 对上式求一阶和二阶偏导数得到:

$$\frac{\partial \ell}{\partial \beta} = \sum_{i=1}^n \left(y_i - \frac{\exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \beta \}}{1 + \exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \beta \}} \right) \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) = \mathbf{X}^T \mathbf{e}(\beta),$$

$$\frac{\partial^2 \ell}{\partial \beta \partial \beta^T} = - \sum_{i=1}^n \frac{\exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \beta \}}{(1 + \exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) \beta \})^2} \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) = -\mathbf{X}^T \mathbf{H}(\beta) \mathbf{X},$$

其中 $\mathbf{X} = [\mathbf{f}(\mathbf{x}_1), \dots, \mathbf{f}(\mathbf{x}_n)]^T$ 为广义设计矩阵,

$$\mathbf{e}(\beta) = \left[y_1 - \frac{\exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_1) \beta \}}{1 + \exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_1) \beta \}}, \dots, y_n - \frac{\exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_n) \beta \}}{1 + \exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_n) \beta \}} \right]^T,$$

$$\mathbf{H}(\beta) = \text{diag} \left\{ \frac{\exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_1) \beta \}}{1 + \exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_1) \beta \}}, \dots, \frac{\exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_n) \beta \}}{1 + \exp \{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_n) \beta \}} \right\}.$$

求极大似然估计 $\hat{\beta}$ 的 Newton 迭代公式可表示为

$$\beta^{(t+1)} = \beta^{(t)} + (\mathbf{X}^T \mathbf{H}(\beta^{(t)}) \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{e}(\beta^{(t)}).$$

例 3.8. y_i 为示性变量, 若第 i 组白细胞数为 x_{i1} 的患者至少生存了 52 周, 则 $y_i = 1$, 否则 $y_i = 0$; x_{i2} 为示性变量, $x_{i2} = 1$ 表示患者白细胞分类为阳性, $x_{i2} = 0$ 则为阴性. 数据如表 3.6 所示.

利用 *Logistics* 回归模型

$$\text{logit}(\pi_i) = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2}, \quad i = 1, 2, \dots, 30.$$

来分析该数据. 才有 Newton 迭代公式求模型参数 $\beta = (\beta_0, \beta_1, \beta_2)^T$ 的最大似然估计, 经 6 次迭代即得到其最大似然估计值

$$\hat{\beta}_{\text{MLE}} = (-1.307, -0.318 \times 10^{-4}, 2.26)^T.$$

表 3.6: 白血病数据

序号	x_{i1}	x_{i2}	y_i	n_i	序号	x_{i1}	x_{i2}	y_i	n_i
1	2300	1	1	1	16	4400	0	1	1
2	750	1	1	1	17	3000	0	1	1
3	4300	1	1	1	18	4000	0	0	1
4	2600	1	1	1	19	1500	0	0	1
5	6000	1	0	1	20	9000	0	0	1
6	10500	1	1	1	21	5300	0	0	1
7	10000	1	1	1	22	10000	0	0	1
8	17000	1	0	1	23	19000	0	0	1
9	5400	1	0	1	24	27000	0	0	1
10	7000	1	1	1	25	28000	0	0	1
11	9400	1	1	1	26	31000	0	0	1
12	32000	1	0	1	27	28000	0	0	1
13	35000	1	0	1	28	21000	0	0	1
14	52000	1	0	1	29	79000	0	0	1
15	100000	1	1	3	30	100000	0	0	2

3.2 正交回归设计

在回归分析中, 不论是求回归系数向量的估计值 $\hat{\beta}$, 还是对回归方程与回归系数作显著性检验, 都需要求出矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 的逆. 当矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 为对角线矩阵时, 求逆十分简单. 而回归的正交设计恰好可达到这一要求, 从而简化计算.

由于各因子的量纲可能各不相同, 变化范围也可能极其悬殊, 这给试验设计带来一定的困难. 为此, 首先将所有因子都作一线性变换, 又称**编码变换**, 使诸因子的取值区域都转化为中心在原点的“立方体”. 设第 i 个变量 $z_i \in [z_{1i}, z_{2i}]$, $i = 1, 2, \dots, p$. 作如下线性变换:

$$x_i = \frac{(z_i - z_{1i}) - (z_{2i} - z_i)}{z_{2i} - z_{1i}}, \quad (3.32)$$

则 $x_i \in [-1, 1]$. 以下假定试验区间 $\mathcal{X} = [0, 1]^p$ 或 $[-1, 1]^p$. 注意, 编码变换和中心标准化的含义不同. 中心标准化使得数据的样本均值为 0, 样本方差为 1. 而编码变换只是将数据变到统一的区间.

3.2.1 正交回归设计的定义

定义 3.8. 若一个线性回归问题中, 设计 ξ_n 使得广义设计矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 为对角矩阵, 则称设计 ξ_n 为**正交回归设计**.

为简单起见, 本节讨论线性回归模型中 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = [1, x_1, x_2, \dots, x_m]^T$ 的特殊情形, 即

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_m x_m + \varepsilon. \quad (3.33)$$

设 $\xi_n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 是上述回归模型的正交回归设计, 显然,

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n x_{ij} = 0, & j = 1, 2, \dots, m, \\ \sum_{i=1}^n x_{ij_1} x_{ij_2} = 0, & j_1 \neq j_2. \end{cases}$$

例 3.9. 某种橡胶制品由橡胶、树脂和改良剂复合而成. 试验的目的是改良橡胶制品的性能, 即提高撕裂强度. 考察的试验因子有三个, 橡胶中成分 A 的百分比 z_1 , 其变化范围是 $[0, 20]$; 树脂中成分 B 的百分比 z_2 , 其变化范围是 $[10, 30]$; 改良剂的百分比 z_3 , 其范围为 $[0.1, 0.3]$.

首先利用编码变换

$$x_1 = \frac{z_1 - 10}{10}, \quad x_2 = \frac{z_2 - 20}{10}, \quad x_3 = \frac{z_3 - 0.2}{0.1}$$

把畸形的长方体试验区域转换成中心在原点的立方体试验区域.

考虑如下试验方案:

原始变量			编码变量		
z_1	z_2	z_3	x_1	x_2	x_3
0	10	0.1	-1	-1	-1
0	10	0.3	-1	-1	+1
0	30	0.1	-1	+1	-1
0	30	0.3	-1	+1	+1
20	10	0.1	+1	-1	-1
20	10	0.3	+1	-1	+1
20	30	0.1	+1	+1	-1
20	30	0.3	+1	+1	+1

显然, 对于一次回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \varepsilon$$

而言, 该试验方案是一个正交回归设计. 对于包含乘积项的一次回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3 + \varepsilon$$

而言, 该方案也是一个正交设计. 此时的广义设计矩阵为

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

其信息矩阵 $\mathbf{X}^T \mathbf{X} = 8\mathbf{I}_{7 \times 7}$ 是一个对角矩阵.

由于只考虑因子的线性规律, 因此可采用二水平正交表来构造正交回归设计, 如 $L_4(2^3)$, $L_8(2^7)$, $L_{16}(2^{15})$ 等. 为保证各列之间的正交, 将正交表中的数字 1 改为 -1 、0 改为 1, 如

试验号	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$
1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	1	-1	1	-1	-1	-1
3	1	-1	1	-1	1	-1	-1
4	1	-1	-1	-1	-1	1	1
5	-1	1	1	-1	-1	1	-1
6	-1	1	-1	-1	1	-1	1
7	-1	-1	1	1	-1	-1	1
8	-1	-1	-1	1	1	1	-1

其中 1 和 -1 既对应正交设计中诸因子的水平代号, 又代表诸试验点在因子区域中各分量的坐标. 利用正交表作线性回归的正交设计的方法与常用的正交设计法类似, 包括选表与表头设计. 选表的方法是看变量个数, 要求回归方程的项数不超过所选表的列数. 如果还要对回归方程与系数作显著性检验, 则回归方程的项数应少于所选正交表的列数.

3.2.2 正交回归设计的统计分析

下面讨论 m 个变量 x_1, x_2, \dots, x_m 的线性回归正交设计的统计分析方法. m 个自变量的线性回归模型为

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \cdots + \beta_m x_{im} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n \quad (3.34)$$

假定 $\varepsilon_i \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, 1)$, 则在正交设计下 $(\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m)$ 的信息矩阵为

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} = (\mathbf{1}_n, \mathbf{D})^T (\mathbf{1}_n, \mathbf{D}) = \text{diag} \left(n, \sum_{i=1}^n x_{i1}^2, \dots, \sum_{i=1}^n x_{im}^2 \right).$$

常数项矩阵为

$$\mathbf{b} = \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n y_i \\ \sum_{i=1}^n x_{i1} y_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^n x_{im} y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}.$$

于是回归系数的最小二乘估计为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y} = \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i, \frac{\sum_{i=1}^n x_{i1} y_i}{\sum_{i=1}^n x_{i1}^2}, \dots, \frac{\sum_{i=1}^n x_{im} y_i}{\sum_{i=1}^n x_{im}^2} \right]^T.$$

为了检验回归方程的显著性和诸回归系数的显著性, 还要计算诸平方和. 总平方和为

$$SS_T = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 - \frac{b_0^2}{n}.$$

对 $j = 1, 2, \dots, m$, 考虑检验问题

$$H_{0j} : \beta_j = 0, \quad \text{v.s.} \quad H_{ij} : \beta_j \neq 0.$$

根据定理3.4来构造检验统计量, 只需计算 $\text{RSS}_{H_{0j}} - \text{RSS}$. 利用 \mathbf{X} 的正交性, 很容易得出

$$\begin{aligned} \text{RSS}_{H_{0j}} - \text{RSS} &= \mathbf{y}^T [\mathbf{I} - \mathbf{X}_{-j}(\mathbf{X}_{-j}^T \mathbf{X}_{-j})^{-1} \mathbf{X}_{-j}^T] \mathbf{y} - \mathbf{y}^T [\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T] \mathbf{y} \\ &= \mathbf{y}^T [\mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T - \mathbf{X}_{-j}(\mathbf{X}_{-j}^T \mathbf{X}_{-j})^{-1} \mathbf{X}_{-j}^T] \mathbf{y} \\ &= \frac{(\sum_{i=1}^n x_{ij} y_i)^2}{\sum_{i=1}^n x_{ij}^2} = \hat{\beta}_j b_j \end{aligned}.$$

其中 \mathbf{X}_{-j} 表示矩阵 \mathbf{X} 去掉第 $j+1$ 列后得到的矩阵. 定义

$$Q_j := \text{RSS}_{H_{0j}} - \text{RSS} = \hat{\beta}_j b_j$$

为第 j 个变量的回归平方和. 我们知道, 回归平方和是在假设

$$H_0 : (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m) = \mathbf{0}$$

成立下的残差 RSS_{H_0} 与残差 RSS 之间的差. 根据设计矩阵的正交性可知,

$$SS_R = \text{RSS}_{H_0} - \text{RSS} = \sum_{j=1}^m Q_j.$$

根据平方和的分解式可知, 残差平方和为

$$\text{RSS} = SS_T - \sum_{j=1}^m Q_j.$$

表 3.7: 线性回归正交设计的方差分析表

来源	平方和	自由度	均方和	F 值
x_1	$Q_1 = \frac{(\sum_{i=1}^n x_{i1} y_i)^2}{\sum_{i=1}^n x_{i1}^2}$	1	Q_1	$\frac{Q_1}{SS_E/(n-m-1)}$
x_2	$Q_2 = \frac{(\sum_{i=1}^n x_{i2} y_i)^2}{\sum_{i=1}^n x_{i2}^2}$	1	Q_2	$\frac{Q_2}{SS_E/(n-m-1)}$
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
x_m	$Q_m = \frac{(\sum_{i=1}^n x_{im} y_i)^2}{\sum_{i=1}^n x_{im}^2}$	1	Q_m	$\frac{Q_m}{SS_E/(n-m-1)}$
回归	$SS_R = \sum_{j=1}^m Q_j$	m	SS_R/m	$\frac{SS_R/m}{SS_E/(n-m-1)}$
剩余	$SS_E = SS_T - SS_R$	$n - m - 1$	$SS_E/(n - m - 1)$	
总	$SS_T = \sum_{i=1}^n y_i^2 - \frac{1}{n} (\sum_{i=1}^n y_i)^2$	$n - 1$		

请注意参数 β 的维数为 $m + 1$, 导致残差平方和的自由度变成了 $n - m - 1$. 显著性检验总结如表3.7. 特别指出的是, 回归的正交设计使得信息矩阵为对角阵, 所以诸回归系数不相关. 当显著性检验的结果出现某些回归系数不显著时, 可从回归方程中直接剔除相应的项, 而无需重新计算回归方程.

例 3.10. 某化工产品的产量 y 受反应时间 z_1 和反应温度 z_2 的影响, 现有条件 $z_1 = 35\text{min}$, $z_2 = 155^\circ\text{C}$. 为寻找最优生产条件, 在现有试验范围: $z_1 \in [30, 40]$, $z_2 \in [150, 160]$ 内设计一个试验, 拟合一次回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 z_1 + \beta_2 z_2 + \varepsilon,$$

其中 ε 是随机误差.

先通过编码变换把原始变量 z_1 和 z_2 变换为

$$x_1 = \frac{z_1 - 35}{5} \in [-1, 1], \quad x_2 = \frac{z_2 - 155}{5} \in [-1, 1].$$

采用表 $L_4(2^3)$ 设计试验方案, 得到试验数据如下:

试验号	x_0	x_1	x_2	y
1	1	1	1	39.4
2	1	1	-1	40.0
3	1	-1	1	40.9
4	1	-1	-1	41.5

计算得到

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^4 y_i \\ \sum_{i=1}^4 x_{i1} y_i \\ \sum_{i=1}^4 x_{im} y_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 161.7 \\ 3.1 \\ 1.3 \end{bmatrix},$$

于是回归系数的最小二乘估计为

$$\hat{\beta} = \left[\frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 y_i, \frac{\sum_{i=1}^4 x_{i1}y_i}{\sum_{i=1}^4 x_{i1}^2}, \frac{\sum_{i=1}^4 x_{i2}y_i}{\sum_{i=1}^4 x_{i2}^2} \right]^T = [40.425, 0.775, 0.325]^T,$$

拟合的回归方程（关于编码后的变量）为

$$\hat{y} = 40.425 + 0.775x_1 + 0.325x_2.$$

下面计算诸平方和，

$$SS_T = \sum_{i=1}^4 y_i^2 - \frac{1}{4} \left(\sum_{i=1}^4 y_i \right)^2 = 2.8275,$$

$$Q_1 = \hat{\beta}_1 b_1 = 2.4025,$$

$$Q_2 = \hat{\beta}_2 b_2 = 0.4225,$$

$$SS_R = Q_1 + Q_2 = 2.825,$$

$$SS_E = SS_T - Q_1 - Q_2 = 0.0025.$$

关于回归方程的显著性检验表如下表。因为 $F_{0.005}(1, 1) = 161$, $F_{0.005}(2, 1) = 200$, 由方差分

表 3.8: 方差分析表

来源	平方和	自由度	均方和	F 值
x_1	2.4025	1	2.4025	961
x_2	0.4225	1	0.4225	169
回归	2.8250	2	1.4125	565
剩余	0.0025	1	0.0025	
总	2.8275	3		

析表可以看出，当显著性水平 $\alpha = 0.05$ 时，回归方程与回归方程中的两个变量都是显著的。

3.2.3 添加中心点的重复试验

用正交表作正交回归设计时，试验点都在试验区域的边界上：完全因子设计的试验点由试验区域的全部顶点组成；部分因子设计的试验点由试验区域的部分顶点组成。如果显著性检验的结果是回归方程显著，只意味着在诸试验点上拟合得好，即在试验区域的边界，一次模型与实际情况相符。但在试验区域的内部，回归模型与实际情况拟合的如何还是一个问题。为此，可在试验区域的中心，即原点，补充几次试验来检验回归模型在内部的拟合情况。

设在原点重复 k 个试验, 试验结果为 y_{01}, \dots, y_{0k} . 结合先前做的 n 次试验, 得到线性统计模型

$$\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \\ y_{01} \\ \vdots \\ y_{0k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nm} \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \\ \varepsilon_{n+1} \\ \vdots \\ \varepsilon_{n+k} \end{bmatrix} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (3.35)$$

不难看出, 该设计依然为正交回归设计. x_1, \dots, x_m 的回归系数的估计值 $\hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_m$ 和相应的回归平方和 Q_1, \dots, Q_m 都与未补充试验前的结果一致, 但总平方和 SS_T 和剩余平方和 SS_E 的值改变了.

称

$$SS_{E_1} = \sum_{j=1}^k (y_{0j} - \bar{y}_0)^2 \quad (3.36)$$

为误差平方和, 其中 $\bar{y}_0 = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^k y_{0j}$. 称

$$SS_{Lf} = SS_E - SS_{E_1} \quad (3.37)$$

为失拟平方和. 显然

$$SS_T = SS_R + SS_{Lf} + SS_{E_1},$$

且 SS_T 的自由度 $f_T = n + k - 1$, SS_R 的自由度 $f_R = m$, SS_{E_1} 的自由度 $f_{E_1} = k - 1$, SS_{Lf} 的自由度 $f_{Lf} = n + k - 1 - m - (k - 1) = n - m$. 根据模型的假定和正态随机变量的二次型理论, 可以证明在假设

$$H_0 : \mathbb{E}(y) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_m x_m$$

成立的条件下,

$$\frac{SS_{Lf}}{\sigma^2} \sim \chi^2(n - m), \quad \frac{SS_{E_1}}{\sigma^2} \sim \chi^2(k - 1), \quad (3.38)$$

且它们相互独立. 所以可以用统计量

$$F = \frac{SS_{Lf}/f_{Lf}}{SS_{E_1}/f_{E_1}} \sim F(f_{Lf}, f_{E_1})$$

来检验线性回归模型是否恰当. 当 $F < F_\alpha(f_{Lf}, f_{E_1})$ 时, 认为在显著水平为 α 时, 拟合线性回归模型是恰当的, 否则是不恰当.

例 3.11. 在例 3.10 中试验的基础上, 在原点补充 5 次试验, 试验方案和结果如下:

试验号	x_0	x_1	x_2	x_1^2	x_2^2	y
1	1	1	1	1	1	39.4
2	1	1	-1	1	1	40.0
3	1	-1	1	1	1	40.9
4	1	-1	-1	1	1	41.5
5	1	0	0	0	0	40.3
6	1	0	0	0	0	40.5
7	1	0	0	0	0	40.7
8	1	0	0	0	0	40.2
9	1	0	0	0	0	40.6

拟合一次回归方程，并检验回归方程的好坏。

注意到 $\beta_0 = \bar{y}_. = 40.444$, 拟合的回归方程为

$$\hat{y} = 40.444 + 0.775x_1 + 0.325x_2.$$

下面计算诸平方和, Q_1 、 Q_2 和 SS_R 在例3.10中已经计算过了,

$$SS_T = \sum_{j=1}^9 y_j^2 - \frac{1}{4} \left(\sum_{j=1}^9 y_j \right)^2 = 3.0022,$$

$$SS_E = SS_T - Q_1 - Q_2 = 0.1772,$$

$$SS_{E_1} = \sum_{j=1}^k (y_{0j} - \bar{y}_0)^2 = 0.1720,$$

$$SS_{Lf} = SS_E - SS_{E_1} = 0.0052.$$

关于回归方程的显著性检验表如下表。

来源	平方和	自由度	均方和	F 值
回归	2.8250	2	1.4125	47.88
剩余	0.1772	6	0.0295	
失拟	0.0052	2	0.0026	0.06 < 1
误差	0.1720	4	0.0430	
总	3.0022	8		

由方差分析表可以看出, 当显著性水平 $\alpha = 0.01$ 时, 回归方程是显著的。

3.3 最优回归设计

正交回归设计的目的是简化回归分析的计算, 而最优回归设计的目的则是提高参数模型的统计推断精度. 可以把最优回归设计视为**目标驱动的最优设计** (goal-oriented optimal design) 的一种 [3].

3.3.1 信息矩阵

给定线性回归模型

$$y = \mathbf{f}(\mathbf{x})^T \boldsymbol{\beta} + \varepsilon, \quad \varepsilon \sim N(0, 1), \quad (3.39)$$

假定试验区域 \mathcal{X} 为有界闭集; $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = [f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_m(\mathbf{x})]^T$ 为定义在 \mathcal{X} 上 m 个线性独立的连续函数.

定义 3.9. 称 $\xi_n = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 为一个试验次数为 n 的精确设计, 称试验点 \mathbf{x}_i 为这个试验设计的支撑点或谱点.

如果精确设计 ξ_n 中仅有 $k < n$ 个不同的支撑点 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k$, 在点 \mathbf{x}_i 重复的次数为 ν_i , 记 $p_i = \nu_i/n$, 于是可得该设计的离散概率分布形式

$$\xi_n = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_k \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_k \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

为简单起见, 精确设计一般用上述离散分布的形式来表示.

设根据点集 $\xi_n = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 来进行试验, 得到一组观测 $\mathcal{D}_n = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, 2, \dots, n\}$. 由3.1节的知识可知, 矩阵

$$\mathbf{M}(\xi_n) = \sum_{i=1}^n \mathbf{f}(\mathbf{x}_i) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_i) = n \sum_{j=1}^k p_j \mathbf{f}(\mathbf{x}_j) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_j)$$

的逆恰为参数 $\boldsymbol{\beta}$ 的最小二乘估计 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的方差矩阵. 于是, 从提高估计精度的角度来考虑, 最优设计应使得矩阵 $\mathbf{M}(\xi_n)$ 达到某种意义上的“最大”. 为简化符号, 以后将略去矩阵 $\mathbf{M}(\xi_n)$ 中的常数 n . 将离散设计推广到连续的情况, 得到如下定义.

定义 3.10. 称试验区域 \mathcal{X} 上的概率分布 ξ 为一个设计 (*design*), 其信息矩阵 (*information matrix*) 定义为

$$\mathbf{M}(\xi) := \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) d\xi, \quad (3.41)$$

称满足 $\det(\mathbf{M}(\xi)) \neq 0$ 的设计 ξ 为非奇异的 (*non-singular*).

上述定义中用到了关于概率测度 ξ 的积分的概念, 为便于理解, 可设想 ξ 有密度函数 $p(\mathbf{x})$, (3.41) 式表示

$$\mathbf{M}(\xi) = \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x}.$$

以下以 Ξ 表示所有设计的全体, Ξ_n 表示支撑点数为 n 的离散设计的全体, $\mathcal{M} = \{\mathbf{M}(\xi) : \xi \in \Xi\}$ 表示模型(3.39)的一切设计对应的信息矩阵的全体. 显然, Ξ 和 Ξ_n 均为凸集.

命题 3.11. (1) 任意设计 ξ 的信息矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 都是非负定的;

(2) 如果 $n < m$, 则 $\det(\mathbf{M}(\xi)) = 0$ 对任意 $\xi \in \Xi_n$ 都成立;

(3) \mathcal{M} 是一个闭凸集;

(4) 对任意 $\xi \in \Xi$, 均存在 $\tilde{\xi} \in \Xi_n$, $n \leq m(m+1)/2 + 1$, 使得 $\mathbf{M}(\xi) = \mathbf{M}(\tilde{\xi})$.

信息矩阵的对称性和半正定性可由其定义马上得到. 如果 ξ 的支撑点数小于 m , 则矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 的秩肯定小于 m , 因而其行列式为 0. 由 \mathcal{X} 的紧性和 \mathbf{f} 的连续性, 可得到 \mathcal{M} 为闭凸集. 命题的第四款的证明不作要求, 它需要用到线性代数中的 Carathéodory 定理¹, 它成立的原因是 \mathcal{M} 可视作维数为 $m(m+1)/2$ 的向量空间.

根据上述命题的第四款, 对任一设计 ξ , 总可以找到另一个试验点数不超过 $m(m+1)/2 + 1$ 的设计 $\tilde{\xi}$, 使得它们的信息矩阵相等. 因此, 可以在试验点数不超过 $m(m+1)/2 + 1$ 的离散设计中去寻找最优设计. 事实上, 学者们发现很多回归模型的最优设计的支撑点数恰为参数个数 m , 参见文献 [8, 34].

3.3.2 优良性准则

以下仅考虑非奇异设计的优良性. 如前所述, 最优回归设计应使得信息矩阵“最大”. 由于矩阵的大小不好比较, 优良性准则通常通过对信息矩阵的“加工” $\Phi: \mathcal{M} \mapsto \mathbb{R}^+$ 来构造.

定义 3.12. 设函数 $\Phi: \mathcal{M} \mapsto \mathbb{R}^+$ 满足 $\mathbf{M}_1 \geq \mathbf{M}_2 \Rightarrow \Phi(\mathbf{M}_1) \geq \Phi(\mathbf{M}_2)$. 若存在设计 $\xi^* \in \Xi$ 使得 $\Phi(\mathbf{M}(\xi^*)) = \inf \{\Phi(\mathbf{M}(\xi)) : \xi \in \Xi\}$, 则称 ξ^* 为 Φ 最优设计 (Φ -optimal design).

¹设 S 是 n 维线性空间 \mathbb{R}^n 的一个子集, 则 S 的凸包

$$S^* = \left\{ \sum_{i=1}^l \alpha_i s_i : s_i \in S, \alpha_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, l, \sum_{i=1}^l \alpha_i = 1, l = 1, 2, \dots \right\}$$

中的任意元素 s^* 均可表示为 S 中至多 $n+1$ 个元素的凸组合, 即存在 $\alpha_i \geq 0$, 且 $\sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i = 1, s_i \in S, i = 1, 2, \dots, n+1$, 使得

$$s^* = \sum_{i=1}^{n+1} \alpha_i s_i.$$

不同的 Φ 导致不同的最优性准则, Φ 一般不能保证 $\Phi(\mathbf{M}_1) \geq \Phi(\mathbf{M}_2) \Rightarrow \mathbf{M}_1 \geq \mathbf{M}_2$, 因此在确定最优性准则时, 选择的 Φ 最好具有一定的统计意义. 为简单起见, 以下将复合函数 $\Phi(\mathbf{M}(\xi))$ 简记为 $\Phi(\xi)$. 下面介绍几个常用的优良性准则.

1. D 准则

定义

$$\varPhi_D(\xi) := \det(\mathbf{M}^{-1}(\xi)), \quad (3.42)$$

称相应的最优设计为 **D 最优设计** (*D-optimal design*). 在模型(3.39)的假定下, 根据引理1.2和定理3.1, 最小二乘估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的置信椭球体为

$$\left\{ \boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^m : (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}})^T \mathbf{M}^{-1}(\xi) (\boldsymbol{\beta} - \hat{\boldsymbol{\beta}}) \leq c \right\},$$

其中 c 为仅依赖于置信水平的常数. 利用多元积分可以证明, 置信椭球体的体积为

$$V(\xi) = \frac{[\pi(m+2)]^{m/2}}{\Gamma(\frac{m}{2}+1)} [\det(\mathbf{M}^{-1}(\xi))]^{\frac{1}{2}},$$

其中 $\Gamma(x)$ 是 Γ 函数. 因此, $\det(\mathbf{M}^{-1}(\xi))$ 越小, 则 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的精度越高.

2. G 准则

根据定理3.1, 如果 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 为由设计 ξ 得到的最小二乘估计, 则点 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ 处的响应预测值 $\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的方差

$$\text{Var}(\hat{y}(\mathbf{x})) = \frac{\sigma^2}{n} \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{f}(\mathbf{x}).$$

称点 \mathbf{x} 与设计 ξ 之间的距离 $d(\mathbf{x}, \xi) := \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{f}(\mathbf{x})$ 为设计 ξ 的**标准化方差**. 称

$$\varPhi_G(\xi) := \sup \{d(\mathbf{x}, \xi) : \mathbf{x} \in \mathcal{X}\} \quad (3.43)$$

为 **G 最优准则** (*G-optimal criteria*), 相应的最优设计称为 **G 最优设计** (*G-optimal design*). G 最优设计使得模型的最大预测方差达到最小.

例 3.12. 考虑一元线性回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \varepsilon, \quad x \in [-1, 1].$$

设计 $\xi_n = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 的信息矩阵为

$$\mathbf{M}(\xi_n) = \frac{1}{n} \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{bmatrix}$$

信息矩阵的行列式

$$\det(\mathbf{M}(\xi_n)) = \frac{1}{n^2} \begin{vmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{vmatrix} = \frac{1}{n^2} \left(n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n x_i \right) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

且

$$\mathbf{M}^{-1}(\xi_n) = \frac{1}{n \det(\mathbf{M}(\xi_n))} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^n x_i^2 & -\sum_{i=1}^n x_i \\ -\sum_{i=1}^n x_i & n \end{bmatrix}.$$

表 3.9 给出的是几个简单的设计，其中设计 I、II 和 IV 是对称的，而设计 III 是非对称的。

表 3.9: 单因子试验的几个简单设计

设计	x_1	x_2	x_3	x_4
I	-1	1		
II	-1	0	1	
III	-1	1	1	
IV	-1	-1/3	1/3	1

设计 I 的信息矩阵

$$\mathbf{M}(\xi_I) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

可见它是正交设计，两个系数的估计 $\hat{\beta}_0$ 和 $\hat{\beta}_1$ 是不相关的，且其标准化方差

$$d(x, \xi_I) = 1 + x^2, \quad x \in [-1, 1].$$

当 $x = \pm 1$ 时，标准化方差取得最大值 2。其余几个设计的信息矩阵和标准化方差留作习题。

3. C 准则

任取向量 $\mathbf{c} \in \text{range}(\mathbf{M}(\xi))$ ，即 \mathbf{c} 可以表示成矩阵 \mathbf{M} 的行的线性组合，称

$$\Phi_C(\xi) := \mathbf{c}^T \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{c} \tag{3.44}$$

为 **C 最优设计** (*C-optimal design*)，该准则的统计意义是使对模型参数线性组合 $\mathbf{c}^T \boldsymbol{\beta}$ 的最优无偏估计的方差达到最小。

4. A 准则

注意到 $\text{tr}(\mathbf{M}^{-1}(\xi))$ 反映的是估计量 $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ 的各分量的方差和，定义

$$\Phi_A(\xi) := \text{tr}\{\mathbf{M}^{-1}(\xi)\}, \tag{3.45}$$

称相应的最优化准则为 **A 准则**，也称 **MV 准则**。

5. E 准则

记 $\lambda_{\min}(\mathbf{M}(\xi))$ 为矩阵 $\mathbf{M}(\xi)$ 的特征值的最小值, E 准则定义为

$$\varPhi_E(\xi) := \lambda_{\min}^{-1}(\mathbf{M}(\xi)). \quad (3.46)$$

由于 $\lambda_{\min}(\mathbf{M}(\xi)) = \min\{\mathbf{c}^T \mathbf{M}(\xi) \mathbf{c} : \mathbf{c}^T \mathbf{c} = 1\}$, E 准则保证了在 $\mathbf{c}^T \mathbf{c} = 1$ 的限制下线性组合 $\mathbf{c}^T \boldsymbol{\beta}$ 的方差最大值达到最小, 亦使得置信椭球体的最长轴最小.

注 3.13. 可以从不同的角度对最优化准则进行分类. 线性准则是指具有形式

$$\varPhi(\xi) = \text{tr}\{\mathbf{L} \mathbf{M}^{-1}(\xi)\}, \quad (3.47)$$

其中, \mathbf{L} 是给定的非负定矩阵. 当 $\mathbf{L} = \mathbf{I}$ 和 $\mathbf{L} = \mathbf{c} \mathbf{c}^T$ 时, 分别得到 A 准则和 C 准则. 称

$$\varPhi_p(\xi) = (\text{tr}\{\mathbf{M}^{-p}(\xi)\})^{1/p} \quad (3.48)$$

为 \varPhi_p 准则, 其中 $0 \leq p \leq +\infty$. 当 $p = +\infty$ 和 $p = 1$ 时, 分别得到 E 准则和 A 准则.

例 3.13. 考虑线性回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \cdots + \beta_d x^d.$$

(Guest, 1958) 证明了该模型的 D -最优设计的设计点与 Legendre 多项式 $P_n(x)$ 的导函数有关. 低阶 Legendre 多项式如下:

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1).$$

高阶 Legendre 多项式可由如下递推公式得到

$$(d+1)P_{d+1}(x) = (2d+1)xP_d(x) - dP_{d-1}(x).$$

不同的 Legendre 多项式在 $[-1, 1]$ 上是互相正交的, 即

$$\int_{-1}^1 P_n(x) P_m(x) dx = \frac{2}{2n+1} \delta_{mn},$$

其中 δ_{mn} 为 Kronecker 函数. d 阶多项式模型的 D 最优设计点为下面方程的根

$$(1 - x^2) \frac{dP_d(x)}{dx} = 0.$$

即 d 阶模型的 D 最优设计的支撑点由两个端点 -1 和 1 , 以及 d 节 Legendre 多项式的导数的根组成.

当 $d = 1$ 时, 其信息矩阵

$$\mathbf{M} = \frac{1}{n} \begin{bmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n x_i & \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{bmatrix},$$

其行列式为

$$|\mathbf{M}| = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2,$$

若试验次数 $n = 2$, 则 D -最优设计为

$$\xi = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

若试验次数 $n = 3$, 则 D -最优设计为

$$\xi = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1/3 & 2/3 \end{pmatrix} \quad or \quad \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 2/3 & 1/3 \end{pmatrix}.$$

容易验证, 上述 D -最优设计也是 A -最优设计. 下表总结了 $d = 1, 2, \dots, 6$ 对应的模型的 D 最优设计的支撑点.

d	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7
1	-1						1
2	-1			0			1
3	-1		$-a_3$		a_3		1
4	-1		$-a_4$	0	a_4		1
5	-1	$-a_5$	$-b_5$		b_5	a_b	1
6	-1	$-a_6$	$-b_6$	0	b_6	a_6	1

其中,

$$a_3 = 1/\sqrt{5} = 0.4472, \quad a_4 = \sqrt{3/7} = 0.6547,$$

$$a_5 = \sqrt{(7 + 2\sqrt{7})/21} = 0.7651, \quad b_5 = \sqrt{(7 - 2\sqrt{7})/21} = 0.2852,$$

$$a_6 = \sqrt{(15 + 2\sqrt{15})/33} = 0.8302, \quad b_6 = \sqrt{(15 - 2\sqrt{15})/33} = 0.4688.$$

可见, 大多数一元线性回归模型的 D 最优设计, 其试验点在 $[-1, 1]$ 上的分布是不均匀的, 与线性模型的阶数密切相关. 因此, 针对某个具体问题, 需先选定一个回归模型, 根据该模型的最优设计做试验, 然后根据数据来拟合模型, 假如发现该模型不理想, 需要换另外的模型. 而更换后的模型其最优设计点与原设计不同, 因此需追加新的试验. 也就是说, 最优回归设计不是稳健的, 设计点随着模型的变化而显著变化.

二元以上的多项式回归, 当 Taylor 展开的阶数 $d \geq 3$ 时没有理论结果, 只能采用数值算法. 下面简单介绍 $d = 1$ 和 $d = 2$ 时的结论.

例 3.14. 考虑 p 个因子的一阶线性回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \cdots + \beta_p x_p + \varepsilon.$$

(Heiligers, 1992) 和 (Chen, 2003) 指出, 如果试验区域 \mathcal{X} 为 \mathbb{R}^p 中的凸集, 则多元线性回归模型的离散或精确 D 最优设计的设计点都在 \mathcal{X} 的顶点上.

由于超球体和超立方体都是凸集, 因此这两种试验区域的 D 最优设计点都在其顶点上. 构造离散或精确 D 最优设计时, 只需在全体顶点的集合中搜索即可.

- 设超球体

$$\mathcal{X} = \left\{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : \sum_{i=1}^p x_i^2 \leq 1 \right\},$$

内嵌正多面体的顶点个数为 n , 并记为 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$. 记

$$U_n = \begin{Bmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_n \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n} & \cdots & \frac{1}{n} \end{Bmatrix}$$

为均匀设计. 则当 $n > p$ 时, 不管是否存在截距项 β_0 , 设计 U_n 都是多元一次线性回归模型的 D 最优设计 (Fedorov, 1972, Section 2.2). 由于超球体内嵌正多面体有无穷个, 而且顶点个数只要大于 p 即可, 因此多元线性模型的离散 D 最优设计不唯一.

- 如果试验区域为超立方体

$$\mathcal{X} = \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^p : |x_i| \leq 1, i = 1, 2, \dots, p \}$$

设 $S = \{ \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_s : \mathbf{v}_i \in \mathbb{R}^p, i = 1, 2, \dots, s \}$ 表示超立方体的全体顶点. 则离散 D 最优设计为

$$\xi_{n,S} = \begin{Bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_s \\ \frac{1}{s} & \frac{1}{s} & \cdots & \frac{1}{s} \end{Bmatrix}.$$

试验次数为 n 的精确 D 最优设计为

$$\xi_{n,S} = \begin{Bmatrix} \mathbf{v}_1 & \mathbf{v}_2 & \cdots & \mathbf{v}_s \\ \frac{n_1}{n} & \frac{n_1}{n} & \cdots & \frac{n_s}{n} \end{Bmatrix}, \quad \max_{i,j} |n_i - n_j| \leq 1, \sum_{i=1}^s n_i = n.$$

由此可见, 多元线性回归模型的最优设计也不唯一. 当然, 工程中的试验设计问题试验约束往往十分复杂, 可能导致试验区域并不是凸的.

例 3.15. 考虑包含 p 个因子的二阶线性回归模型

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^p \beta_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq p} \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon.$$

当试验区域为超球体时, 二阶线性回归模型中的截距项会影响 D 最优设计.

- 当截距项不为 0 时, (Farrell et al., 1967) 指出, 二阶线性回归模型的 D 最优设计为: 中心点权重为 $1/[(p+1)(p+2)]$, 其余权重均匀分布在超球体的球面上;
- 当截距项为 0 时, (Chen, 2003) 指出, 二阶线性回归模型的 D 最优设计为超球体球面上的均匀分布, 不包括中心点.

试验区域为超立方体的情形比较复杂, 这里就不介绍了.

3.3.3 等价性定理

我们知道, 在非线性规划中有所谓的 KKT 条件, 它是给定点为极值点的必要条件. 那么如何判断给定的设计 ξ 为 Φ -最优设计呢? 本节介绍的等价性定理可以达到这一目的, 它是最优回归设计中的重要理论基础.

为简单起见, 与通常优化问题类似地, 假定 $\Phi: \Xi \mapsto \mathbb{R}^+$ 为凸函数, 即

$$\Phi(\alpha\xi + (1-\alpha)\eta) \leq \alpha\Phi(\xi) + (1-\alpha)\Phi(\eta),$$

同时要求 Φ 一阶可微. 在等价性定理中, 主要用到的工具是 Φ 的 F -导数, 其定义为

$$F_\Phi(\xi, \eta) := \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{\alpha} [\Phi((1-\alpha)\xi + \alpha\eta) - \Phi(\xi)].$$

称 $F_\Phi(\xi, \eta)$ 为 $\Phi(\cdot)$ 在 ξ 处沿 η 方向的 F -导数.

Silvey(1980) 给出了 F -导数的一些性质:

- (1) $F_\Phi(\xi, \xi) = 0$;
- (2) $F_\Phi(\xi, \eta) \leq \Phi(\eta) - \Phi(\xi)$;
- (3) Φ 在 ξ 处可微意味着若 $\sum w_i = 1$, 则 $F_\Phi(\xi, \sum w_i \eta_i) = \sum w_i F_\Phi(\xi, \eta_i)$.

性质 (1) 由 F 导数的定义得到; 性质 (3) 由 Φ 的凸性得到; 性质 (3) 的证明需要一定的技巧, 这里不予论述. 当 Φ 在 Ξ 中所有点处可微时, 利用性质 (3) 可得到

$$F_\Phi(\xi, \eta) = \sum_{\mathbf{x}} w(\mathbf{x}) F_\Phi(\xi, \delta_{\mathbf{x}}), \quad (3.49)$$

其中, $\delta_{\mathbf{x}}$ 表示在试验点 \mathbf{x} 上权重为 1 的设计, $w(\mathbf{x})$ 表示设计 η 在点 \mathbf{x} 处的权重. 称

$$\phi(\mathbf{x}, \xi) := F_\Phi(\xi, \delta_{\mathbf{x}}), \quad (3.50)$$

为敏感性函数 (sensitive function).

Keifer 和 Wolfowitz 于 1960 年提出的等价性定理, 它即可用来判断一个设计是否为最优设计, 也是构造最优设计的理论基础. 以下定理来自文献 [13].

定理 3.14. 如果 Φ 为凸函数, 且在 Ξ 中的所有点处可微, 则下列命题等价:

- (1) ξ^* 是 Φ -最优设计;

- (2) 对任意 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, 都有 $\phi(\mathbf{x}, \xi^*) \geq 0$;
(3) $\phi(\mathbf{x}, \xi^*)$ 在 ξ^* 的所有支撑点上都取最小值, 且最小值为 0.

Proof. 设 ξ^* 是 Φ -最优设计, 即 $\Phi(\xi^*) \leq \Phi(\eta)$ 对任意 $\eta \in \Xi$ 成立. 因此, 对任意 $\alpha \in [0, 1]$ 以及 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, 有

$$\Phi((1 - \alpha)\xi^* + \alpha\delta_{\mathbf{x}}) - \Phi(\xi^*) \geq 0,$$

由 F -导数的定义可知 $\phi(\mathbf{x}, \xi^*) \geq 0$. 即 (1) \Rightarrow (2) 成立.

(2) \Rightarrow (1). 对任意 $\eta \in \Xi$, 如果 (2) 成立, 则由(3.49)式可知, $F_\Phi(\xi^*, \eta) \geq 0$. 由 F -导数的性质可知, $\Phi(\eta) \geq \Phi(\xi^*)$, 即 ξ^* 是 Φ 最优设计.

(1) \Rightarrow (3). 设 \mathbf{x} 为最优设计 ξ^* 的支撑点, 其权重 $w(\mathbf{x}) > 0$. 根据 F -导数的性质可知

$$0 = F_\Phi(\xi^*, \xi^*) = \sum_{\mathbf{x}} w(\mathbf{x})F_\Phi(\xi^*, \delta_{\mathbf{x}}) = \sum_{\mathbf{x}} w(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}, \xi^*),$$

由此可知, $\phi(\mathbf{x}, \xi^*) = 0$, (3) 成立.

(3) \Rightarrow (2) 显然, 而前面已经证明了 (2) \Rightarrow (1), 故 (3) \Rightarrow (1) 成立. \square

定理3.14利用数学中比较抽象的 F 导数, 建立了任意可微凸准则 Φ 的最优设计的充必条件. 将它应用到具体准则时, 需要验证其凸性和可微性, 并给出敏感性函数. 下面以 D -最优准则为例, 给出定理3.14的一个推论.

直接验证行列式函数的凸性以及求 D 准则的敏感性函数都比较难. 注意到对数函数的单调性, D 最优准则可以改写作 $\Phi_D(\xi) = -\log \det(\mathbf{M}(\xi))$. 利用方阵行列式的不等式:

设 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 为两个非负定方阵, $0 < \alpha < 1$, 则

$$\det[\alpha\mathbf{A} + (1 - \alpha)\mathbf{B}] \geq [\det(\mathbf{A})]^\alpha[\det(\mathbf{B})]^{1-\alpha},$$

且等号成立的充要条件是 $\mathbf{A} = \mathbf{B}$.

可以得到 $-\log \det[\mathbf{M}(\xi)]$ 作为 Ξ 上的函数是一个凹函数, 即如果 $\xi_1 \neq \xi_2$, $0 < \alpha < 1$, 则

$$-\log \det[(1 - \alpha)\mathbf{M}(\xi_1) + \alpha\mathbf{M}(\xi_2)] \leq -(1 - \alpha)\log \det[\mathbf{M}(\xi_1)] - \alpha \log \det[\mathbf{M}(\xi_2)].$$

根据敏感性函数的定义:

$$\phi_D(\mathbf{x}, \xi) = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{\alpha} \{-\log \det[\mathbf{M}((1 - \alpha)\xi + \alpha\delta_{\mathbf{x}})] + \log \det[\mathbf{M}(\xi)]\}, \quad (3.51)$$

下面考虑 $\log \det[\mathbf{M}((1 - \alpha)\xi + \alpha\delta_{\mathbf{x}})]$ 的计算. 注意到

$$\begin{aligned} \mathbf{M}((1 - \alpha)\xi + \alpha\delta_{\mathbf{x}}) &= (1 - \alpha)\mathbf{M}(\xi) + \alpha\mathbf{f}(\mathbf{x}_0)\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \\ &= (1 - \alpha) \left[\mathbf{M}(\xi) + \frac{\alpha}{1 - \alpha} \mathbf{f}(\mathbf{x})\mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \right], \end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned}
 \det[\mathbf{M}((1-\alpha)\xi + \alpha\delta_{\mathbf{x}})] &= (1-\alpha)^m \det \left[\mathbf{M}(\xi) + \frac{\alpha}{1-\alpha} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \right] \\
 &= (1-\alpha)^m \det \begin{bmatrix} \mathbf{M}(\xi) & -\frac{\alpha}{1-\alpha} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) & 1 \end{bmatrix} \\
 &= (1-\alpha)^m \det \begin{bmatrix} \mathbf{M}(\xi) & -\frac{\alpha}{1-\alpha} \mathbf{f}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{0} & 1 + \frac{\alpha}{1-\alpha} \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_0) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{f}(\mathbf{x}) \end{bmatrix} \\
 &= (1-\alpha)^m \left[1 + \frac{\alpha}{1-\alpha} d(\mathbf{x}, \xi) \right] \det(\mathbf{M}(\xi)).
 \end{aligned}$$

将上式代入(3.51)式, 得到

$$\begin{aligned}
 \phi_D(\mathbf{x}, \xi) &= \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \frac{1}{\alpha} \left\{ -m \log(1-\alpha) - \log \left[1 + \frac{\alpha}{1-\alpha} d(\mathbf{x}, \xi) \right] \right\} \\
 &= m - d(\mathbf{x}, \xi).
 \end{aligned} \tag{3.52}$$

将该敏感性函数代入定理3.14, 得到 D 最优设计的等价性定理.

定理 3.15. 以下三个结论等价:

- (1) ξ^* 是 D 最优设计, 即 $\det(\mathbf{M}(\xi^*)) = \max_{\xi} \det(\mathbf{M}(\xi))$;
- (2) ξ^* 是 G 最优设计, 即 $\max_{\mathbf{x}} d(\mathbf{x}, \xi^*) = \min_{\xi} \max_{\mathbf{x}} d(\mathbf{x}, \xi)$;
- (3) ξ^* 满足 $\max_{\mathbf{x}} d(\mathbf{x}, \xi^*) = m$, 且 $d(\mathbf{x}, \xi^*)$ 在 ξ^* 的任一支撑点达到最大.

此外, 所有 D 最优设计有相同的信息矩阵, D 最优设计的线性组合还是 D 最优设计.

Proof. 设 $\xi \in \Xi$ 满足 $\det[\mathbf{M}(\xi)] \neq 0$. 根据定义, $d(\mathbf{x}, \xi) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{f}(\mathbf{x})$. 两边对 ξ 积分, 得到

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathcal{X}} d(\mathbf{x}, \xi) d\xi &= \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\xi \\
 &= \int_{\mathcal{X}} \text{tr} [\mathbf{M}^{-1}(\xi) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x})] d\xi \\
 &= \text{tr} \left[\mathbf{M}^{-1}(\xi) \int_{\mathcal{X}} \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \mathbf{f}(\mathbf{x}) d\xi \right] \\
 &= \text{tr}(\mathbf{I}) = m.
 \end{aligned}$$

根据这一结果, 可得

$$m = \int_{\mathcal{X}} d(\mathbf{x}, \xi) d\xi \leq \int_{\mathcal{X}} \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} d(\mathbf{x}, \xi) d\xi = \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} d(\mathbf{x}, \xi) \int_{\mathcal{X}} d\xi = \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} d(\mathbf{x}, \xi). \tag{3.53}$$

由定理3.14中(1)与(2)的等价性, 可推得 $(3) \Rightarrow (1)$ 成立. 由定理3.14中(1)与(3)的等价性, 可知 $(1) \Rightarrow (3)$ 成立. 结合(3.53)式以及定理3.14中(1)、(2)的等价性, 可知 $(1) \Rightarrow (2)$ 成立. 结合(3.53)式以及定理3.14中(2)、(3)的等价性, 可知 $(2) \Rightarrow (3)$ 成立.

假定 ξ_1^* 和 ξ_2^* 均为最优设计, $\xi^* = (1 - \alpha)\xi_1^* + \alpha\xi_2^*$, 则根据 Φ_D 的凸性,

$$-\log \det(\mathbf{M}(\xi^*)) \leq -(1 - \alpha) \log \det(\mathbf{M}(\xi_1^*)) - \alpha \log \det(\mathbf{M}(\xi_2^*)),$$

根据 ξ_1^* 和 ξ_2^* 的最优性, $-\log \det(\mathbf{M}(\xi^*)) \geq -\log \det(\mathbf{M}(\xi_1^*))$ 且 $-\log \det(\mathbf{M}(\xi^*)) \geq -\alpha \log \det(\mathbf{M}(\xi_2^*))$, 故为使上式成立, 必须有定理的最后结论成立. \square

定理3.15不仅揭示了 D 最优和 G 最优之间的等价性, 还给出了 ξ^* 是 D 最优的一个充要条件 $\max_{\mathbf{x}} d(\mathbf{x}, \xi^*) = m$.

3.3.4 D 最优设计的迭代求解

最优设计一般不存在解析表达式, 只能通过数值算法来求解. D 准则和 G 准则是最优回归设计中最重要的准则, 本节讨论构造 D 最优设计和 G 最优设计的数值算法. 从数学上来看, 求 D 最优设计 ξ , 就是要求使得 $\det(\mathbf{M}(\xi))$ 最大的设计. 由前面的知识可知, 只需限定在离散设计中去寻找.

在等价性定理的基础上, 前苏联统计学家 Fedorov 给出了一个构造 D 最优设计的迭代算法. 令

$$\xi_0 = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 & \mathbf{x}_2 & \cdots & \mathbf{x}_n \\ p_1 & p_2 & \cdots & p_n \end{pmatrix}$$

为某一非奇异的设计. 对 $k = 0, 1, \dots$, 寻找

$$\mathbf{x}_{n+k+1} = \arg \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} d(\mathbf{x}, \xi_k)$$

以及

$$\alpha_k = \arg \max_{\alpha \in [0, 1]} \det \mathbf{M}(\xi_{k+1}(\alpha)),$$

这里 $\xi_{k+1}(\alpha) = (1 - \alpha)\xi_k + \alpha \delta_{\mathbf{x}_{n+k+1}}$. 可以证明

$$\alpha_k = \frac{d(\mathbf{x}_{n+k+1}, \xi_k) - m}{[d(\mathbf{x}_{n+k+1}, \xi_k) - 1]m}.$$

根据定理3.15, 当 $k \rightarrow \infty$ 时, Fedorov 算法得到的序列 ξ_k 收敛到 D 最优设计.

Fedorov 算法的缺点是所得最优设计的试验点的数目无法控制. 实际应用中有时需要构造试验次数为 n 的 D -最优设计, 即限制在 Ξ_n 中寻找使得信息矩阵的行列式达到最大的精确设计 ξ_n^* . 如果 ξ_n^* 在其谱点 \mathbf{x}_i 处的权重为 w_i , 则 $n w_i$ 为整数.

一般地, 为了搜索试验次数为 n 的精确 D -最优设计, 需要给出试验次数为 n 的初始设计; 然后基于初始设计不断替换试验点得到最佳的精确设计. 初始设计可通过给试验次数为 $n_0 (< n)$ 的精确设计添加试验区域 \mathcal{X} 新点得到; 也可通过删除试验次数为 $n_0 (> n)$ 的精确设计的一些设计点得到. 得到初始设计后, 通过不断地引入新的点和删除旧的点, 逐步实现

Algorithm 1 Fedorov 算法

```

1: 令  $k = 0, \varepsilon = 10$ ;
2: 构造非奇异的初始设计  $\xi_0$ ;
3: while ( $\varepsilon > \varepsilon_{\max}$ )&( $k < k_{\max}$ ) do
4:   求点  $\mathbf{x}_k = \arg \max_{\mathbf{x}} d(\mathbf{x}, \xi_k)$ , 并令  $\alpha = \frac{d(\mathbf{x}_k, \xi_k) - m}{[d(\mathbf{x}_k, \xi_k) - 1]m}$ ;
5:    $\xi_{k+1} = (1 - \alpha)\xi_k + \alpha \delta_{\mathbf{x}_k}$ ;
6:    $\varepsilon \leftarrow \det(\mathbf{M}(\xi_{k+1})) - \det(\mathbf{M}(\xi_k))$ ;
7:    $k \leftarrow k + 1$ ;
8: end while

```

设计的最优化. 以 (Kernighan and Lin, 1970) 提出的 **KL 算法**为例, 构造精确 D -最优设计的主要步骤如下.

- (1) 产生试验次数为 n_0 的确定性设计 ξ_0 : 在实际应用中, 可根据经验提出若干个希望试验的设计点, 从这些设计点中随机抽取一部分, 再从整个试验区域内随机抽取一部分, 构成试验次数为 n_0 的初始设计.
- (2) 由 ξ_0 通过序贯方法添加设计点 ($n_0 < n$) 或删除设计点 ($n_0 > n$), 得到试验次数为 n 的初始设计 η_0 , 添加或删除的依据是标准化方差. 包括前进法和后退法.
 - 前进法. 从试验区域中添加的点 \mathbf{x}_l 为使得当前 ξ_i 的标准化方差达到最大的点,

$$d(\mathbf{x}_l, \xi_i) = \max_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} d(\mathbf{x}, \xi_i).$$

当设计 ξ_i 的信息矩阵 \mathbf{M} 不可逆时, 可以 $\mathbf{M} + \varepsilon \mathbf{I}$ 来代替, 其中 ε 为很小的正数, 可取为 $10^{-6} < \varepsilon < 10^{-4}$.

- 后退法. 删除的设计点 \mathbf{x}_k 为使得当前设计 ξ_i 的标准化方差达到最小的点,

$$d(\mathbf{x}_k, \xi_{i-1} \setminus \mathbf{x}_k) = \min_{\mathbf{x} \in \xi_{i-1}} d(\mathbf{x}, \xi_{i-1} \setminus \{\mathbf{x}\}).$$

- (3) 在试验区域内对初始设计的点进行替换, 直至收敛. 替换的目的是使得信息矩阵的行列式增大, 根据等价性定理, 这可以由标准化方差的变动来实现, 这里就不再赘述了.

每次增加试验点、删除试验点或替换试验点, 都需要对信息矩阵进行更新. (Atkinson and Donev 1992) 给出信息矩阵的迭代公式能够大大节约计算时间. 记常数 c_k 和 c_l 如下

- 如果增加设计点 \mathbf{x}_l , 则 $c_k = 0, c_l = (n + 1)^{-1}$;
- 如果删除设计点 \mathbf{x}_k , 则 $c_k = (n + 1)^{-1}, c_l = 0$;
- 如果将设计点 \mathbf{x}_k 替换为 \mathbf{x}_l , 则 $c_k = c_l = (n + 1)^{-1}$.

假设算法已经迭代了 t 次, 得到的设计为 ξ_t , 则第 $t + 1$ 次设计 ξ_{t+1} 的信息矩阵、信息矩阵

的行列式及其信息矩阵的逆有如下迭代公式

$$\begin{cases} \mathbf{M}(\xi_{t+1}) = \frac{1 - c_l}{1 - c_k} \mathbf{M}(\xi_t) + \frac{1}{1 - c_k} \left(c_l \mathbf{f}(\mathbf{x}_l) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_l) - c_k \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_k) \right), \\ |\mathbf{M}(\xi_{t+1})| = \left[\left(1 + \frac{c_l d(\mathbf{x}_l, \xi_t)}{1 - c_l} \right) \left(1 - \frac{c_k d(\mathbf{x}_k, \xi_t)}{1 - c_k} \right) + \frac{c_k c_l d^2(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l, \xi_t)}{(1 - c_l)^2} \right] |\mathbf{M}(\xi_t)|, \\ \mathbf{M}^{-1}(\xi_{t+1}) = \frac{1 - c_l}{1 - c_k} \mathbf{M}^{-1}(\xi_t) - \frac{\mathbf{M}^{-1}(\xi_t) \mathbf{A} \mathbf{M}^{-1}(\xi_t)}{r z + c_k c_l d^2(\mathbf{x}_l, \mathbf{x}_k, \xi_t)}, \end{cases}$$

其中

$$d(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l, \xi_t) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_k) \mathbf{M}^{-1}(\xi_t) \mathbf{f}(\mathbf{x}_l),$$

$$r = 1 - c_l + c_l d(\mathbf{x}_l, \xi_t), \quad z = 1 - c_k + c_k d(\mathbf{x}_k, \xi_t),$$

$$\mathbf{A} = c_l z \mathbf{f}(\mathbf{x}_l) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_l) + c_k c_l d(\mathbf{x}_l, \mathbf{x}_k, \xi_t) \left(\mathbf{f}(\mathbf{x}_l) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_k) + \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_l) \right) - c_k r \mathbf{f}(\mathbf{x}_k) \mathbf{f}^T(\mathbf{x}_k).$$

学者们还提出了很多最优设计的求解算法, 这里列出几篇比较新的文献以供参考: [33, 35, 37, 38]. R 添加包 `AlgDesign` 中的函数 `optFederov()` 可用于求解 D 最优设计.

3.4 响应曲面法

响应曲面法 (response surface methodology, RSM) 是一种在模型未知情况下探求响应模型极值 (或响应模型) 的序贯试验方法, 往往用于因子筛选试验之后. 在这一阶段, 线性关系不足以描述因子与响应之间的关系, 因此每一因子至少需要取三个水平, 导致需要较多的试验次数. 当试验因子数目较大, 例如大于 6 时, 响应曲面法的使用受到限制.

3.4.1 响应曲面法的基本步骤

考虑响应模型

$$y(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x}) + \varepsilon,$$

由于指标 y 与因子 $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_p]^T$ 之间可以用一个 p 维曲面来刻画, 故称 $\mathbb{E}(y) = f(\mathbf{x})$ 为**响应曲面**. 由于 f 为未知的, 在点 (a_1, a_2, \dots, a_p) 附近利用 Taylor 展开来逼近它,

$$\begin{aligned} y &= \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j (x_j - a_j) + \sum_{1 \leq j \leq k \leq p} \beta_{jk} (x_j - a_j)(x_k - a_k) \\ &\quad + \sum_{1 \leq j \leq k \leq l \leq p} \beta_{jkl} (x_j - a_j)(x_k - a_k)(x_l - a_l) + \dots + \varepsilon. \end{aligned} \tag{3.54}$$

上述模型关于参数 $\{\beta_0, \beta_{ij}, \dots\}$ 是一个线性模型, 它包含无限个参数. Taylor 展开的意义在于, 它把一个不可数无穷维的函数 $f(\mathbf{x})$ 转化为一个可数无穷维的数列 $\{\beta_0, \beta_{ij}, \dots\}$. 要想把无穷转化为有限, 需对 Taylor 级数进行截断. 截断误差除与截断阶数有关外, 还与响应曲面 $f(\mathbf{x})$ 的光滑程度有关. 如何选择截断阶数, 需要综合考虑试验数据信息与截断误差之间的关系, 这将在3.5节阐述.

响应曲面法只利用响应曲面的一阶和二阶 Taylor 展开, 其基本思路是: 首先在小范围内用**一阶模型**

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_j + \varepsilon \tag{3.55}$$

来拟合 f , 得到近似的最速上升方向; 一步一步使试验点过渡到极值点附近后, 再用**二阶模型**

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^p \beta_j x_j + \sum_{1 \leq j \leq k \leq p} \beta_{jk} x_j x_k + \varepsilon \tag{3.56}$$

来得到最佳的水平组合.

- 能使一阶模型中的参数都被估计出来的设计称为**一阶模型设计**. 由于一阶模型(3.55)中一共有 $p+1$ 个参数, 因此至少需要 $p+1$ 个试验点.
- 能使二阶模型中所有参数都被估计出来的设计称为**二阶模型设计**. 二阶模型中一共有 $(p+1)(p+2)/2$ 个参数, 每个因子至少要取三个水平. 常用的二阶模型设计包括**中心**

复合设计 (central composite design), Box-Behnken 设计和均匀壳设计 (uniform shell design) 等.

最速上升法 (steepest ascent method) 是一种使响应 y 朝着最速上升的方向序贯移动的方法¹. 当当前试验点 \mathbf{x} 可能远离最优试验点 \mathbf{x}^* 时, 在 \mathbf{x} 的邻域内用一阶模型(3.55)近似真实曲面. 利用 \mathbf{x} 邻域内的一些试验数据, 通过最小二乘法估计一阶模型中的系数 β_i , 得到拟合模型

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i.$$

对拟合模型中的 \hat{y} 关于 x_i 求导, 可得

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial x_i} = \hat{\beta}_i, \quad i = 1, 2, \dots, p.$$

最速上升的方向为向量 $(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p)$ 的方向, 或者方向

$$\lambda(\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p), \quad \lambda > 0.$$

沿着该方向序贯地移动, 一般可以达到最优试验点附近.

当采用最速上升法使得试验点到达极值点附近后, 采用二阶模型(3.56)可在小邻域中准确地寻找到极值点. 记二阶拟合模型为

$$\hat{y} = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p \hat{\beta}_i x_i + \sum_{1 \leq i \leq j \leq p} \hat{\beta}_{ij} x_i x_j = \hat{\beta}_0 + \mathbf{x}^T \mathbf{b} + \mathbf{x}^T \mathbf{B} \mathbf{x},$$

其中, $\mathbf{b}^T = [\hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p]^T$, \mathbf{B} 为 $p \times p$ 阶对称矩阵

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \hat{\beta}_{11} & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{12} & \cdots & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{1p} \\ \frac{1}{2}\hat{\beta}_{12} & \hat{\beta}_{22} & \cdots & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{1}{2}\hat{\beta}_{1p} & \frac{1}{2}\hat{\beta}_{2p} & \cdots & \hat{\beta}_{pp} \end{bmatrix}.$$

对二阶拟合模型中的 \hat{y} 关于 \mathbf{x} 求导, 并令其为 $\mathbf{0}$, 可得

$$\frac{\partial \hat{y}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b} + 2\mathbf{B} \mathbf{x} = \mathbf{0},$$

其解

$$\mathbf{x}_s = -\frac{1}{2} \mathbf{B}^{-1} \mathbf{b}$$

称为二阶模型的**稳定点** (stationary point), 这里假设矩阵 \mathbf{B} 可逆. 根据二阶模型的特点, 稳定点 \mathbf{x}_s 可能是极大值点, 可能是极小值点, 也可能是鞍点 (saddle point). 把稳定点代入二阶拟合模型, 可得到

$$\hat{y}_s = \hat{\beta}_0 + \frac{1}{2} \mathbf{x}_s^T \mathbf{b}.$$

¹若试验的目的是使 y 最小化, 那么该方法就变为最速下降法.

于是, 剩下的就是如何判断 \mathbf{x}_s 属于何种稳定点了.

当 $p = 2$ 或 3 时, 可通过画等高线图 (contour map) 得到. 下面介绍更一般的所谓典型分析法 (canonical analysis), 其主要想法是把二阶拟合模型的中心点变换到平稳点, 并适当旋转坐标组, 化成标准的二次型. 具体作法如下: 设 $p \times p$ 阶矩阵 \mathbf{P} 为矩阵 \mathbf{B} 的互相正交的单位特征向量, 则 $\mathbf{P}^T \mathbf{B} \mathbf{P} = \mathbf{\Lambda}$ 且

$$\mathbf{P}^T \mathbf{B} \mathbf{P} = \mathbf{\Lambda},$$

其中 $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_p)$, λ_i 为 \mathbf{B} 的与 \mathbf{P} 的第 i 列对应的特征值. 令

$$\mathbf{z} = (z_1, \dots, z_p)^T = \mathbf{P}^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_s),$$

则通过简单的矩阵变换, 可把二阶拟合模型变为典范型 (canonical form)

$$\hat{y} = \hat{y}_s + \sum_{i=1}^p \lambda_i z_i^2. \quad (3.57)$$

诸 λ_i 的符号决定了稳定点 \mathbf{x}_s 的类型:

- 当诸 λ_i 同号时, 稳定点 \mathbf{x}_s 邻域内的等高线呈椭球形, 且当特征值都大于零时, \mathbf{x}_s 为极小值点; 当特征值都小于 0 时, \mathbf{x}_s 为极大值点;
 - 当诸 λ_i 有正有负时, 平稳点 \mathbf{x}_s 邻域内的等高线图呈双曲线型, 此时 \mathbf{x}_s 为鞍点.
- 这些都是线性代数中熟知的结论.

为了有效地拟合响应曲面, 需要精心选择序贯试验中每一步的设计. 对于一阶模型, 由于只需估计诸因子的线性效应, 采用 2^p 设计或 2^{p-k} 设计即可, 试验次数不会太多. 而对于二阶模型, 情况比较复杂, 下一节介绍的中心复合设计就是一种常用的二阶模型设计.

3.4.2 中心复合设计

从因子设计的角度来看, 如果每个因素取 3 个水平, 则需要较多的试验次数; 而如果用两水平的部分因子设计, 又不能拟合二次回归模型. 从最优回归设计的角度来看, 例 3.15 指出, 对于超矩形试验区域, 二阶模型的 D 最优设计就比较复杂. 注意到响应曲面法的目的是寻找响应函数的极值点, 因此设计的最优性准则应使得极值的预测方差尽可能小. 不幸的是, 极值点的位置是未知的. 在这种情况下我们应选择使得整个区域内最大预测方差最小的准则来优化试验方案. 综合上述要求和困难, 产生了中心复合设计.

若每个因素的两个水平用编码 ± 1 表示, 中心复合设计是在 2^{p-k} 设计的基础上加一些点, 使每个因素都有 3 个水平. 一般地, 一个中心复合设计由如下三部分点组成.

- (a) 超立方体的顶点: 当 $p \leq 4$ 时取 p -维立方体的所有顶点 $(\pm 1, \dots, \pm 1)$, 当 $p \geq 5$ 时取 p -维立方体的部分顶点, 构成 2^p 完全因子设计或 2^{p-k} ($k \geq 5$) 部分因子设计;
- (b) 坐标轴点: p 维坐标轴上两两对称的 $2p$ 个点 $(\pm \alpha, 0, \dots, 0)$, $(0, \pm \alpha, 0, \dots, 0)$, \dots , $(0, \dots, 0, \alpha)$;

(c) 中心点: $(0, 0, \dots, 0)$ 的 n_0 次重复.

图3.3给出了二维和三维空间中中心复合设计的三类设计点. 下面分别阐述如何确定 (a) 中的 k 、(b) 中的 α 以及 (c) 中的 n_0 .

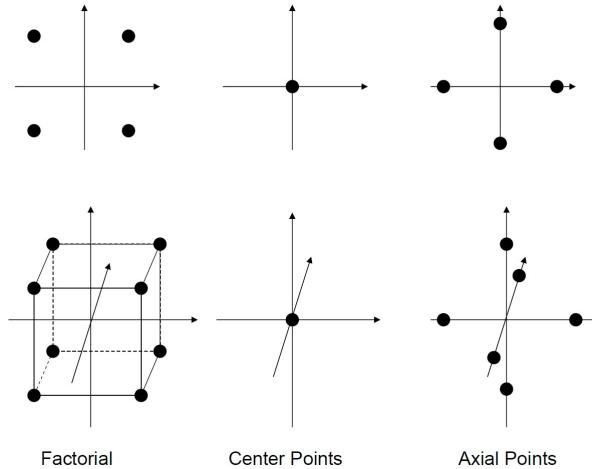


图 3.3: 2 维与 3 维空间中心复合设计

由于二阶模型(3.56)中需要估计得参数共有 $(p+1)(p+2)/2$ 个, 为了把这些系数都估计出来, (Box et al., 1978) 建议当 $p = 5, 6, 7$ 时, (a) 取 2^{p-1} 部分因子设计; 当 $p = 8, 9$ 时, (a) 取 2^{p-2} 部分因子设计, 当 $p = 10$ 时, (a) 取 2^{p-3} 部分因子设计等.

步骤 (b) 中的 $2p$ 个点到原点的距离都是 α . 当 $\alpha < 1$ 时, 这些点都在立方体内; 当 $\alpha = 1$ 时, 这些点在立方体表面的中心; 当 $\alpha > 1$ 时, 这些点位于立方体外. 一般地, 选取 $1 \leq \alpha \leq \sqrt{p}$. 当 $\alpha = \sqrt{p}$ 时, 除了中心点外, 其它的设计点都位于半径为 \sqrt{p} 的球面上, 当 p 较大时, 这些设计点会远离原点, 不利于当前的数据分析, 因此需要选择合适的 α . 一个合理的准则是从旋转性的角度出发确定 α . 由3.3节的知识可知, 对于二阶回归模型(3.56), 根据试验数据 $\{(x_i, y_i) : i = 1, \dots, n\}$ 预测点 \mathbf{x} 处的预测方差为

$$\text{Var}(\hat{y}(\mathbf{x})) = \sigma^2 \mathbf{x}^T (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{x},$$

其中, σ 表示随机误差的方差, \mathbf{X} 为广义设计矩阵. 一个设计称为可旋转的 (rotatable), 若所有到原点距离相等的试验点 \mathbf{x} 都有相同的预测方差 $\text{Var}(\hat{y}(\mathbf{x}))$, 即在超球面上的预测方差相等. (Box and Hunter, 1957) 证明了当 $\alpha = 2^{(p-k)/4}$ 时, 中心复合设计是可旋转的.

步骤 (c) 中中心点的重复次数 n_0 易受准则的影响, 即在不同的准则下, n_0 的取值差别较大. 一般地, n_0 不宜太大, 且当 α 逼近 \sqrt{p} 时, 取 $n_0 \in [3, 5]$; 当 α 逼近 1 时, 取 $n_0 \in [1, 2]$; 当 $\alpha \in (1, \sqrt{p})$ 时, 取 $n_0 \in [2, 4]$.

表3.10列出了部分中心复合设计的特征。从表中可看出，中心复合设计所需的试验次数随着因子个数 p 呈指数增长，因此当 p 较大时所需试验次数较多。例如当 $p = 9$ 时，试验次数 $n = 2^{9-2} + 2 \times 9 + 2 = 148$ ，远大于参数的个数 $m = (9+1)(9+2)/2 = 55$ 。当试验因子个数较多、而一次试验的代价又较大时，需要寻找试验次数更少的二阶模型设计。

表 3.10: 中心复合设计的特征

变量个数	p	2	3	4	5	6	7	8	9
参数个数	$(p+1)(p+2)/2$	6	10	15	21	28	36	45	55
(a) 中 k 值	k	0	0	0	1	1	1	2	2
非中心点个数	$2^{p-k} + 2p$	8	14	24	26	44	78	80	130
(b) 中 α 值	$2^{(p-k)/4}$	1.414	1.682	2	2	2.387	2.828	2.828	3.364
(c) 中 n_0 值	n_0	3-5	2-4	3-5	2-4	2-4	2-4	3-5	2-4

R 添加包 `rsm` 中的函数 `cccd()` 可用于生成精度均匀¹ (uniform precision) 的中心复合设计。以下代码块产生 3 因子的可旋转中心复合设计。其中，参数 n_0 的第一个元素表示中心点的重复次数，第二个元素表示区组数目。

```
1 library(rsm)
2 rotd <- ccd(3, n0 = c(4, 2), alpha = "rotatable", randomize = FALSE)
```

对象 `rotd` 的内容为

```
1 > rotd
2 > run.order std.order x1.as.is x2.as.is x3.as.is Block
3 #> 1      1      1 -1.000000 -1.000000 -1.000000 1
4 #> 2      2      2  1.000000 -1.000000 -1.000000 1
5 #> 3      3      3 -1.000000  1.000000 -1.000000 1
6 #> 4      4      4  1.000000  1.000000 -1.000000 1
7 #> 5      5      5 -1.000000 -1.000000  1.000000 1
8 #> 6      6      6  1.000000 -1.000000  1.000000 1
9 #> 7      7      7 -1.000000  1.000000  1.000000 1
10 #> 8      8      8  1.000000  1.000000  1.000000 1
11 #> 9      9      9  0.000000  0.000000  0.000000 1
12 #> 10     10     10 0.000000  0.000000  0.000000 1
13 #> 11     11     11 0.000000  0.000000  0.000000 1
14 #> 12     12     12 0.000000  0.000000  0.000000 1
15 #> 13     1      1 -1.681793  0.000000  0.000000 2
16 #> 14     2      2  1.681793  0.000000  0.000000 2
17 #> 15     3      3  0.000000 -1.681793  0.000000 2
18 #> 16     4      4  0.000000  1.681793  0.000000 2
19 #> 17     5      5  0.000000  0.000000 -1.681793 2
20 #> 18     6      6  0.000000  0.000000  1.681793 2
21 #> 19     7      7  0.000000  0.000000  0.000000 2
22 #> 20     8      8  0.000000  0.000000  0.000000 2
23 #>
24 #> Data are stored in coded form using these coding formulas ...
25 #> x1 ~ x1.as.is
26 #> x2 ~ x2.as.is
27 #> x3 ~ x3.as.is
```

¹在半径为 1 的超球体试验区域内的预测方差一致或大体一致

它的后三列给出设计矩阵. 从中可以看到, 前 8 次试验是 2^3 的全面实施, 9-11 次为中心点的 3 次重复试验, 这 11 次试验的数据可用来拟合线性模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{13} x_1 x_3 + \beta_{23} x_2 x_3.$$

如果上述线性模型拟合效果不好, 则追加第 2 个区组中的 8 次试验以拟合二阶模型.

利用代码块

```
1 rotdm <- rotd[ , 3:5]
2 plot(rotdm)
3 library(Vdgraph)
4 Vdgraph(rotdm)
```

可画出中心复合设计的设计点图3.4和预测方差分布分布图3.5. 从图3.5中可以看出, 在半径为 1 的球体内部, 预测方差基本一致, 这就是精度均匀的概念.

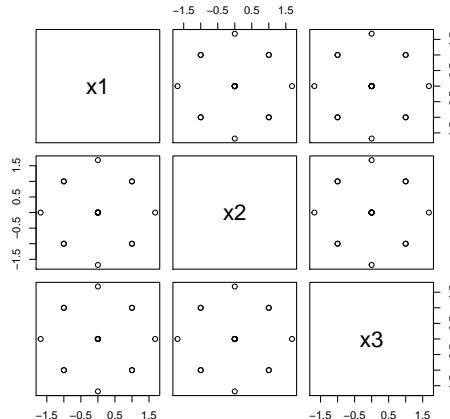


图 3.4: 3 因子中心复合设计

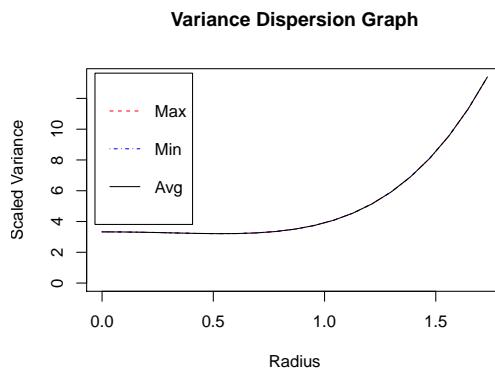


图 3.5: 3 因子中心复合设计的预测方差分布图

添加包 `rsm` 中的函数 `ccd.pick()` 能给出所有可能的中心复合设计. 以下代码块给出了

10 个可能的中心复合设计. 其输出各列的含义可通过 R 的帮助文件了解.

```

1 > library(rsm)
2 > ccd.pick(k=3)
3 #>   n.c n0.c blks.c n.s n0.s bbr.c wbr.s bbr.s N alpha.rot alpha.orth
4 #> 1   8    9     1   6    6    1    1    1 29 1.681793 1.680336
5 #> 2   8    2     1   6    1    1    1    1 17 1.681793 1.673320
6 #> 3   8    6     1   6    4    1    1    1 24 1.681793 1.690309
7 #> 4   8    5     1   6    3    1    1    1 22 1.681793 1.664101
8 #> 5   8    10    1   6    7    1    1    1 31 1.681793 1.699673
9 #> 6   8    8     1   6    5    1    1    1 27 1.681793 1.658312
10 #> 7   8    3     1   6    2    1    1    1 19 1.681793 1.705606
11 #> 8   8    7     1   6    5    1    1    1 26 1.681793 1.712698
12 #> 9   8    4     1   6    2    1    1    1 20 1.681793 1.632993
13 #> 10  8    4     1   6    3    1    1    1 21 1.681793 1.732051

```

如果要获得上述设计中的某一个, 可利用包 rsm 提供的函数 ccd(). 代码

```

1 ccd.up <- ccd(y ~ x1 + x2 + x3, n0 = c(4, 2), alpha = "rotatable", randomize =
  FALSE )

```

产生上述的第 9 个设计, 参数 $n0.c = 4$, $n0.s = 2$, 且所得到的设计 ccd.up 是精度均匀的, 这可调用函数 Vdgraph(ccd.up[, 3 : 5]) 得到其方差分布图来验证.

上述代码产生的设计 ccd.up 是已经编码后的因子, 在操作时还需要变换到原来的因子. 如果因子 x_1 表示温度, 且当前温度为 150°C ; x_2 表示压力, 当前压力为 50; 而 x_3 表示速度, 当前速度为 4. 则可用如下代码得到真实的设计方案.

```

1 > ccd(y ~ x1 + x2 + x3, n0 = c(4, 2), alpha = "rotatable", coding = list(x1 ~ (Temp
  - 150)/10, x2 ~ (Press - 50)/5, x3 ~ (Rate - 4)/1), randomize = FALSE)
2 > run.order std.order Temp Press Rate y Block
3 #> 1       1      140.0000 45.00000 3.000000 NA 1
4 #> 2       2      160.0000 45.00000 3.000000 NA 1
5 #> 3       3      140.0000 55.00000 3.000000 NA 1
6 #> 4       4      160.0000 55.00000 3.000000 NA 1
7 #> 5       5      140.0000 45.00000 5.000000 NA 1
8 #> 6       6      160.0000 45.00000 5.000000 NA 1
9 #> 7       7      140.0000 55.00000 5.000000 NA 1
10 #> 8      8      160.0000 55.00000 5.000000 NA 1
11 #> 9      9      150.0000 50.00000 4.000000 NA 1
12 #> 10     10     150.0000 50.00000 4.000000 NA 1
13 #> 11     11     150.0000 50.00000 4.000000 NA 1
14 #> 12     12     150.0000 50.00000 4.000000 NA 1
15 #> 13     1      133.1821 50.00000 4.000000 NA 2
16 #> 14     2      166.8179 50.00000 4.000000 NA 2
17 #> 15     3      150.0000 41.59104 4.000000 NA 2
18 #> 16     4      150.0000 58.40896 4.000000 NA 2
19 #> 17     5      150.0000 50.00000 2.318207 NA 2
20 #> 18     6      150.0000 50.00000 5.681793 NA 2
21 #> 19     7      150.0000 50.00000 4.000000 NA 2
22 #> 20     8      150.0000 50.00000 4.000000 NA 2
23 #>
24 #> Data are stored in coded form using these coding formulas ...
25 #> x1 ~ (Temp - 150)/10
26 #> x2 ~ (Press - 50)/5
27 #> x3 ~ (Rate - 4)/1

```

如果将函数 ccd() 中的参数 alpha 设置为 “spherical”, 则所有数轴上的点距离原点的距离与超立方体顶点距离原点的距离一致; 而如果将参数 alpha 设置为 “faces”, 则所有数轴上的点都位于超立方体的表面上.

3.4.3 其它二阶模型设计

中心复合设计对每个因子实质上都取了 5 个水平 $(-\alpha, -1, 0, 1, \alpha)$, 导致试验次数较多. (Box-Behnken, 1960) 提出一种每个因子均只需取 3 水平的二阶设计. Box-Behnken 设计由 2 类试验点组成:

- n_0 个中心点;
- 任意两个因子的 2^2 设计, 其余因子固定在中间水平, 共 $2^2 \times p \times (p-1)/2 = 2p(p-1)$ 个试验点.

由此可见, Box-Behnken 设计的试验点随着因子个数 p 呈二次多项式增长, 当 p 较大时, 其所需的试验次数将远小于中心复合设计的试验次数. 两因子试验不存在 Box-Behnken 设计. 下表给出的是三因子试验 (对水平编码后) 的 Box-Behnken 设计. 它一共只需 15 次试验, 而三因子试验的中心复合设计要求 20 次试验.

表 3.11: 三因子试验 Box-Behnken 设计

序号	x_1	x_2	x_3
1	-1	-1	0
2	1	-1	0
3	-1	1	0
4	1	1	0
5	-1	0	-1
6	1	0	-1
7	-1	0	1
8	1	0	1
9	0	-1	-1
10	0	1	-1
11	0	-1	1
12	0	1	1
13	0	0	0
14	0	0	0
15	0	0	0

添加包 `rsm` 中的函数 `bbd()` 可用于生成三到七个因子的 Box-Behnken 设计. 例如

```

1 > library(rsm)
2 > Treb <- bbd(y~x1+x2+x3, randomize = FALSE, n0 = 3, coding = list(x1~(A-4)/2, x2~
   (B-12)/4, x3~(C - 3.5)/0.5) )
3 > Treb
4 #>   run.order std.order A B C y
5 #> 1       1       1 2 8 3.5 NA
6 #> 2       2       2 6 8 3.5 NA
7 #> 3       3       3 2 16 3.5 NA
8 #> 4       4       4 6 16 3.5 NA

```

```

9  #> 5      5      5 2 12 3.0 NA
10 #> 6      6      6 6 12 3.0 NA
11 #> 7      7      7 2 12 4.0 NA
12 #> 8      8      8 6 12 4.0 NA
13 #> 9      9      9 4 8 3.0 NA
14 #> 10     10     10 4 16 3.0 NA
15 #> 11     11     11 4 8 4.0 NA
16 #> 12     12     12 4 16 4.0 NA
17 #> 13     13     13 4 12 3.5 NA
18 #> 14     14     14 4 12 3.5 NA
19 #> 15     15     15 4 12 3.5 NA
20 #>
21 #> Data are stored in coded form using these coding formulas ...
22 #> x1 ~ (A - 4)/2
23 #> x2 ~ (B - 12)/4
24 #> x3 ~ (C - 3.5)/0.5

```

当然, 试验次数较少意味着获取的信息较少. 例如, Box-Behnken 设计每个因子只取三水平, 得到的数据无法检验二阶模型的合理性. 此外, Box-Behnken 设计也不具可旋转性. 从图3.6可以看出, Box-Behnken 设计在超立方体的顶点上没有安排试验点, 因此 Box-Behnken 设计无法通过 2^k 部分因子设计得到. 当试验者明确知道线性模型不足以表示因子与指标之间的响应关系, 且试验次数又受到限制时, 可以采用 Box-Behnken 设计.

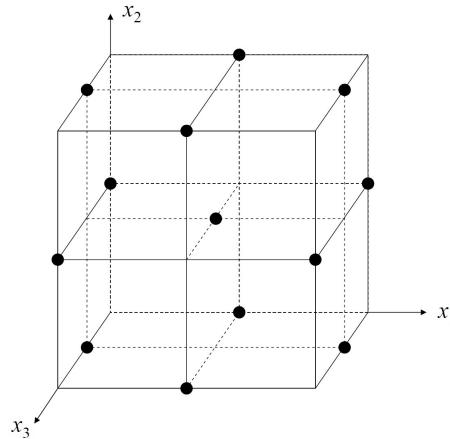


图 3.6: 3 因子 Box-Behnken 设计

除了中心复合设计和 Box-Behnken 设计, 文献中还提出了一些二阶模型设计. 例如小复合设计 (small composite design, Westlake, 1965)、均匀壳设计以及层次设计 (hybrid design, Roquemore, 1976) 等, 可参考 (Box and Draper, 2007).

R 添加包 `rsm` 中的函数 `rsm()` 可用于拟合线性 (相对于参数而言) 响应模型, 函数 `nls()` 可用于拟合一些非线性模型. 这里就不再叙述了, 感兴趣的读者可参考 (Lawson, 2015).

3.5 非参数回归简介

非参数推断 (nonparametric inference) 的基本目的, 是在对模型的假设尽可能少的情况下, 利用数据对某一未知的量做出推断. 由于假设少, 非参数模型通常是无穷维的. 因此, 也称非参数推断为无穷维推断, 或数据驱动的推断. 以本节讨论的非参数回归为例, 未知量就是因子与响应之间的函数关系, 它是无穷维的. 文献 [32] 是一本不错的非参数统计读本, 本节不少内容取自该文献.

具体来说, 本节的问题是在给定数据 $\{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, \dots, n\}$ 的条件下, 估计 (或者按照机器学习的行话, 学习) 回归函数 $f(\mathbf{x}) = \mathbb{E}(y|\mathbf{x})$. “尽量少的假定” 不是没有假定, 试想如果 \mathbf{x} 与 y 之间没有关系, 那么样本量再大, 也不可能得出一个有用的规律. 通常假定回归函数 f 属于某一个“函数类”, 如 p 阶可导函数等, 后面将具体明确回归函数的假定. 为简单起见, 首先考虑一维的情形

$$y_i = f(x_i) + \varepsilon_i, \quad x_i \in [0, 1], \quad \varepsilon \stackrel{\text{i.i.d.}}{\sim} N(0, \sigma^2), \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.58)$$

设 \hat{f}_n 为 f 的一个估计, 也称 \hat{f}_n 为一个光滑器 (smoother). 定义点 x 处的平方损失为

$$\ell_2(f(x), \hat{f}_n(x)) = [f(x) - \hat{f}_n(x)]^2. \quad (3.59)$$

损失的期望称为风险 (risk), 平方损失导出的风险恰为均方误差:

$$R(f(x), \hat{f}_n(x)) := \mathbb{E} [\hat{f}(x) - f(x)]^2 = \text{MSE}(\hat{f}_n(x)).$$

由于估计量 $\hat{f}_n(x)$ 与样本有关, 上式中的期望是对样本而言的. 如前所述, MSE 可分解为估计偏差和估计方差两部分:

$$\text{MSE}(\hat{f}(x)) = [\mathbb{E}(\hat{f}(x)) - f(x)]^2 + \text{Var}(\hat{f}(x)). \quad (3.60)$$

其中第一项为偏差的平方, 第二项为方差. 后面将看到, 方差与偏差的均衡 (variance-bias trade-offs) 是非参数估计中面临的主要挑战.

有时需要考虑在整个试验区域上的风险, 即积分的风险 (integrated risk) 或积分的均方误差 (integrated mean square error)

$$\text{IMSE} = \int_{\mathcal{X}} \text{MSE}(x) w(x) dx. \quad (3.61)$$

其中, $w(x)$ 为满足 $w \geq 0$ 且 $\int_{\mathcal{X}} w(x) dx = 1$ 的权函数, 一般直接取为 1. 回归问题中还可考虑平均均方误差 (average mean squared error)

$$R_n(f, \hat{f}_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n R(f(x_i), \hat{f}_n(x_i)). \quad (3.62)$$

由于 $R_n(f, \hat{f}_n)$ 仅与 $\{x_1, \dots, x_n\}$ 的经验分布有关, 因而它是一种经验风险 (empirical risk). 当然, 衡量估计量的好坏除了用平方损失外, 还可选用其它损失函数, 这里就不一一叙述了.

3.5.1 线性光滑器

如果对每个 x , 存在向量值函数 $\ell(x) = (\ell_1(x), \dots, \ell_n(x))^T$, 使得 \hat{f}_n 可表示为

$$\hat{f}_n(x) = \sum_{i=1}^n \ell_i(x) y_i,$$

则称 \hat{f}_n 为 f 的一个**线性光滑器** (linear smoother). 记 $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_n)^T$, 定义拟合值向量为 $\hat{\mathbf{y}} = (\hat{y}_1(x_1), \dots, \hat{y}_n(x_n))^T$. 则

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{H}\mathbf{y},$$

其中 \mathbf{H} 为 $n \times n$ 矩阵, 其第 i 行为 $\ell^T(x_i)$. 与线性回归类似, 称矩阵 \mathbf{H} 为**光滑矩阵** (smoothing matrix) 或**帽子矩阵** (hat matrix), 称 $\nu := \text{tr}(\mathbf{H})$ 为**线性光滑器的有效自由度** (effective degrees of freedom). 利用线性光滑器, 文献中给出了方差 σ^2 的一个估计

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n [y_i - \hat{f}_n(x_i)]^2}{n - 2\nu + \text{tr}(\mathbf{H}^T \mathbf{H})}.$$

对于线性回归而言, 由于 \mathbf{H} 为幂等矩阵, 因而 σ^2 的上述估计式在线性回归模型中也适用.

例 3.16. 给定 $h > 0$, 令 $B_x = \{i : |x_i - x| \leq h\}$, n_x 表示集合 B_x 中点的数目,

$$\ell_i(x) = \begin{cases} 1/n_x, & |x_i - x| \leq h, \\ 0, & |x_i - x| > h. \end{cases}$$

定义 $f(x)$ 的**局部平均估计** (*local average estimator*) 为

$$\hat{f}_n(x) = \sum_{i=1}^n \ell_i(x) y_i.$$

显然, \hat{f}_n 为一个线性光滑器, 它是 $f(x)$ 的局部平均估计. 假定 $n = 9$, $x_i = i/9$, $h = 1/9$, 则

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix},$$

有效自由度 $\nu = \text{tr}(\mathbf{H}) = 10/3$.

例3.16中的线性光滑器依赖于光滑参数 h . 一般地, 线性光滑器中均存在一个光滑参数 h , 需要某种确定 h 的方法. 理想是选择 h 使得经验风险

$$R_h(f, \hat{f}_n) = \mathbb{E} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [\hat{f}_n(x_i) - f(x_i)]^2 \right)$$

最小, 实际是 $R_h(f, \hat{f}_n)$ 依赖于未知函数 f , 无法由最小化经验风险的准则确定 h . 作为替代, 将使 $R_h(f, \hat{f}_n)$ 的估计 $\hat{R}_h(\hat{f}_n)$ 最小. 能否用机器学习中称之为训练误差 (training error) 的残差平方和

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{f}_n(x_i)]^2$$

来估计风险呢? 当然可以, 但它不是一个好的估计, 会导致过拟合. 原因在于同一批数据用了两次: 一次估计函数, 一次估计风险, 使得用它来估计风险总是偏小的. 统计学家们提出了交叉验证的方法来估计风险.

定义 3.16. \hat{f}_n 的缺一交叉验证得分 (*leave-one-out cross-validation score*) 定义为

$$CV = \hat{R}_h(\hat{f}_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{f}_{(-i)}(x_i)]^2, \quad (3.63)$$

其中 $\hat{f}_{(-i)}$ 表示未用第 i 个数据点 (x_i, y_i) 得到的线性光滑器.

一般来说, $\hat{f}_{(-i)}$ 可根据线性光滑器的具体情况得到. 这里给出其形式上的定义:

$$\hat{f}_{(-i)}(x) = \sum_{j=1}^n \ell_{j,(-i)}(x) y_j,$$

其中

$$\ell_{j,(-i)}(x) = \begin{cases} \frac{\ell_j(x)}{\sum_{k \neq i} \ell_k(x)}, & j \neq i, \\ 0, & j = i. \end{cases}$$

即首先把 x_i 点处的权重设为 0, 再将其它权重归一化.

理论表明, CV 是风险的近似无偏估计. CV 的计算公式中, 需要重复计算线性光滑器 n 次. 好在统计学家们提供了 CV 的一个快速计算公式. 设 \hat{f}_n 为一个线性光滑器, 则

$$\hat{R}_h(\hat{f}_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[\frac{y_i - \hat{f}_n(x_i)}{1 - H_{ii}} \right]^2, \quad (3.64)$$

其中, H_{ii} 表示光滑矩阵对角线上的元素. 还有一种称为广义交叉验证 (*generalized cross-validation*) 的近似方法,

$$GCV(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[\frac{y_i - \hat{f}_n(x_i)}{1 - v/n} \right]^2, \quad (3.65)$$

它将 H_{ii} 替换成它的平均 $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n H_{ii} = \nu/n$, 这里 $\nu = \text{tr}(\mathbf{H})$ 为有效自由度.

3.5.2 局部回归方法

局部回归方法利用点 x 附近的点 x_i 处响应值 y_i 的加权平均来估计 $f(x)$, 离 x 越近的点的权重越大. 称满足 $K(x) \geq 0$,

$$\int K(x) dx = 1, \quad \int xK(x) dx = 0, \quad \sigma_K^2 \equiv \int x^2 K(x) dx > 0$$

的函数 K 为一个核. 给定核 K , 令 $h > 0$ 为一个正数, 带宽 (bandwidth) 为 h 的 Nadaraya-Watson 核估计定义为

$$\hat{f}_n(x) = \sum_{i=1}^n \ell_i(x) y_i, \quad (3.66)$$

这里

$$\ell_i(x) = \frac{K\left(\frac{x-x_i}{h}\right)}{\sum_{i=1}^n K\left(\frac{x-x_i}{h}\right)}.$$

显然, Nadaraya-Watson 核估计是线性光滑器. 非参数回归中常用的核包括以下几类.

- **boxcar 核:** $K(x) = \frac{1}{2} \mathbb{1}_{[0,1]}(x);$
- **Gaussian 核:** $K(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2};$
- **Epanechnikov 核:** $K(x) = \frac{3}{4}(1-x^2) \mathbb{1}_{[0,1]}(x);$
- **tricube 核:** $K(x) = \frac{70}{81}(1-|x|^3)^3 \mathbb{1}_{[0,1]}(x).$

实践表明, 核 K 的选择对估计结果影响不大. 更重要的是带宽 h 的确定, 它控制了光滑的程度, h 越大, 得到的估计越光滑. 一般让带宽依赖于样本量, 因此有时记带宽为 h_n . 以下定理表明带宽是如何影响估计的.

定理 3.17. 设试验点是来自于密度函数为 $p(x)$ 的抽样, 则当 $h_n \rightarrow 0$ 且 $nh_n \rightarrow \infty$ 时, 在积分的平方损失函数下 Nadaraya-Watson 核估计的风险为

$$\begin{aligned} R_{h_n}(f, \hat{f}_n) &= \frac{h_n^4}{4} \left[\int x^2 K(x) dx \right]^2 \int \left[f''(x) + 2f'(x) \frac{p'(x)}{p(x)} \right]^2 dx \\ &\quad + \frac{\sigma^2}{nh_n} \int K^2(x) dx \int \frac{1}{p(x)} dx + o(nh_n^{-1}) + o(h_n^4). \end{aligned} \quad (3.67)$$

上式中的第一项为偏差, 第二项为方差. 对(3.67)式中的 h_n 求导, 可得出渐近的最优带宽 $h_* = O(n^{-1/5})$, 代入(3.67)式得到风险在理论上的收敛速度为 $n^{-4/5}$. 这个收敛速度比参数模型的收敛速度 n^{-1} 要慢, 这是利用非参数方法的代价. 当然(3.67)式只是一个理论结果, 它依赖于真实回归函数 f , 实际应用中还是需要采用交叉验证方法来确定带宽 h .

令 $w_i(x) = K((x_i - x)/h)$, 求 a 使得加权残差平方和

$$\sum_{i=1}^n w_i(x)(y_i - a)^2$$

最小, 可得到 Nadaraya-Watson 估计. 这提示我们, 如果用一个 p 阶局部多项式来代替局部常数, 使加权残差平方和最小, 有可能改进估计. 给定 x , 定义多项式

$$P_x(u; \mathbf{a}) = a_0 + a_1(u - x) + \frac{a_2}{2!}(u - x)^2 + \cdots + \frac{a_p}{p!}(u - x)^p. \quad (3.68)$$

选择使如下加权残差平方和最小的 $\hat{\mathbf{a}} = (\hat{a}_0, \dots, \hat{a}_p)^T$ 来估计 $\mathbf{a} = (a_0, \dots, a_p)^T$:

$$\sum_{i=1}^n w_i(x) [y_i - P_x(x_i; \mathbf{a})]^2.$$

显然, 最小化上式得到的 $\hat{\mathbf{a}}$ 与 x 有关. f 的局部估计为

$$\hat{f}_n(u) = P_x(u; \hat{\mathbf{a}}),$$

特别地, 令 $u = x$, 得到 $f(x)$ 的局部多项式回归 (local polynomial regression):

$$\hat{f}_n(x) = P_x(x; \hat{\mathbf{a}}) = \hat{a}_0(x).$$

下面讨论 $\hat{\mathbf{a}}(x)$ 的具体形式. 记 $\mathbf{W}_x = \text{diag}\{w_1(x), w_2(x), \dots, w_n(x)\}$,

$$\mathbf{X}_x = \begin{bmatrix} 1 & x_1 - x & \cdots & \frac{(x_1 - x)^p}{p!} \\ 1 & x_2 - x & \cdots & \frac{(x_2 - x)^p}{p!} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n - x & \cdots & \frac{(x_n - x)^p}{p!} \end{bmatrix},$$

利用(3.7)式, 可得到 $\mathbf{a}(x)$ 的加权最小二乘估计为

$$\hat{\mathbf{a}}(x) = (\mathbf{X}_x^T \mathbf{W}_x \mathbf{X}_x)^{-1} \mathbf{X}_x^T \mathbf{W}_x \mathbf{y}. \quad (3.69)$$

因 $\hat{f}_n(x) = \hat{a}_0(x)$, 令 $\boldsymbol{\ell}(x)$ 为矩阵 $(\mathbf{X}_x^T \mathbf{W}_x \mathbf{X}_x)^{-1} \mathbf{X}_x^T \mathbf{W}_x$ 的第一行, 则

$$\hat{f}_n(x) = \boldsymbol{\ell}^T(x) \mathbf{y}, \quad (3.70)$$

故局部多项式估计是线性光滑器.

例 3.17. 在局部多项式回归中取 $p = 1$ 得到的估计称为局部线性回归 (*local linear regression*). 此时,

$$\hat{f}_n(x) = \sum_{i=1}^n \frac{b_i(x)}{\sum_{j=1}^n b_j(x)} y_i,$$

其中

$$b_i(x) = K\left(\frac{x_i - x}{h}\right) \left[\sum_{i=1}^n K\left(\frac{x_i - x}{h}\right) (x_i - x)^2 - (x_i - x) \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x_i - x}{h}\right) (x_i - x) \right].$$

(Fan, 1992; Fan and Gijbels, 1996) 指出: 如果 $y_i = f(x_i) + \sigma(x_i)\varepsilon_i$, $\varepsilon_i \stackrel{i.i.d.}{\sim} N(0, 1)$, $\{x_1, \dots, x_n\}$ 为来自于密度函数为 $p(x)$ 的随机变量的一组样本, 且 $p(x) > 0$, $p(x), f''(x)$ 以及 $\sigma^2(x)$ 在 x 的一个邻域内连续. 则当 $h_n \rightarrow 0$ 且 $nh_n \rightarrow \infty$ 时, 局部线性估计和 Nadaraya-Watson 核估计都有渐近方差

$$\frac{\sigma^2(x)}{nh_np(x)} \int K^2(x) dx + o_P\left(\frac{1}{nh_n}\right).$$

Nadaraya-Watson 核估计的偏差为

$$h_n^2 \left[\frac{1}{2} f''(x) + \frac{f'(x)p'(x)}{p(x)} \right] \int u^2 K(u) du + o_P(h_n^2),$$

而局部线性估计得偏差为

$$h_n^2 \frac{1}{2} f''(x) \int u^2 K(u) du + o_P(h_n^2).$$

可见局部线性估计的偏差比 Nadaraya-Watson 核估计的偏差要小.

3.5.3 惩罚回归方法

仍考虑回归问题(3.58), 假定以使残差平方和

$$\sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i)]^2$$

最小的 \hat{f}_n 来估计 f . 我们知道, 如果在一切线性函数 $\beta_0 + \beta_1 x$ 中使残差平方和最小, 得到的是一条唯一的直线; 而如果在一切函数中使残差平方和最小, 则所有插值函数满足要求. 前一节中用局部回归回避了这两个极端的解, 本节将使用惩罚方法来回避这两个极端解.

惩罚回归使得**惩罚平方和** (penalized sum of squares) 最小:

$$Q(\lambda) = \sum_{i=1}^n [y_i - f(x_i)]^2 + \lambda P(f), \quad (3.71)$$

惩罚项 $P(f)$ 是函数 f 粗糙程度的某种度量.

首先考虑

$$P(f) = \int [f''(x)]^2 dx$$

的情况. 参数 λ 控制了拟合和惩罚之间的均衡. 当 $\lambda = 0$ 时, 任意插值函数都能使得 $Q(\lambda)$ 达到最小; 而当 $\lambda \rightarrow \infty$ 时, 线性最小二乘解能在使第二项为零的同时使第一项最小; 当 $\lambda \in (0, \infty)$ 时, 所得的解介于两者之间. 为了求得 $\lambda \in (0, \infty)$ 时的解, 需要定义样条.

令 $0 = \xi_0 < \xi_1 < \dots < \xi_k < \xi_{k+1} = 1$ 为区间 $(0, 1)$ 内的一组排序了的点. $(0, 1)$ 上一 $\{\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n\}$ 为**节点** (knots) 的**三次样条** (cubic spline) 为一个连续函数 r , 满足

- (1) 在区间 (ξ_i, ξ_{i+1}) 内为一个三次多项式;
- (2) r 在节点上有连续的一阶导数和二阶导数.

一般地, 一个 M 阶样条 (M^{th} -order spline) 为一个分段 $M - 1$ 阶多项式, 且在节点处有 $M - 2$ 阶连续导数. 称在边界点外为线性的样条为自然样条 (natural spline). 三次样条是在实践中最常用的样条, 它自然地出现在惩罚回归的框架中.

定理 3.18. 使由(3.71)式定义的惩罚平方和最小的函数 $\hat{f}_n(x)$ 是一个节点在数据点的自然三次样条, 称估计量 $\hat{f}_n(x)$ 为一个光滑样条 (smoothing spline).

给定节点序列 $0 = \xi_0 < \xi_1 < \cdots < \xi_k < \xi_{k+1} = 1$, 如何表示参数化地三次样条呢? 对 $j = 1, 2, \dots, k+4$, 定义

$$h_1(x) = 1, \quad h_2(x) = x, \quad h_3(x) = x^2, \quad h_4(x) = x^3, \quad h_j(x) = (x - \xi_{j-4})_+^3,$$

其中

$$(x - a)_+^p = \begin{cases} (x - a)^p, & x \geq a, \\ 0, & x < a. \end{cases}$$

则函数 $\{h_1, \dots, h_{k+4}\}$ 构成以 $\{\xi_1, \dots, \xi_k\}$ 为节点的三次样条的一个基, 称为截尾指数基 (truncated power basis). 于是, 任何以 $\{\xi_1, \dots, \xi_k\}$ 为节点的三次样条 $r(x)$ 均可表示为

$$r(x) = \sum_{j=1}^{k+4} \beta_j h_j(x).$$

除截尾指数基外, 三次自然样条常用一组更适合计算的 **B 样条基** (B-spline basis) 来表示. 定义新的节点 $\tau_1, \dots, \tau_{k+2M}$, 使得

$$\tau_1 \leq \tau_2 \leq \cdots \leq \tau_M \leq \xi_0,$$

$$\tau_{j+M} = \xi_j, \quad j = 1, 2, \dots, k,$$

$$\xi_{k+1} \leq \tau_{k+M+1} \leq \cdots \leq \tau_{k+2M}.$$

通常取 $\tau_1 = \cdots = \tau_M = \xi_0$ 以及 $\xi_{k+1} = \tau_{k+M+1} = \cdots = \tau_{k+2M}$. 可按照如下方式递归地定义 M 阶样条的基函数:

- (1) 对 $i = 1, \dots, k+2M-1$, 定义 $B_{i,1} = \mathbb{1}_{[\tau_i, \tau_{i+1})}(x)$;
- (2) 给定 $m \leq M$, 对 $i = 1, \dots, k+2M-m$, 定义

$$B_{i,m} = \frac{x - \tau_i}{\tau_{i+m-1} - \tau_i} B_{i,m-1} + \frac{\tau_{i+m} - x}{\tau_{i+m} - \tau_{i+1}} B_{i+1,m-1},$$

上式中, 如果分母为 0, 则定义整个分式为 0.

当 $M = 4$ 时, $\{B_{i,4} : i = 1, \dots, k+4\}$ 构成三次样条的一组基, 称它们为 **B 样条基函数** (B-spline basis function). B 样条基函数的优点在于它们具有紧支撑, 使得计算十分方便.

根据定理3.18, 使得(3.71)式达到最小的 f_n 为一个自然三次样条, 即

$$f(x) = \sum_{j=1}^N \hat{\beta}_j b_j(x) = \mathbf{b}^T(x)\boldsymbol{\beta}, \quad (3.72)$$

这里, $b_1(x), \dots, b_N(x)$ 表示自然样条的一组基, 如 $N = n+4$ 的 B 样条基. 于是估计 f 转化为估计诸系数 β_j . 将上式代入(3.71)式, 得到惩罚最小二乘问题:

$$\text{minimize : } (\mathbf{y} - \mathbf{B}\boldsymbol{\beta})^T(\mathbf{y} - \mathbf{B}\boldsymbol{\beta}) + \lambda \boldsymbol{\beta}^T \boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\beta}, \quad (3.73)$$

其中

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_1(x_1) & B_2(x_1) & \cdots & B_N(x_1) \\ B_1(x_2) & B_2(x_2) & \cdots & B_N(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_1(x_n) & B_2(x_n) & \cdots & B_N(x_n) \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\Omega} = \begin{bmatrix} \int b_1''(x)b_1''(x) dx & \int b_1''(x)b_2''(x) dx & \cdots & \int b_1''(x)b_N''(x) dx \\ \int b_2''(x)b_1''(x) dx & \int b_2''(x)b_2''(x) dx & \cdots & \int b_2''(x)b_N''(x) dx \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \int b_N''(x)b_1''(x) dx & \int b_N''(x)b_2''(x) dx & \cdots & \int b_N''(x)b_N''(x) dx \end{bmatrix}.$$

可以证明, 使(3.73)式最小的 $\boldsymbol{\beta}$ 值为

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{B}^T \mathbf{B} + \lambda \boldsymbol{\Omega})^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{y}. \quad (3.74)$$

将该解代入(3.72)式得到光滑样条估计为

$$\hat{f}_n(x) = \mathbf{b}^T(x)(\mathbf{B}^T \mathbf{B} + \lambda \boldsymbol{\Omega})^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{y}$$

显然, 它是一个光滑矩阵 $\mathbf{H} = \mathbf{B}(\mathbf{B}^T \mathbf{B} + \lambda \boldsymbol{\Omega})^{-1} \mathbf{B}^T$ 的线性光滑器, 光滑参数 λ 的可由交叉验证确定.

回顾本节以上内容, 待估函数的样条表示是通过惩罚项 $P(f)$ 引出来的, 最终将问题转化为惩罚最小二乘(3.73). 还有一种利用样条的方法, 成为**回归样条方法** (regression spline method), 其节点数据少于数据点数目. 把节点数目作为光滑参数, 节点位置等距确定 (或把节点位置和节点数目都作为光滑参数), 直接由最小二乘得到函数的估计 $\hat{f}_n(x) = \mathbf{b}^T(x)(\mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^T \mathbf{y}$, 对应光滑矩阵为 $\mathbf{H} = \mathbf{B}(\mathbf{B}^T \mathbf{B})^{-1} \mathbf{B}^T$.

3.5.4 正交函数法

设待估函数 $f \in \mathcal{H}$, 其中 \mathcal{H} 为由 $[0, 1]$ 上函数组成的可分 Hilbert 空间, $\{\phi_1(x), \phi_2(x), \dots\}$ 为 \mathcal{H} 的一组标准正交基. 则可将 f 展开成如下形式:

$$f = \sum_{i=1}^{\infty} \theta_i \phi_i(x), \quad (3.75)$$

其中 $\theta_i = \int_0^1 \phi_j(x) f(x) dx$. 由于数据量有限, 需对上述级数实施截断.

一种方式是将截断阶数 m 作为光滑参数, 首先得到参数 $\boldsymbol{\theta}_m = (\theta_1, \dots, \theta_m)^T$ 的最小二乘估计

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_m = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y},$$

其中

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \cdots & \phi_m(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \cdots & \phi_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_1(x_n) & \phi_2(x_n) & \cdots & \phi_m(x_n) \end{bmatrix},$$

然后利用交叉验证方法确定截断阶数 m . 这种截断方式不仅适用于正交函数基, 回归样条方法也可采用这种截断方法.

另一种方式是取截断阶数与样本量 n 相同, 将估计函数 f 转化为估计参数 $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_n)^T$, 在估计 $\boldsymbol{\theta}$ 时采用某种光滑技术. 令

$$z_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \phi_j(x_i), \quad j = 1, 2, \dots. \quad (3.76)$$

则 z_j 作为正态随机变量的线性组合仍服从正态分布, 其均值

$$\mathbb{E}(z_j) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbb{E}(y_i) \phi_j(x_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \phi_j(x_i) \approx \int f(x) \phi_j(x) dx = \theta_j,$$

其方差为

$$\text{Var}(z_j) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \text{Var}(y_i) \phi_j^2(x_i) = \frac{\sigma^2}{n^2} \sum_{i=1}^n \phi_j^2(x_i) \approx \frac{\sigma^2}{n} \int \phi_j^2(x) dx = \frac{\sigma^2}{n}.$$

如此一来, 回归问题近似地转化为如下许多正态均值问题 (many normal means problem):

$$z_i = \theta_i + \frac{\sigma^2}{n} \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n. \quad (3.77)$$

该模型的特点是参数个数始终保持与样本量相同, 但观测误差随着样本量减少. 正态均值模型有很完善的统计方法和理论, 本书就不予讨论了, 读者可从相关文献中查阅.

3.5.5 核方法

下面以 E 表示非空集合, 以 H 为定义在 E 上的函数组成的 Hilbert 空间, 如需区分, 则记 H 上的内积和内积导出的范数为 $\langle \cdot, \cdot \rangle_H$ 和 $\|\cdot\|_H$, 否则记为 $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 和 $\|\cdot\|$.

定义 3.19. 设 $K(\cdot, \cdot) : E \times E \mapsto \mathbb{R}$ 为二元函数.

- 称 K 为 E 上的对称正定函数 (*symmetric positive type function*) 或正定核 (*positive definite kernel*), 如果对任意的 $n \in \mathbb{N}$ 以及 $(t_1, \dots, t_n) \in E^n$, 克拉姆 (*Gram*) 矩阵

$$\begin{bmatrix} K(t_1, t_1) & K(t_1, t_2) & \cdots & K(t_1, t_n) \\ K(t_2, t_1) & K(t_2, t_2) & \cdots & K(t_2, t_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K(t_n, t_1) & K(t_n, t_2) & \cdots & K(t_n, t_n) \end{bmatrix}$$

为对称正定矩阵.

- 称 H 为以 K 为再生核 (*reproducing kernel*) 的再生核 **Hilbert** 空间 (*reproducing kernel Hilbert space, RKHS*), 如果对任意的 $t \in E$,

$$\langle \varphi, K(\cdot, t) \rangle = \varphi(t), \quad \forall \varphi \in H, \quad (3.78)$$

且 $H = \overline{\text{Span}\{K(\cdot, t) : t \in E\}}$.

显然, $K(\cdot, \cdot) \equiv c > 0$ 与 $K(s, t) = \delta_{st}$ 均为 E 上的核. 如果 $K(\cdot, \cdot)$ 为 E 上的核, 则对任意 $t \in E$, 都有 $K(t, t) \geq 0$, 且对任意的 $\alpha > 0$, $\alpha K(\cdot, \cdot)$ 也为 E 上的核. 如果 $K(\cdot, \cdot)$ 为再生核, 则对任意的 $(s, t) \in E^2$ 都有 $K(s, t) = \langle K(\cdot, t), K(\cdot, s) \rangle = \langle K(\cdot, s), K(\cdot, t) \rangle = K(t, s)$, 且

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j K(t_i, t_j) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j \langle K(\cdot, t_j), K(\cdot, t_i) \rangle \\ &= \left\langle \sum_{j=1}^n \lambda_j K(\cdot, t_j), \sum_{i=1}^n \lambda_i K(\cdot, t_i) \right\rangle \\ &= \left\| \sum_{j=1}^n \lambda_j K(\cdot, t_j) \right\|^2 \geq 0, \end{aligned}$$

再生核函数必为正定函数. 反之, 有如下定理.

定理 3.20 (Moore-Aronszajn). 设 $K(\cdot, \cdot)$ 为 E 上的核, 存在 E 上唯一以 K 为再生核的再生核 **Hilbert** 空间 H , 使得 $H_0 := \text{span}\{K(\cdot, t) : t \in E\}$ 在 H 中稠密, 且 H 是 H_0 在内积

$$\left\langle \sum_{i=1}^n \alpha_i K(\cdot, s_i), \sum_{j=1}^m \beta_j K(\cdot, t_j) \right\rangle_{H_0} := \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \alpha_i \beta_j K(t_j, s_i), \quad \forall s_i, t_j \in E, m \geq 1, n \geq 1 \quad (3.79)$$

的意义下的完备化得到的 **Hilbert** 空间.

定理 3.21. E 上 Hilbert 空间 H 为 RKHS, 当且仅当对任意 $t \in E$, 点值泛函 $f \mapsto f(t)$ 连续.

例 3.18. 设 $E = \mathbb{Z}^+$, $H = \ell^2$, 令 $K(i, j) = \delta_{ij}$. 可以验证 $K(\cdot, \cdot)$ 是正定函数. 由于对任意正整数 j , 都有

- $K(\cdot, j) = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots)$ 为 ℓ^2 中第 j 位取 1 其它位取 0 的元素;
- 对任意 $x = (x_i) \in \ell^2$, $\langle x, K(\cdot, j) \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} x_i K(i, j) = x_j$.

$K(\cdot, \cdot)$ 为 ℓ^2 的再生核, ℓ^2 为再生核 Hilbert 空间.

例 3.19. 设 H 为 E 上函数组成的可分 Hilbert 空间, $\{e_1, e_2, \dots\}$ 为 H 的标准正交基, 定义

$$K(s, t) = \sum_{i=1}^{\infty} e_i(s) e_i(t), \quad \forall s, t \in E.$$

由于对任意的 $m \in \mathbb{Z}^+$, $(\lambda_1, \dots, \lambda_m) \in \mathbb{R}^m$ 以及 $(t_1, \dots, t_m) \in E^m$, 都有

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m [\lambda_i \lambda_j K(t_i, t_j)] &= \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \left[\lambda_i \lambda_j \sum_{k=1}^{\infty} e_k(t_i) e_k(t_j) \right] \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \left[\sum_{i=1}^m (\lambda_i e_k(t_i)) \sum_{j=1}^m (\lambda_j e_k(t_j)) \right] \geq 0, \end{aligned}$$

故 $K(\cdot, \cdot)$ 为 E 上的核. 又由于对任意 $t \in E$, 以及 H 中的元素 $\varphi(\cdot) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i e_i(\cdot)$, 都有

$$K(\cdot, t) = \sum_{i=1}^{\infty} e_i(t) e_i(\cdot) \in H$$

以及

$$\begin{aligned} \langle \varphi, K(\cdot, t) \rangle &= \left\langle \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i e_i(\cdot), \sum_{i=1}^{\infty} e_i(t) e_i(\cdot) \right\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_i e_j(t) \langle e_i, e_j \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i e_i(t) = \varphi(t), \end{aligned}$$

$K(\cdot, \cdot)$ 是再生核 Hilbert 空间 H 的再生核.

定理 3.22. 设 $K \in L_{\infty}(E^2)$ 为一个对称正定核, 定义积分算子

$$T_K : L_2(E) \mapsto L_2(E), \quad (T_K f)(t) := \int_E K(t, s) f(s) \mu(\mathrm{d}s).$$

如果算子 T_K 为正定的, 即对任意 $f \in L_2(E)$,

$$\int_{E^2} K(t, s) f(t) f(s) \mu(\mathrm{d}t) \mu(\mathrm{d}s) \geq 0$$

则 T_K 为紧的迹类算子, 设 $\{\lambda_j : i = 1, 2, \dots\}$ 为其从大到小依次排列的特征值, $\{\varphi_j : j = 1, 2, \dots\}$ 为相应的特征函数, 则 $(\lambda) \in \ell_1$, 且

$$K(t, s) = \sum_{j=1}^{N_H} \lambda_j \varphi_j(t) \varphi_j(s)$$

对几乎一切 t 和 s 成立. 其中, $N_H \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$, 当 $N_H = \infty$ 时, 上述级数一致收敛且绝对收敛.

定理 3.23 (Representer Theorem). 设 $P : [0, \infty) \mapsto \mathbb{R}$ 为单增函数, E 为非空集合, \mathcal{H} 为 E 上以 K 为再生核的 RKHS. $\{(x_i, y_i) : i = 1, \dots, n\}$ 为数据, $R_n(\cdot)$ 为一经验风险函数. 则最最小化惩罚风险

$$R_n(f) + P(\|f\|_{\mathcal{H}}) \quad (3.80)$$

的函数具有形式:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, x). \quad (3.81)$$

Proof. 任给 $f \in \mathcal{H}$, 将其分解为

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, x) + f_{\perp}(x),$$

其中 $f_{\perp}(\cdot) \perp \text{span}\{K(x_i, \cdot) : i = 1, 2, \dots, n\}$, 则

(1) 对任意 $x_j (j = 1, 2, \dots, n)$,

$$f(x_j) = \langle f(\cdot), K(x_j, \cdot) \rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, x_j) + \langle f_{\perp}(\cdot), K(x_j, \cdot) \rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, x_j),$$

即经验风险 $R_n(f)$ 与 f_{\perp} 无关.

(2) 由于 P 的单调性, 对任意 f ,

$$\begin{aligned} P(\|f\|_{\mathcal{H}}) &= \tilde{P}\left(\left\|\sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, \cdot)\right\|_{\mathcal{H}}^2 + \|f_{\perp}\|_{\mathcal{H}}^2\right) \\ &\geq \tilde{P}\left(\left\|\sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, \cdot)\right\|_{\mathcal{H}}^2\right) = P\left(\left\|\sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, \cdot)\right\|_{\mathcal{H}}\right). \end{aligned}$$

于是, 对任意给定的 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, 惩罚经验风险(3.80)在 $f_{\perp} = 0$ 处取得, 定理得证. \square

该表示定理的意义在于将无穷维空间的优化问题转化到有限维空间.

注 3.24. 上述定理很容易推广到半参数情形. 假定 $\{\varphi_i\}_{i=1}^p$ 为 p 个线性独立的已知函数, 在空间 $\{\tilde{f} = f + h : f \in \mathcal{H}, h \in \text{span}\{\varphi_1, \dots, \varphi_p\}\}$ 中极小化惩罚经验风险(3.80)的解具有如下形式:

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i K(x_i, x) + \sum_{j=1}^p \beta_j \varphi_j(x).$$

例 3.20. *content...*

3.6 习题

3.1 线性回归模型 $\mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \varepsilon$ 中, 假定 $\varepsilon \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{I})$, 证明

$$\mathbf{e} = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta} \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2(\mathbf{I} - \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top)).$$

3.2 (McCullagh, Nelder, 1989) 和 (Wei, 1998) 曾讨论过如下果蝇实验数据:

序号	x	y	序号	x	y
1	14.95	67.50	13	25.06	20.39
2	16.16	57.10	14	25.06	20.41
3	16.19	56.00	15	25.80	19.45
4	17.15	48.40	16	26.92	18.77
5	18.20	41.20	17	27.68	17.79
6	19.08	37.80	18	28.89	17.38
7	20.07	33.33	19	28.96	17.26
8	22.14	26.50	20	29.00	17.18
9	23.27	24.24	21	30.05	16.81
10	24.09	22.44	22	30.80	16.97
11	24.81	21.13	23	32.00	18.2
12	24.84	21.05			

其中, y_i 表示第 i 次实验过程中果蝇产卵时测得的胚胎期平均持续时间, x_i 表示第 i 次实验过程中保持不变的实验温度. 试根据这组数据分析 y 与 x 之间的关系.

3.3 利用回归分析法讨论因子设计中正交对照的估计和假设检验.

3.4 例3.9中的设计对于回归模型

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

还是一个正交设计吗? 此时, 该设计存在什么问题?

3.5 计算例3.12中设计 II、III 和 IV 的信息矩阵和标准化方差, 并比较这几个设计.

3.6 设对一个二元回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \varepsilon$$

有两个设计

$$\xi_1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}, \quad \xi_2 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 1 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

试比较这两个设计.

3.7 利用响应曲面法探求二元函数 (Haupt 函数)

$$y = x_1 \sin(4x_1) + 1.1 \cdot x_2 \sin(2x_2), \quad x_1, x_2 \in [0, 3.5],$$

的极值.

第四章 仿真实验设计与分析

本章目标:

- (1) 掌握仿真试验的基本概念与特点;
- (2) 了解计算机试验数据的近似建模 (Kriging 模型) ;
- (3) 了解计算机试验设计的常用方法;
- (4) 掌握均匀设计的概念, 能够使用均匀设计表安排试验.

4.1 引言

4.1.1 系统的不同试验类型

试验既是探求未知系统或过程、获取知识或规律的重要方法，也是开发研制新系统、改进生产过程、鉴定和评估产品不可或缺的手段。随着科学技术的发展，我们所面临的试验对象日益复杂，相应地使试验的层级、场地和方式都得到了大大的拓展。

- 从试验对象的层级上可以分为部件、分系统、系统以及体系等层级的试验；
- 从试验方式的角度可以分为数字仿真、半实物仿真、实物仿真和物理试验四种类型；
- 从试验的场地来分类，可以分成内场试验、外场试验和内外场联合试验三种类型。

当然，具体系统或过程的试验还有其特定的分类方法。

在试验设计领域，主要研究**物理试验** (physical experiments) 和**计算机试验** (computer experiments) 两类。物理试验是指直接通过可控的实物试验进行的观测，包括田间试验、临床试验和工业试验等在试验设计发展历程中有着重要地位的试验。计算机试验是在计算机上运行程序代码所做的仿真试验，也称为**数字仿真试验**。随着计算机的飞速发展，数字试验已经成为了一种经济而有效的试验方式。一些复杂、费钱又费时的试验通常都先在计算机上做充分的探索，然后以少量的物理试验来验证，如导弹、飞机等各种新型武器系统的性能试验，装备成体系的作战试验等；还有的被试对象受环境、政治等条件约束，无法开展实物试验，如核试验、两国之间的作战试验。当然，数字仿真试验也有其缺陷：一是前期仿真建模难度大，尤其是复杂系统的建模；二是仿真试验结果的可信度难以保证，缺乏令人信服的 VV&A 手段。

半实物仿真试验和实物仿真试验是介于物理试验和计算机试验中间的试验方式。**半实物仿真试验**中，系统的关键部位以及难以建立可信仿真模型的部位为实物，而其它组分则为数字仿真模型，这类试验又称虚实结合试验。**实物仿真试验**是指利用系统的实物模型进行的试验，如爆炸试验中的缩比试验、空气动力学中的风洞试验、飞行器的地面火箭橇试验以及战斗部毁伤试验（靶标为替代模型）等。实物仿真试验和物理试验之间不存在严格的区分，任何物理试验中都或多或少存在一些替代模型。因此也可以把系统的试验方式简单分为计算机仿真、半实物仿真和实物试验三类。

复杂试验的试验，需要以系统工程的思想，根据使命、能力、性能指标体系，自顶向下将试验进行分解，开展计算机仿真、半实物仿真、实物仿真和物理试验等不同类型的部件级、分系统级试验，最后再自底向上聚合，开展不同类型的系统级、体系级的验证试验。当然不同级别试验的主要试验方式有所不同。例如部件级试验主要采用物理试验，而系统级和体系级试验往往主要采用计算机仿真。下面看一个案例。

例 4.1. 导弹武器抗干扰试验是以检测和考核导弹武器抗干扰指标为目的的试验。根据国内外试验靶场的成熟经验，可以归纳出五种常用试验方式，即数字仿真和半实物仿真两种内场仿真试验，地面静态模拟、挂飞试验和飞行试验三种外场试验。

- (1) 数字仿真试验：在内场条件下，针对被试导弹、导引头的性能和目标、干扰及其环境特性参数，建立数学模型，形成虚拟对抗条件。其优点是试验消耗低，可大量重复试验；其缺点是建模难度大，置信度受到限制。
- (2) 半实物仿真试验：在内场条件下，导弹（主要是导引头单机）以飞行转台为平台，通过弹道仿真工作站建立导弹运动环境，在暗室条件下模拟形成目标、干扰和环境信号。其优点是为导引头提供了较好的导弹飞行环境，试验消耗低，重复性好；缺点是难于建立高置信度的目标、干扰和环境模型。
- (3) 地面静态模拟：在外场地面条件下，导弹（主要是导引头单机）以角转台为平台，采用实装或模拟实装方法形成目标与干扰环境，在关键对抗点上进行试验。其优点是为导弹（导引头）提供较好的角运动环境，试验消耗低，重复性好；缺点是不能直接得到导弹命中概率，逼真度依赖于试验设计。
- (4) 导弹挂飞试验：整个导弹武器系统（或导引头）以飞机或其他飞行器为运动平台，采用实装或模拟实装方法形成目标与干扰环境。其优点是为导弹武器系统（或导引头）提供了较为真实的环境，试验消耗较低，重复性较好；其缺点是不能直接得到导弹命中概率，逼真度依赖于平台特性。
- (5) 导弹飞行试验：整个导弹武器系统参加的全尺度试验，采用模拟实装方法形成目标与干扰环境。其优点是为导弹武器系统（或导引头）提供了真实工作环境，可直接得到导弹命中概率；其缺点是形成的目标与干扰环境较为单一，不宜设置复杂条件，试验消耗巨大，重复性最差。

其中，地面静态模拟和挂飞试验都是实物仿真试验，导弹飞行试验是物理实验。

本章所称的仿真试验包括计算机试验、半实物仿真和实物仿真三类，重点介绍计算机试验的设计与建模方法。计算机试验已成为系统工程的重要研究方法，学术界的研究非常活跃，这里简单列一些文献作为参考 [7, 6, 9, 15, 18, 20, 21, 25, 22, 28, 30, 29, 39]，读者可顺着这些文献查到大量关于计算机实验设计与分析的资料。

4.1.2 实验设计与分析在仿真中的地位

从以下三个角度来理解实验设计与分析在仿真中的地位。

实验设计与分析是仿真开发的重要环节之一。 仿真指根据研究目的，建立系统模型，并在模型上进行试验，从而更深入地认识系统并发现系统运行规律的过程。图4.1给出了仿真开发的基本过程，从中可以看出，试验设计与结果分析是仿真中的重要环节。尽管仿真试验大大降低了试验成本，使得大量试验成为可能，是一种高效的试验手段，它还是需要消耗时间和计算资源，科学的实验设计与分析方法能够有效提高仿真试验的效率。

实验设计与分析是解决模型验证问题的有效手段。 2016年3月14日，美军作战试验鉴定局局长迈克尔·吉尔莫向陆军试验鉴定司令部司令、海军作战试验鉴定部队司令、空军作

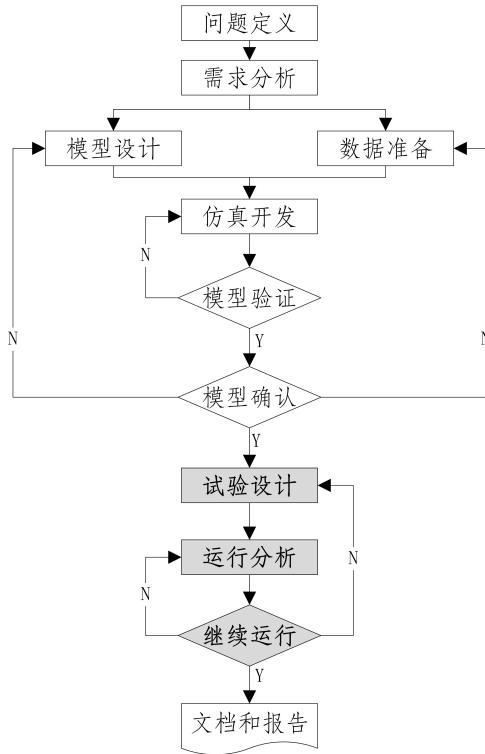


图 4.1: 仿真开发过程

战试验鉴定中心主任、海军陆战队作战试验鉴定部主任和联合互操作能力试验司令部司令，签发了一份题为《作战试验与实弹设计评估所用建模与仿真的验证指导》的备忘录，强调对于仿真数据和真实数据，不能仅靠视觉上的对比就确定两者“足够接近”，应该引入严谨的统计学和分析原理。具体地讲，就是将实验设计与分析的方法作为确定模型验证所需的数据、确定模型反映现实世界真实程度的手段和依据，对子系统、全系统、环境等每一个要素的建模与仿真进行充分的验证和统计分析，确保利用模型能完整呈现真实世界中的系统。

实验设计与分析是统筹数字仿真、半实物仿真、实物仿真和物理试验的方法。四类试验的可重复性依此降低，资源消耗逐次增加，试验结果的可信度依此增加。它们既需要互相验证，也需要信息融合。这就要求采用试验设计的方法，建立一体化的试验优化模型，统筹不同类型试验的占比，统筹不同类型试验的试验方案。

4.1.3 物理试验与计算机试验的区别

从响应变量来看，我们仍然只考虑单响应试验。尽管如此，计算机试验中有时会出现一些相关的输出 $y_1(\cdot), y_2(\cdot), \dots, y_m(\cdot)$ 。文献 [25] 把这种现象归纳为以下三种情况。

- (1) 高低精度试验并存。例如，采用有限元分析时，网格划分的密度不同会产生不同精度的

$y_i(\cdot)$, 低精度试验所需的运行时间较少, 试验设计需要统筹高低精度试验以达到更好的效率.

- (2) 相关信息. 例如, $y_1(\cdot)$ 是关心的响应变量, (y_2, \dots, y_m) 是 $y_1(\cdot)$ 的一阶偏导数.
- (3) 制约信息. 即 $y_1(\cdot)$ 与 (y_2, \dots, y_m) 之间是鱼和熊掌的关系. 因 y_1 是响应变量, 故这种情况下一般以 (y_2, \dots, y_m) 作为约束条件.

从试验因子来看. 此前我们从研究的角度把影响响应变量的因子分为试验因子和噪声因子两类. 试验因子, 指研究者感兴趣的可控因子, 根据其表现形式又可划分为如下三类:

- 定性因子, 分类变量, 不同取值之间没有量的关系, 但可能有序的关系;
- 定量因子, 取值为 \mathbb{R} 或其子集, 不同取值之间有量的关系;
- 函数型因子, 通常为时间或空间的函数, 本书没有讨论它们的处理方法.

通过试验设计的方法来确定试验因子的取值, 并利用方差分析和回归分析等方法来分析它们与响应变量之间的关系. 噪声因子是指除试验因子以外的所有因子, 可细分为如下三类:

- 不可控的随机因子, 采用重复试验的方法来降低其对响应的影响;
- 已知但不感兴趣的非随机因子, 采用区组技术来平衡其对响应的影响;
- 研究者未意识到的非随机因子, 采用随机化的技术来避免其造成系统性的偏差.

在仿真领域中习惯把因子称为变量或参数, 而称试验设计为参数规划. 为了全书的一致性, 我们还是称影响系统输出的变量为因子. 仿真程序是经过需求分析、模型设计、仿真开发等一系列规范程序得到的, 因而一般不存在研究者没有意识到的因子. 可见, 需要重新梳理和划分计算机试验中的因子. 采用文献 [25] 的方法, 把计算机试验中的因子划分为如下三类.

- (1) 控制因子 (control variables), 指可以由研究者设定的、用来控制系统或过程的变量, 也称为工程变量 (engineering variables) 或工厂变量 (manufacturing variables), 是可控因子的一种. 以 \mathbf{x}_c 表示由控制因子组成的向量.
- (2) 环境因子 (environmental variables), 指由被试系统所处的环境决定的因子, 以 \mathbf{x}_e 表示环境因子组成的向量. 物理试验中追求环境因子的可控制性和可重复性, 以研究系统在特定环境下的性能. 而在计算机试验中, 环境因子也可以人为设置, 此时采用随机变量对环境因子建模, 并分析其随机性对响应造成的影响.
- (3) 模型因子 (model variables), 指用于刻画数学模型不确定性的参数, 也称为调节参数 (turning parameters). 例如, 以 Poisson 分布对顾客到达时刻建模, Poisson 分布的参数就是模型因子. 模型因子一般需要通过物理试验获得的数据来估计, 因而在统计学中它就是模型参数 (model parameter).

控制因子、环境因子和模型因子共同构成计算机试验的输入, 我们统以 \mathbf{x} 表示之. 当然, 一个仿真系统中可能只包含这三类因子中的一类或者两类.

从试验目的来看. 除了与物理试验相同的目标:

- (1) 全局目标 (global goal) 是指在给出某一区域 $\mathcal{A} \subset \mathcal{X}$ 内 $y(\cdot)$ 的预测 $\hat{y}(\cdot)$, 其评价准则

可采用积分均方误差 (integrated square error)

$$\int_{\mathcal{A}} [\hat{y}(\mathbf{x}) - y(\mathbf{x})]^2 \omega(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$$

$\omega(\mathbf{x})$ 为权函数. 遗憾的是, 由于 $y(\mathbf{x})$ 未知, 上式不能直接计算, 类似的问题在前面我们已经有过涉及.

- (2) 局部目标 (local goal) 包括确定水平集 $\Gamma(y_0) = \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} : y(\mathbf{x}) \geq y_0\}$ 和极值点 $\arg \max\{y(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ 等.

还有一些新的目标. 如,

- (1) 当只存在环境因子时, 研究环境因子的随机性如何传递到响应变量的随机性, 此类问题被称为不确定性分析 (uncertainty analysis) 或不确定性量化 (uncertainty quantification).
- (2) 当只存在模型因子时, 通过计算机试验确认最佳的模型参数, 使仿真结果与真实结果接近. 这个过程称为模型校正 (model calibration), 它需要物理试验数据的支撑.
- (3) 如果同时包含控制因子和环境因子, 则给定 $\mathbf{x}_c, y(\mathbf{x}_c, \mathbf{x}_e)$ 为一个随机变量, 试验目的可能是估计随机过程 $y(\mathbf{x}_c, \mathbf{x}_e)$ 的均值函数,

$$\bar{y}(\mathbf{x}_c) := \mathbb{E}[y(\mathbf{x}_c, \mathbf{x}_e)],$$

其中, 期望是对环境因子 \mathbf{x}_e 取的, 或分为数函数

$$y^\alpha(\mathbf{x}_c) : \mathbb{P}\{y(\mathbf{x}_c, \mathbf{x}_e) \geq y^\alpha(\mathbf{x}_c)\} = \alpha,$$

其中, 概率是对随机变量 \mathbf{x}_e 求的. 不论是均值函数还是分为数函数, 都要求 \mathbf{x}_e 的分布已知, 否则需要一些细致的数学处理方法, 例如采用非参数的方法估计其分布等.

从响应模型来看. 首先, 仿真系统的输入与输出之间的关系一般无法通过一个解析形式来刻画, 因为如果存在解析形式则无需进行计算机仿真, 即响应模型是未知的; 其次, 环境因子的存在, 使得响应模型中仍然包括随机因素, 因而我们以模型(1.1)表示计算机试验的响应模型, 依然有其的合理性; 第三, 仿真系统响应模型的随机性是可控的, 是人为模拟的拟随机性, 因此在试验设计时还需考虑如何从给定的分布中抽取一定的样本来表示一个复杂分布; 第四, 可能存在多个相关的响应模型, 例如精度不同的计算机程序, 其响应模型有一定的相关性, 它们是真实系统响应关系的不同程度的近似.

综上所述, 与物理试验相比, 计算机试验具有以下两个特点:

- 仿真系统的可控性使得计算机试验中一般不考虑重复、区组和随机化的技术;
- 响应模型的复杂性使得我们不能用简单的方差分析模型和回归分析模型对其建模.

这些特点, 决定了计算机试验设计采用**空间填充设计** (space-filling design) 和**序贯设计** (sequential design); 试验数据建模时采用**代理模型** (surrogate model), 即用一个计算便捷的数学模型去“代理”复杂的仿真系统.

4.1.4 基于不确定性量化的试验设计

本节从不确定性量化的角度来给出试验设计的统一框架，与本章其它内容相关性不大，不感兴趣的读者可以略去。

任何没有完全或彻底了解的系统对我们来说都存在不确定性 (uncertainty)。什么是不确定性，很难从其内涵出发给出明确的定义。美国国家研究委员会 (NRC) 对不确定性的定义是：信息缺乏或不完整，定量不确定性分析试图分析和描述计算值与真实值之间的差异程度，描述方法有时候是概率分布；不确定性取决于数据的质量、数量和相关度，以及模型和假设的可靠性和相关性。(Armen Der Kiureghian, 2007) 把不确定性划分为以下两类。

- 认知不确定性 (Epistemic uncertainty): 也称为无知、表象不确定性和可约减不确定性，主要由于缺乏知识引起的。无知分为认识到的无知和没有认识到的无知，认识到的无知在决策时可以采取相应的手段来降低风险，而没有认识到的无知则可能造成严重后果。认知不确定性可通过试验探索不断降低，此即为可约减的含义。
- 随机不确定性 (Aleatory uncertainty): 也称为变异、内在不确定性、偶然不确定性和不可降低不确定性，主要由自然变异和随机性引起。如风速、风向、降雨量等。在相同的条件下重复试验若干次，随机不确定性使得每次试验结果都不相同，增加试验次数不能降低试验结果的变异，但可以更加准确地给出变异的概率分布。

随机不确定性和认知不确定性之间没有严格的界限。如果有新的知识出现，使得我们可以更加深入地解释某一情况或现象，那么与之相应的随机不确定性就降低了。因此，有的观点认为，归根结底所有不确定性都是认知方面的。当然，混沌现象以及量子力学的出现，已经推翻了这种决定论。

那么，不确定性与随机性之间又有什么区别呢？以上划分中，我们把随机性当作不确定性的一种；但在处理方法上，也以概率论的工具来刻画认知不确定性，此即贝叶斯学派中所谓的主观概率 (subjective probability)。

回顾响应模型(1.1)，我们认为，抽象的未知参数 s 包含所有认知不确定性，而 ω 则包含所有随机不确定性。有时可将响应模型分解为

$$y = F(x_1, \dots, x_k, x_{k+1}(\omega), \dots, x_p(\omega), s),$$

其中， x_1, \dots, x_k 为非随机的因子，而 $x_{k+1}(\omega), \dots, x_p(\omega)$ 为随机因子，抽象参数 s 中即包含了 F 的不确定性，也包含了随机变量 $x_{k+1}(\omega), \dots, x_p(\omega)$ 的分布中的不确定性。 s 的不确定性也通过概率分布来刻画，即虽然 s 不是随机变量，但把它当作随机变量处理。通过试验可以降低 s 的不确定性，但不能降低随机变量的不确定性。

通过实物试验和仿真试验量化系统的不确定性，包含以下要素。

- (1) **真实系统:** $y^0(\mathbf{x})$. 其中，系统的输入 \mathbf{x} 中可能包含随时间演化的分量，以体现系统的动态特性； \mathbf{x} 中也可能包含一些不可控的随机分量，当然，从试验设计的角度来说，我们会尽量避免这种情况的出现。

- (2) **仿真模型:** $y^j(\mathbf{x}, \mathbf{u}^j)$, $j = 1, 2, \dots, k$. 其中, \mathbf{x} 表示与真实系统相同的输入向量, \mathbf{u}^j 表示第 j 个模型中除 \mathbf{x} 以外的模型因子; k 个仿真模型中可能包含不同尺度的数字仿真、半实物仿真和物理仿真; 假定这 k 个仿真模型的可信度排序是已知的, 且随着 j 的增加, 模型的可信度和试验的消耗(时间、人力、物力)都逐渐降低.
- (3) **模型偏差 (discrepancy):** $b^j(\mathbf{x}) := y^0(\mathbf{x}) - y^j(\mathbf{x}, \mathbf{u}_0^j)$. 其中, \mathbf{u}_0^j 为使得 $y^0(\mathbf{x}) - y^j(\mathbf{x}, \mathbf{u}^j)$ 在某种意义上达到最小的 \mathbf{u}^j . 受认知所限, 仿真模型不可能完全与真实系统的输出一致. 寻找 \mathbf{u}_0^j 使得第 j 个模型与真实系统之间偏差达到最小, 这个过程就是模型校正.
- (4) **先验分布:** 包括 $y^j(\mathbf{x}, \mathbf{u}^j)$, $b^j(\mathbf{x})$, \mathbf{x} 中不可控的部分以及诸校正参数 \mathbf{u}^j 的先验分布模型.
- (5) **试验设计:** 包括真实系统试验方案 $\xi^0 = \{\mathbf{x}_i^0 : i = 1, 2, \dots, n_0\}$ 和仿真模型的试验方案 $\xi^j = \{(\mathbf{x}_i^j, \mathbf{u}_i^j) : i = 1, 2, \dots, n_j\}$. 为了校正模型偏差, 一般要求 ξ^j 之间有嵌套关系, 即设计 ξ^{j-1} 中的点 \mathbf{x}_i^{j-1} 也是设计 ξ^j 的支撑点; 为了获得较好的全局预测精度, 还要求诸 \mathbf{x}_i^j 合理地散步在整个空间. 对于可视作随机变量的因子, 其设计就是从它所服从的分布中抽样.
- (6) **试验数据:** 包括来自真实系统的数据 $\{(\mathbf{x}_i^0, y_i^0) : y_i^0 = y^0(\mathbf{x}_i^0) + \varepsilon_i^0, i = 1, 2, \dots, n_0\}$ 和来自模型的数据 $\{(\mathbf{x}_i^j, \mathbf{u}_i^j, y_i^j) : y_i^j = y^j(\mathbf{x}_i^j, \mathbf{u}_i^j) + \varepsilon_i^j, i = 1, 2, \dots, n_j\}$, ε_i^j 表示随机误差. 需要指出的是, 有些仿真实验是不存在随机误差的, 如计算机仿真.
- (7) **数据分析:** 基于真实数据和模型数据, 采用贝叶斯理论, 给出试验空间中任意点 \mathbf{x} 处的响应值 $y(\mathbf{x})$ 的后验分布.

试验设计和数据分析的基本原则是:

- 利用高精度数据逐次校正低精度数据;
- 通过建立高低精度试验之间的补偿模型, 将高低精度试验数据融合分析.

再这以过程中, 贝叶斯理论发挥这关键的作用. 1.4.3节中已经简单介绍过贝叶斯方法, 这里再作解释.

在概率论与数理统计中我们已经学过事件形式的贝叶斯公式:

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)},$$

其中 $P(A)$ 和 $P(B)$ 分别表示事件 A 和 B 的概率, 而 $P(A|B)$ 和 $P(B|A)$ 则分别表示 B 发生的条件下事件 A 的概率和 A 发生条件下事件 B 的概率. 贝叶斯学派们把 $P(A)$ 看作事件 A 的先验概率, 而把 $P(A|B)$ 看作事件 B 发生后的后验概率. 如果

- (1) 事件 A 是参数空间 \mathcal{S} 中某个可测(即可以定义概率的)子集 A ;
- (2) 事件 B 是样本 \mathcal{D}_n , $p_s(\mathcal{D}_n)$ 为给定参数 s 后样本 \mathcal{D}_n 的条件概率密度函数.

则先验分布 $\Pi(\cdot)$ 为 \mathcal{S} 上的概率测度, 且在一定的条件下有贝叶斯公式

$$\Pi(A|\mathcal{D}_n) = \frac{\int_A p_s(\mathcal{D}_n)\Pi(\mathrm{d}s)}{\int_{\mathcal{S}} p_s(\mathcal{D}_n)\Pi(\mathrm{d}s)},$$

称 $\Pi(\cdot|\mathcal{D}_n)$ 为参数 s 的后验分布. 特别地, 如果先验分布 $\Pi(\cdot)$ 有密度函数 $\pi(s)$, 则后验分布的密度函数为

$$\pi(s|\mathcal{D}_n) = \frac{p_s(\mathcal{D}_n)\pi(s)}{\int_S p_s(\mathcal{D}_n)\pi(s) ds}.$$

形象地说, 参数的后验概率密度正比于数据的似然函数与参数的先验密度函数的乘积, 分母 $\int_S p_s(\mathcal{D}_n)\pi(s) ds$ 是归一化因子.

以上三个式子都是贝叶斯公式, 它给出了未知量 s 的后验概率分布, 我们认为后验概率分布已经完整地刻画了参数的不确定性. 此外, 贝叶斯公式是利用数据和先验分布得到后验分布, 先验分布是试验前参数的不确定性, 而数据就是试验得到的经验, 因而贝叶斯公式很好地刻画了从经验中获取知识的过程. 尽管如此, 应用贝叶斯公式还存在以下两个难点:

- (1) 实际问题中参数空间 s 和数据 \mathcal{D}_n 可能很难数学刻画, 它们或是离散的或是无穷维的, 先验概率和似然函数 $p_s(\mathcal{D}_n)$ 都很难建模, 使得理论上给出贝叶斯公式存在困难;
- (2) 模型偏差 $b^j(\mathbf{x}, \mathbf{u}^j)$ 很可能就是无穷维的, \mathbf{x} 中与时间有关的分量 $x_i(t)$ 也是无穷维的, 使得后验分布的计算很成问题. 也就是说, 绝大部分量的分布都不是本书中提到的正态分布、 t -分布、 χ^2 -分布或 F 分布所能刻画的.

最后作一个小结: 从贝叶斯学派的观点来看, 构造合适的参数空间来表示未知的知识(或未知系统的规律), 利用参数空间上的先验分布来刻画试验前我们对知识(或规律)的认知状态, 设计试验并实施试验采集数据, 利用似然函数(即统计模型)将数据与知识(或规律)关联在一起, 利用贝叶斯公式计算未知参数的后验分布, 作为试验后对知识(或规律)的新的认知. 如此使得随着资源的不断投入, 关于未知知识(或规律)的不确定性逐渐降低, 未知逐渐转变为已知. 实验设计与分析的意义就在于加速这一不确定性下降的过程.

4.2 Gaussian Kriging 模型

Kriging 方法最早由南非地理学家 D. G. Krige 在其硕士学位论文 (1951) 中建立, 随后得到其他学者的发展. 其中, Matheron (1963) 建立高斯 Kriging 方法, 用来分析空间数据; Sacks 等于 1989 年首次将 Kriging 方法引入计算机试验 [22].

Kriging 模型是一种空间相关模型, 空间相关模型的一般形式为(3.1)式. 我们把 Kriging 模型定义为空间相关模型中的可参数化的模型:

$$y(\mathbf{x}, \omega) = f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}) + \varepsilon(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}, \omega) \quad (4.1)$$

其中, $f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta})$ 为形式已知的均值函数, 它表示响应函数的整体趋势, $\boldsymbol{\beta}$ 为未知的参数向量; $\varepsilon(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}, \omega)$ 为零均值的随机过程, 它刻画不同点处响应值之间的相关性, $\boldsymbol{\theta}$ 表示它的分布中的未知参数向量; ω 表示模型中的随机性. 一般地, 如果先验信息比较充分, 则均值函数与真实响应函数比较接近, 均值函数形式比较复杂而相关函数比较简单; 如果先验信息不够, 则可采用简单的均值函数和较复杂的相关函数来建模. 我们假定均值函数

$$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\beta}) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\boldsymbol{\beta}$$

为线性的, 此时称(4.1)式为全局 Kriging 模型 (universal Kriging model). 特别地, 当均值函数为常数 μ 时, 称(4.1)式为普通 Kriging 模型 (ordinary Kriging model).

在计算机试验的建模中, 应用最广泛的 Gaussian Kriging 模型是指误差过程 $\varepsilon(\mathbf{x})$ 为 Gauss 过程的 Kriging 模型. 本节首先简单介绍 Gauss 过程的基本概念, 而后分两小节介绍 Gaussian Kriging 模型的参数估计和预测, 最后从贝叶斯学派的角度简单解释 Gaussian Kriging 方法.

4.2.1 Gauss 过程简介

称 $\{y(\mathbf{x}, \omega) : \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ 为一个随机过程 (stochastic process) 或随机场 (stochastic field), 如果对任意 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, $y(\mathbf{x}, \cdot)$ 都是一个随机变量. 称 $m(\mathbf{x}) := \mathbb{E}[y(\mathbf{x}, \omega)]$ 为随机过程 $\{y(\mathbf{x}, \omega) : \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ 的均值函数 (mean function), 称 $C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) := \text{Cov}(y(\mathbf{x}_1, \omega), y(\mathbf{x}_2, \omega))$ 为随机过程 $\{y(\mathbf{x}, \omega) : \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ 的方差核 (covariance kernel).

准确地来说, 随机过程是一个二元函数 $y(\cdot, \cdot) : \mathcal{X} \times \Omega \mapsto \mathbb{R}$,

- 给定 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$, $y(\mathbf{x}, \cdot)$ 是定义在概率空间 $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ 上的随机变量;
- 给定 $\omega \in \Omega$, $y(\cdot, \omega)$ 是定义在集合 \mathcal{X} 上的函数, 它是随机过程的一个样本, 我们称它为样本轨道.

记 $\mathbb{R}^{\mathcal{X}}$ 为 $\mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$ 的映射的全体组成的集合, 我们常常需要把随机过程 $y(\mathbf{x}, \omega)$ 看作概率空间 $(\Omega, \mathcal{A}, \mu)$ 到集合 $\mathbb{R}^{\mathcal{X}}$ 的映射. 当然, 这个映射的值域一般只是 $\mathbb{R}^{\mathcal{X}}$ 的某子集 A , 而且我们也希望只是它的某个子集. 例如, 当已知响应关系连续时, 以随机过程 $y(\mathbf{x}, \omega)$ 来

对响应关系建模, 我们希望 A 是 \mathcal{X} 上连续函数组成的集合. 称随机过程 y 为 **强平稳的** (strongly stationary), 如果对任意 $\mathbf{h} \in \mathcal{X}$, $n \geq 1$, 以及 \mathcal{X} 中的 n 个点 $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, 随机向量 $(y(\mathbf{x}_1 + \mathbf{h}, \omega), \dots, y(\mathbf{x}_n + \mathbf{h}, \omega))$ 与 $(y(\mathbf{x}_1, \omega), \dots, y(\mathbf{x}_n, \omega))$ 同分布. 特别地, 强平稳过程的均值函数为常数, 方差核具有如下形式:

$$C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = C(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2).$$

注意, 以上定义中要求 $\mathbf{x}_1 + \mathbf{h} \in \mathcal{X}$, 我们可以直接理解为 $\mathcal{X} = \mathbb{R}^d$. 为简介起见, 以下我们将略去随机过程中的 ω , 直接记为 $y(\mathbf{x})$.

定义 4.1. 称随机过程 $\{\varepsilon(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ 为 **Gauss 过程**, 如果对任意 $n > 0$ 以及 \mathcal{X} 中的 n 个点 $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, $\{\varepsilon(\mathbf{x}_1), \dots, \varepsilon(\mathbf{x}_n)\}$ 为 n 维 Gauss 随机向量.

Gauss 过程由其均值函数和方差核唯一确定, 因此在利用 Gauss 过程对响应关系建模时, 如何将先验信息转化到均值函数和方差核上去, 是一个重要的课题. 称 Gauss 过程 $\{\varepsilon(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ 为 **非奇异的**, 如果对任意对任意 $n > 0$ 以及 \mathcal{X} 中的 n 个点 $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, $\{\varepsilon(\mathbf{x}_1), \dots, \varepsilon(\mathbf{x}_n)\}$ 的协方差矩阵非奇异. 非奇异假设使得计算条件分布 $P(\varepsilon(\mathbf{x}) | \varepsilon(\mathbf{x}_1), \dots, \varepsilon(\mathbf{x}_n))$ 及其方便.

利用 Gauss 过程对噪声进行建模时, 通常假定其均值函数为 0, 于是建模就是要选择合适的方差核, 方差核控制着 Gauss 过程样本轨道的性质. 理论上, 任何一个正定函数 $C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 都可以作为方差核.

由平稳性的定义可知, 平稳 Gauss 过程的均值函数恒等于 0, 其方差核为 $\mathbf{h} := \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ 的函数. 以下两类满足平稳性的方差核:

$$C(\mathbf{h}) = \begin{cases} \sigma^2, & \mathbf{h} = \mathbf{0}; \\ 0, & \mathbf{h} \neq \mathbf{0}. \end{cases} \quad C(\mathbf{h}) = \sigma^2 \exp \left\{ - \sum_{j=1}^p \alpha_j |h_j|^2 \right\}.$$

我们知道, 平稳 Gauss 过程在任意点 \mathbf{x} 处的方差均为 $C(\mathbf{0})$. 为方便起见, 以 σ^2 表示 $C(\mathbf{0})$, 并将 $C(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 分解为 $\sigma^2 R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 的形式. 根据相关系数的定义,

$$\text{Cor}(y(\mathbf{x}_1), y(\mathbf{x}_2)) = \frac{\text{Cov}(y(\mathbf{x}_1), y(\mathbf{x}_2))}{\sqrt{\text{Var}[y(\mathbf{x}_1)]} \sqrt{\text{Var}[y(\mathbf{x}_2)]}} = R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$$

因而称 $R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 为 Gauss 过程 $\{y(\mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \mathcal{X}\}$ 的**相关函数** (correlation function). 对于平稳过程的方差核, 一般还要求当 $\mathbf{h} \rightarrow \infty$ 时, $C(\mathbf{h}) \rightarrow 0$, 即当两个点之间的距离趋于无穷时, 它们之间的相关系数趋于 0. 这一性质是利用离散数据对 Gauss 过程进行统计推断的基础, 以上两个方差核均满足这一性质.

进一步, 称平稳 Guass 过程为**各向同性的** (isotropic), 如果它的相关函数 $R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 仅与点 \mathbf{x}_1 和 \mathbf{x}_2 之间的距离 $\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|_2$ 有关. 线性相关函数

$$R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 1 - \frac{1}{a} \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|_2, \quad a \in \left(\frac{1}{2}, \infty \right)$$

就是各向同性的. 各向同性的 Gauss 过程的样本轨道在不同维上“光滑程度相同”，一般不能用来代理复杂系统的输入输出关系. 对于不同维数光滑程度不同的输入输出关系，通常假定相关函数具有形式

$$R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \prod_{i=1}^p R(x_{1i}, x_{2i}),$$

如幂指数相关函数

$$R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \prod_{i=1}^p \exp \left\{ - \left| \frac{x_{1i} - x_{2i}}{a_i} \right|^{\alpha_i} \right\}, \quad a_i \in (0, \infty), \quad \alpha_i \in (0, 2].$$

其中，尺度参数 a_i 控制着相关性随距离衰减的速度，光滑参数 α_i 控制着过程的几何性质. 当 $\alpha_i \equiv 2$ 时，称幂指数相关函数为 Gauss 相关函数. 由 Gauss 相关函数得到的样本轨道比较光滑，存在任意阶导数.

讨论 Gauss 过程样本轨道的光滑性 (smoothness) 与其方差核之间的关系，需要较强的概率论基础的支撑，可参考 [2] 等专著. 为简单起见，我们只讨论零均值平稳 Gauss 过程的相关函数与其样本轨道的光滑性. 以 Q 表示描述定义在 \mathcal{X} 上的函数的某一性质，如连续性，我们想知道 Gauss 过程 $y(\mathbf{x})$ 的样本轨道是否都满足这一性质. 在概率论中，一般不要求所有的样本轨道都满足这一性质，而只要求“几乎所有”样本轨道都满足这一性质，即

$$\mu \{ \omega : y(\cdot, \omega) \text{ 具有性质 } Q \} = 1,$$

并以“a.e.” (almost surely) 表示这种现象.

4.2.2 相关函数已知的情形

考虑 Gaussian Kriging 模型，假定相关函数 $R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 已知. 此时，模型(4.1)中的未知参数仅包括 β 和 σ^2 . 设有 n 组试验数据 $\{(\mathbf{x}_k, y(\mathbf{x}_k)) : k = 1, 2, \dots, n\}$ ，将它们写成矩阵形式：

$$\begin{cases} \mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \varepsilon, \\ \varepsilon \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{C}), \end{cases} \quad (4.2)$$

其中， $\mathbf{y} = [y(\mathbf{x}_1), y(\mathbf{x}_2), \dots, y(\mathbf{x}_n)]^T$ ，

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{x}_1) & f_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & f_m(\mathbf{x}_1) \\ f_1(\mathbf{x}_2) & f_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & f_m(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(\mathbf{x}_n) & f_2(\mathbf{x}_n) & \cdots & f_m(\mathbf{x}_n) \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \cdots & R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ R(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & R(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) & \cdots & R(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ R(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & R(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2) & \cdots & R(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n) \end{bmatrix}.$$

根据3.1.1节的结论, 参数 β 和 σ^2 的最大似然估计为:

$$\begin{cases} \hat{\beta} = (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{y}, \\ \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta})^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta}). \end{cases} \quad (4.3)$$

得到参数的估计后, 如何预测任意点 $\mathbf{x} \in \mathcal{X}$ 处的响应值 $\hat{y}(\mathbf{x})$ 呢? 注意到

$$\begin{bmatrix} \mathbf{y}(\mathbf{x}) \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} \sim N \left(\begin{bmatrix} \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\beta \\ \mathbf{X}\beta \end{bmatrix}, \sigma^2 \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{r}^T(\mathbf{x}) \\ \mathbf{r}(\mathbf{x}) & \mathbf{C} \end{bmatrix} \right)$$

其中

$$\mathbf{r}(\mathbf{x}) = [R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}), \dots, R(\mathbf{x}_n, \mathbf{x})]^T$$

表示设计的试验点与 \mathbf{x} 之间的相关向量. 利用引理1.2的结论,

$$y(\mathbf{x}) | \mathbf{y} \sim N \left(\mathbf{f}^T(\mathbf{x})\beta + \mathbf{r}^T(\mathbf{x})\mathbf{C}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta), \sigma^2 - \sigma^2 \mathbf{r}^T(\mathbf{x})\mathbf{C}^{-1}\mathbf{r}(\mathbf{x}) \right)$$

以 $y(\mathbf{x})$ 的条件分布的均值作为给定数据 \mathbf{y} 条件下它的预测, 并以 $\hat{\beta}$ 代替 β , 得到

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\hat{\beta} + \mathbf{r}^T(\mathbf{x})\mathbf{C}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta}), \quad (4.4)$$

$\mathbf{r}^T(\mathbf{x})\mathbf{C}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta})$ 可理解为对回归模型 $\mathbf{f}^T(\mathbf{x})\hat{\beta}$ 的残差的插值. 因此, 预测值可看作是模型加权最小二乘估计与残差插值修正的和.

利用 $\hat{\beta} = \beta + (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \varepsilon$, 可得

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\beta + \left\{ \mathbf{f}^T(\mathbf{x})(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T + \mathbf{r}^T(\mathbf{x}) [\mathbf{I} - \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T] \right\} \mathbf{C}^{-1} \varepsilon,$$

故 $\hat{y}(\mathbf{x})$ 服从均值为 $\mathbf{f}^T(\mathbf{x})\beta$, 方差为

$$\sigma^2 \mathbf{f}^T(\mathbf{x})(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \sigma^2 \mathbf{r}^T(\mathbf{x}) [\mathbf{C}^{-1} - \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1}] \mathbf{r}(\mathbf{x})$$

的正态分布. 其均方误差

$$\begin{aligned} \text{MSE}(\hat{y}(\mathbf{x})) &= \mathbb{E} [\hat{y}(\mathbf{x}) - y(\mathbf{x})]^2 \\ &= \sigma^2 \left\{ 1 - \mathbf{r}^T(\mathbf{x})\mathbf{C}^{-1}\mathbf{r}(\mathbf{x}) + [\mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{r}(\mathbf{x})]^T (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{X})^{-1} [\mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{r}(\mathbf{x})] \right\} \end{aligned} \quad (4.5)$$

上式中, $\mathbf{r}^T(\mathbf{x})\mathbf{C}^{-1}\mathbf{r}(\mathbf{x})$ 指由于 \mathbf{x} 与现有采样点之间相关性导致的预测方差的减少, 最后一项可理解为模型的不确定性. 由此可见, Kriging 模型不但能给出任意点预测值得显式表达, 还能给出度量预测值不确定性的均方误差的显式表达.

例 4.2. 考虑一种特殊的情况

$$y(\mathbf{x}) = \beta_0 + \varepsilon(\mathbf{x}),$$

此时, 广义设计矩阵 $\mathbf{X} = [1, 1, \dots, 1]^T = \mathbf{1}_n$. 于是参数的极大似然估计为

$$\begin{cases} \hat{\beta}_0 = (\mathbf{1}_n^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{1}_n)^{-1} \mathbf{1}_n^T \mathbf{C}^{-1} \mathbf{y}, \\ \hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} (\mathbf{y} - \mathbf{1}_n \hat{\beta}_n)^T \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{1}_n \hat{\beta}_0). \end{cases}$$

\mathbf{x} 处的预测值为

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \hat{\beta}_0 + \mathbf{r}^T(\mathbf{x}) \mathbf{C}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{1}_n \hat{\beta}_0).$$

4.2.3 相关函数包含参数的情形

如果相关函数为 $R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \boldsymbol{\theta})$, 模型(4.1)中的未知参数包括 σ^2 , $\boldsymbol{\beta}$ 和 $\boldsymbol{\theta}$. 设有 n 组试验数据 $\{(\mathbf{x}_k, y(\mathbf{x}_k)) : k = 1, 2, \dots, n\}$, 将它们写成矩阵形式:

$$\begin{cases} \mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \varepsilon, \\ \varepsilon \sim N(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{C}(\boldsymbol{\theta})), \end{cases} \quad (4.6)$$

其中

$$\mathbf{C}(\boldsymbol{\theta}) = \begin{bmatrix} R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1; \boldsymbol{\theta}) & R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2; \boldsymbol{\theta}) & \cdots & R(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n; \boldsymbol{\theta}) \\ R(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1; \boldsymbol{\theta}) & R(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2; \boldsymbol{\theta}) & \cdots & R(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n; \boldsymbol{\theta}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ R(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1; \boldsymbol{\theta}) & R(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2; \boldsymbol{\theta}) & \cdots & R(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n; \boldsymbol{\theta}) \end{bmatrix}.$$

数据 \mathbf{y} 似然函数为

$$(2\pi\sigma^2)^{-n/2} |\mathbf{C}(\boldsymbol{\theta})|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma^2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{C}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}) \right\},$$

故丢掉一些常数后, 参数的对数似然函数为

$$\ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta}) = -\frac{n}{2} \log(\sigma^2) - \frac{1}{2} \log |\mathbf{C}(\boldsymbol{\theta})| - \frac{1}{2\sigma^2} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^T \mathbf{C}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}).$$

使 $\ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta})$ 极大, 得到参数 $(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta})$ 的极大似然估计. 然而, 在实际问题中, 矩阵 $\mathbf{C}(\boldsymbol{\theta})$ 的条件数过大或者 σ^2 过小, 都会使得同时对 $(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta})$ 求极值不稳定. 此外, 参数 $\boldsymbol{\beta}$ 和 $\boldsymbol{\theta}$ 在模型中扮演着不同的角色, $\boldsymbol{\beta}$ 控制着模型的整体趋势, 而 $\boldsymbol{\theta}$ 则控制着模型的光滑程度. 因此我们希望能够分别估计它们.

注意到

$$\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \sigma^2} = -\frac{1}{\sigma^4} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}),$$

$$\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\theta}} = \frac{1}{2\sigma^2} \mathbf{X}^T \frac{\partial \mathbf{C}^{-1}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}),$$

利用 $\mathbb{E}\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$, 可知

$$\mathbb{E} \left\{ \frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \sigma^2} \right\} = \mathbf{0}, \quad \mathbb{E} \left\{ \frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\theta}} \right\} = \mathbf{0},$$

表明 Fisher 信息矩阵

$$\mathbb{E} \left\{ \frac{\partial^2 \ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial (\sigma^2, \boldsymbol{\theta})} \right\}$$

是分块对角矩阵, 因而 $\boldsymbol{\beta}$ 与 $(\sigma^2, \boldsymbol{\theta})$ 的极大似然估计渐近无关. 这使得我们可以采用迭代算法分别估计 $\boldsymbol{\beta}$ 和 $(\sigma^2, \boldsymbol{\theta})$, 步骤如下.

Step 1: 将 $\boldsymbol{\beta}$ 的初值设定为普通最小二乘估计 $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X} \mathbf{y}$;

Step 2: 给定 $\boldsymbol{\beta}$, 利用

$$\hat{\sigma}^2 = n^{-1} \left(\mathbf{y} - \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}} \right)^T \mathbf{C}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) \left(\mathbf{y} - \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}} \right),$$

通过求解方程

$$\frac{\partial \ell(\boldsymbol{\beta}, \sigma^2, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \mathbf{0}$$

更新 $(\sigma^2, \boldsymbol{\theta})$, 求解方程时需要用到迭代算法;

Step 3: 给定 $\boldsymbol{\theta}$, 利用

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{C}^{-1}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{y},$$

更新 $\boldsymbol{\beta}$;

Step 4: 迭代 Step 2 和 Step 3, 直到收敛.

仍可以利用(4.4)式进行预测, 且其均方误差依然为(4.5)式, 矩阵 $\mathbf{C}(\boldsymbol{\theta})$ 和向量 $\mathbf{r}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta})$ 中的参数均以 $\boldsymbol{\theta}$ 的估计替代即可.

例 4.3. content...

4.3 空间填充设计

设试验中考查 p 个定量因子 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p)^T$ 对响应 y 的影响, 以(3.1)式表示响应关系. 以 \mathcal{X} 表示试验区域, 为简单起见, 假定 $\mathcal{X} = [0, 1]^p$ 为一标准的立方体; 以 $\xi_n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 表示包含 n 个点的试验设计, 以

$$\mathbf{D}_{\xi_n} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{np} \end{bmatrix}$$

表示它的设计矩阵. 第二章和第三章中假定响应模型的形式已知, 通过试验来估计模型中的一些未知参数. 例如, 因子设计是要估计因素的主效应、它们之间的(部分)交互效应以及随机误差的方差 σ^2 ; 回归设计则是要估计回归模型中的参数, 包括回归系数和随机误差的方差 σ^2 . 响应模型形式已知的情况下, 最优回归设计是效率最高的. 与第三章不同, 本章中响应模型 f 是未知的, 因此要求试验设计对模型具备一定的稳健性. 稳健性与效率之间需要作均衡选择 (trade-off).

假定试验的目的是估计 $f(\mathbf{x})$ 在 $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^p$ 上的均值

$$\mu = \mathbb{E}[f(\mathbf{x})] = \int_{\mathcal{X}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad (4.7)$$

称(4.7)为总均值模型. 设设计为 $\xi_n = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n\}$, 一个自然的想法是用试验点处响应值的均值

$$\hat{\mu} = \bar{y}(\xi_n) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$$

来估计 μ , 式中 $y_i = f(\mathbf{x}_i)$. 以提高估计量 $\hat{\mu}$ 的精度为目的产生了一系列空间填充设计方法. 按对 \mathbf{x} 的看法, 可分为**基于抽样的设计**、**基于准则的确定性设计**以及**随机和确定性混合的方法**三类.

4.3.1 超拉丁方抽样

基于抽样的设计把 \mathbf{x} 看作随机向量, 把设计视为 \mathcal{X} 上某一个分布的样本, 希望 $\hat{\mu}$ 是 μ 的无偏估计或渐近无偏估计, 且其方差越小越好. 基于抽样的设计包括**简单随机抽样** (simple random design, SRD) 和**分层随机抽样** 两类.

简单随机抽样从 \mathcal{X} 上的均匀分布 $U(\mathcal{X})$ 中抽取试验点, 大数定律保证了由此得到的 $\hat{\mu}$ 是 μ 的无偏估计, 方差为 $\text{Var}(y(\mathbf{x}))/n$, 其中 $\mathbf{x} \sim U(\mathcal{X})$. 该方法简单可行, 但表现不够稳定, 即抽取的样本在 \mathcal{X} 上的分布并不十分均匀, 使得 $\hat{\mu}$ 的方差不够小. 为了减少估计方差, 统计学家们提出了一些改进方法, 如超拉丁方抽样、随机化正交阵列和正交超拉丁方设计等.

超拉丁方抽样

注意到当试验点之间有负相关时, 方差 $\text{Var}(y(\mathbf{x}))/n$ 可以减少. 基于这种思想, (Mckay et al., 1979) 提出了**超拉丁方抽样** (Latin hypercube sampling). 它采用两步随机化, 可以给出总体均值的无偏估计, 且渐近方差比简单随机抽样要小.

超拉丁方抽样是基于拉丁方设计的一种分层随机抽样方法. 给定试验次数 n 和因子个数 p , 超拉丁方的构造过程如下:

- Step (1) 取 p 个独立的 $\{1, \dots, n\}$ 的随机置换 $\pi_j(1), \dots, \pi_j(n), j = 1, \dots, p$, 将它们作为列向量组成一个 $n \times p$ 矩阵, 记为 $\text{LHD}(n, p)$, 它的第 i 行 j 列的元素记为 $\pi_j(i)$;
- Step (2) 取 $[0, 1]$ 上的 np 个均匀分布的独立抽样, $u_{ij} \sim U(0, 1), i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, p$.
令 $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, \dots, x_{ip})^T$, 其中

$$x_{ij} = \frac{\pi_j(i) - u_{ij}}{n}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, p. \quad (4.8)$$

则设计 $\xi_n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 为一个超拉丁方设计, 并记作 $\text{LHS}(n, p)$.

第一步是为了保证在 n^p 个方格中随机选取 n 个方格, 使得任意一行和任一列都仅有一个方格被选中; 而第二步中再选随机数的目的是使得超拉丁方抽样能够取遍整个试验区域. 为了降低计算复杂度, 一些学者建议取消第二步中 u_{ij} 的随机性, 把 LHS 定义为格结构:

$$x_{ij} = \frac{\pi_j(i) - 0.5}{n}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, p.$$

即把试验点 \mathbf{x}_i 取到小方块的中心. 这样得到的 LHS 称为**中点超拉丁方抽样** (midpoint Latin hypercube sampling, MLHS), 并记为 $\text{MLHS}(n, p)$.

超拉丁方抽样可以避免简单随机抽样最坏的情形, 其样本均值的方差也已证明比简单随机抽样小 (Stein 1987, Owen 1992). 然而, 超拉丁方设计依然会出现比较极端的情形, 如所有试验点都在对角线上. 如果 p 太大而 n 太小, 由超拉丁方抽样的到的试验点在整个试验区域内过于稀疏, 导致由所得试验数据建立的 Kriging 模型无法准确刻画响应关系, 因此有学者提出一个经验法则 (rule of thumb): $n = 10p$, 参见文献 (Loepky et al. 2009); $n = 20p$, 参见文献 (Wang et al. 2014).

随机化正交阵列

随机化正交阵列 (randomized orthogonal array) 是由一个正交阵列产生的超拉丁方设计, 该类设计可以有效地减少估计方差. 一个试验次数为 n 、因子个数为 p 、水平数为 q 的部分因子设计称为强度为 r 的**正交阵列** (orthogonal array), 如果任意 $m (\leq r)$ 列都构成完全因子设计, 记作 $OA(n, p, q, r)$. 根据定义, 正交设计是强度为 2 的正交整列.

从一个正交阵列 $OA(n, p, q, r)$ 出发, 构造随机化正交阵列的步骤如下:

- Step 1. 选择合适的正交阵列 $OA(n, p, q, r)$, 记为 \mathbf{A} , 并设 $\lambda = n/q$;

Step 2. 对 \mathbf{A} 的每一列的 λ 个水平为 $k(k = 1, \dots, q)$ 的元素, 用 $\{(k-1)\lambda+1, (k-1)\lambda+2, \dots, (k-1)\lambda+\lambda\}$ 的一个随机置换替代.

由此产生的超拉丁方设计即为随机化正交阵列, 记为 $OH(n, n^p)$.

正交阵列的水平组合的平衡性保证了随机化正交阵列的稳定性比一般超拉丁方设计好, 即不会产生很差的设计. 然而, 构造随机化正交阵列的前提是存在正交阵列. 只有部分特殊的 n, p, q 才存在强度为 $r(\geq 2)$ 的正交阵列, 因此这种方法不能构造任意试验次数 n 和任意因子个数 p 的超拉丁方.

例 4.4. 从正交阵列 $OA(8, 4, 2, 3)$ 出发构造 $OH(8, 8^4)$.

No.	$OA(8, 4, 2, 3)$				$OH(8, 8^4)$			
1	1	1	1	1	2	4	3	3
2	1	1	2	2	1	1	6	7
3	1	2	1	2	3	7	4	8
4	1	2	2	1	4	5	8	4
5	2	1	1	2	6	3	1	5
6	2	1	2	1	5	2	7	1
7	2	2	1	1	7	6	2	2
8	2	2	2	2	8	8	5	6

可以验证, 上表左边的设计是强度为 3 的正交阵列. 在正交阵列 $OA(8, 4, 2, 3)$ 的第一列中, 4 个水平为 1 的位置替换为 $\{1, 2, 3, 4\}$ 的随机置换 $\{2, 1, 3, 4\}$, 4 个水平为 2 的位置替换为 $\{5, 6, 7, 8\}$ 替换为 $\{6, 5, 7, 8\}$; 在正交阵列的第二列中, 4 个水平为 1 的位置替换为 $\{1, 2, 3, 4\}$ 的随机置换 $\{4, 1, 3, 2\}$, 4 个水平为 2 的位置替换为 $\{5, 6, 7, 8\}$ 替换为 $\{7, 5, 6, 8\}$; 类似地替换正交阵列的第三列和第四列, 得到上表右边所示的随机化正交整列.

正交超拉丁方设计

正交性是选择超拉丁方设计的重要准则之一. 如果一个超拉丁方设计的各因子列之间的相关系数为零, 则称之为**正交超拉丁方设计** (orthogonal Latin hypercube design, OLHD).

(Sun et al., 2010) 给出了一类构造 OLHD 的方便、灵活的方法, 所构造的设计具有较多的列, 试验次数能灵活选取, 且同时满足下列两条性质:

- (1) 设计中的任意一列与其它列正交, 即相关系数为零;
- (2) 设计中任意一列的对应元素的平方列及任意两列的元素点乘列于设计的所有列正交.

显然, 满足性质 (1) 的超拉丁方就是 OLHD. OLHD 保证了在拟合一阶模型时线性效应估计的独立性. 然而, 当二阶效应存在时, 需要拟合二阶模型, 此时需要满足上述两条性质的超拉丁方设计, 称这样的设计为**二阶正交超拉丁方设计**.

4.3.2 均匀设计

给定设计 $\xi_n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$, 从伪蒙特卡洛 (Quasi-Monte Carlo) 理论中的 Koksma-Hlawka 不等式可知

$$|\mathbb{E}[f(\mathbf{x})] - \bar{y}(\xi_n)| \leq V(f)\Phi^*(\xi_n) \quad (4.9)$$

其中, $V(f)$ 表示 f 在 \mathcal{X} 上的总变差, 是一个仅与 f 有关的常数; $\Phi^*(\xi_n)$ 表示设计 ξ_n 的星偏差, 它的定义见(4.12)式, 它刻画了设计 ξ_n 的均匀性. 从估计均值的角度来看, 应当使 $\Phi^*(\xi_n)$ 最小, 这就是均匀设计的起源.

- 一方面, $\Phi^*(\xi_n)$ 与 f 无关, 因而这种设计对模型具有稳健性;
- 另一方面, 使 Φ^* 最小的 ξ_n , 未必使 $|\mathbb{E}[f(\mathbf{x})] - \bar{y}(\xi_n)|$ 最小, 毕竟后者与 f 有关.

一般地, 称 ξ_n 的均匀性度量为 ξ_n 的偏差 (discrepancy), 记作 $\Phi(\xi_n)$ 或 $\Phi(\mathbf{D}_{\xi_n})$. 与正交设计类似, 偏差 $\Phi(\xi_n)$ 或 $\Phi(\mathbf{D}_{\xi_n})$ 应该满足以下条件.

- (1) 置换不变: $\Phi(\mathbf{D}_{\xi_n})$ 在 \mathbf{D}_{ξ_n} 的行交换和列交换下是不变的, 即改变试验点的编号, 或改变因素的编号, 不影响偏差 $\Phi(\mathbf{D}_{\xi_n})$ 的值;
- (2) 对中心 $1/2$ 反射不变: 将 \mathbf{D}_{ξ_n} 关于平面 $x_j = 1/2$ 反射, 即将 \mathbf{D}_{ξ_n} 的任一列 $(x_{1j}, \dots, x_{nj})^T$ 变为 $(1 - x_{1j}, \dots, 1 - x_{nj})^T$, 不改变其偏差;
- (3) $\Phi(\mathbf{D}_{\xi_n})$ 不仅能度量 \mathbf{D}_{ξ_n} 的均匀性, 也能度量 \mathbf{D}_{ξ_n} 投影到 \mathbb{R}^p 的任意子空间的均匀性.

此外, 如果 $\Phi(\mathbf{D}_{\xi_n})$ 还满足 Koksma-Hlawka 不等式、易于计算、且与其它试验设计准则有一定的联系则更好.

给定试验区域 \mathcal{X} , 试验次数为 n 以及偏差 Φ 后, 就可以定义均匀设计了. 若一个支撑点数为 n 的设计 ξ_n^* 在一切支撑点数为 n 的设计中具有最小的偏差值, 即

$$\Phi(\xi_n^*) = \min_{\xi_n} \Phi(\xi_n) \quad (4.10)$$

则称 ξ_n^* 为在设计问题 (n, \mathcal{X}, Φ) 下的均匀设计, 简称均匀设计 (uniform design). 显然:

- 均匀设计依赖于偏差的选择, 一种偏差下的均匀设计一般不是另一种偏差下的均匀设计;
- 均匀设计与试验区域 \mathcal{X} 有关, 实际问题中 \mathcal{X} 一般不规则, 为简单起见, 本书假定 $\mathcal{X} = [0, 1]^p$;
- 均匀设计一般不唯一. 如果 ξ_n 为均匀设计, 其设计矩阵为 \mathbf{D}_{ξ_n} , 则将 \mathbf{D}_{ξ_n} 作行列变换获得的设计也是均匀设计. 称行列变换得到的均匀设计互为等价的. 等价的均匀设计至少有 $n!p!$ 个, 它们有相同的偏差值, 在实际应用中只需找到其中一个即可.

下面首先介绍几类常见的偏差, 尔后介绍均匀设计的求解方法.

L_p -星偏差

最普遍采用的偏差是 L_p -星偏差. 令 $F_u(\mathbf{x}) = x_1 \cdots x_p$ 为 \mathcal{X} 上均匀分布的分布函数, 其中 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p)^T$. 以

$$F_{\xi_n}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{[\mathbf{x}_k, \infty)}(\mathbf{x}) \quad (4.11)$$

表示设计 $\xi_n = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n\}$ 的经验分布函数, 式中 $\infty = (\infty, \dots, \infty)$,

$$\mathbb{1}_A(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{x} \in A, \\ 0, & \mathbf{x} \notin A. \end{cases}$$

表示集合 A 的示性函数. ξ_n 的 L_p -星偏差定义为 $F_u(\mathbf{x})$ 与 $F_{\xi_n}(\mathbf{x})$ 之差的 L_p 范数:

$$\Phi_p^*(\xi_n) = \begin{cases} \left(\int_{\mathcal{X}} |F_{\xi_n}(\mathbf{x}) - F_u(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{p}}, & 1 \leq p < \infty, \\ \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} |F_u(\mathbf{x}) - F_{\xi_n}(\mathbf{x})|, & p = \infty. \end{cases} \quad (4.12)$$

对任意 $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_p)^T \in \mathcal{X}$, 令 $[\mathbf{0}, \mathbf{x}] = [0, x_1] \times \cdots \times [0, x_p]$ 为 \mathcal{X} 中由原点 $\mathbf{0}$ 和 \mathbf{x} 决定的矩形, 其体积 $\text{Vol}([\mathbf{0}, \mathbf{x}]) = x_1 \cdots x_p$ 恰好等于 $F_u(\mathbf{x})$. 令 $N(\xi_n, [\mathbf{0}, \mathbf{x}])$ 表示 ξ_n 中的点落到 $[\mathbf{0}, \mathbf{x}]$ 中的个数. 显然,

$$F_{\xi_n}(\mathbf{x}) = \frac{1}{n} N(\xi_n, [\mathbf{0}, \mathbf{x}]).$$

当 ξ_n 中的点在 \mathcal{X} 中散布均匀时, $\frac{1}{n} N(\xi_n, [\mathbf{0}, \mathbf{x}])$ 应与 $\text{Vol}([\mathbf{0}, \mathbf{x}])$ 相近, 称两者的差

$$\text{disc}(\mathbf{x}) = \text{Vol}([\mathbf{0}, \mathbf{x}]) - \frac{1}{n} N(\xi_n, [\mathbf{0}, \mathbf{x}]) \quad (4.13)$$

为设计 ξ_n 的局部偏差函数. L_p -星偏差可表示为

$$\Phi_p^*(\xi_n) = \begin{cases} \left(\int_{\mathcal{X}} |\text{disc}(\mathbf{x})|^p d\mathbf{x} \right)^{\frac{1}{p}}, & 1 \leq p < \infty, \\ \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} |\text{disc}(\mathbf{x})|, & p = \infty. \end{cases} \quad (4.14)$$

这里有两个不同的 p , 一个是 \mathcal{X} 的维数, 一个是 L_p 范数中的 p , 请读者根据上下文自行区分.

L_p -星偏差具有以下几个特点:

- 当 $p = \infty$ 时, 简称星偏差, 对应(4.9)式中的 $\Phi^*(\xi_n)$, 它等价于分布拟合检验中著名的 Kormokorov-Smirnov 统计量, 文献中指出它的几个明显的缺陷: 一是不满足反射不变性; 二是计算复杂; 三是衡量均匀性不够灵敏.
- L_2 -星偏差等价于 Cramer-Von Mises 统计量, Warnock(1972) 给出了计算 L_2 -星偏差的简单表达式:

$$\Phi_2^*(\xi_n) = \left\{ \frac{1}{3^p} - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^p \frac{1 - x_{ij}^2}{2} + \frac{1}{n^2} \sum_{i,l=1}^n \prod_{j=1}^p [1 - \max(x_{ij}, x_{lj})] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (4.15)$$

当 p 给定时, 上式的计算量为 $O(n^2)$, 比星偏差的计算量大大减少.

- L_p -星偏差 ($p \neq \infty$) 没有考虑低维投影的均匀性, 即 $\Phi_p^*(\xi_n)$ 在一个低于 p 维的投影空间上的值对计算 $\Phi_p^*(\xi_n)$ 并不产生任何影响, 因为它在低于 p 维的投影空间上的积分为 0. 忽略低维投影空间的均匀性有时会给出不合理的结果.
- 此外, L_p -星偏差把原点放在一个很特殊的地位, 一切矩形 $[\mathbf{0}, \mathbf{x}]$ 均从原点开始, 故 L_p -星偏差没有旋转不变性.

统计学家们提出了好几种改进的偏差: 中心化偏差、可卷偏差、离散偏差和 Lee 偏差等等, 下面分别介绍.

偏差的一般表达

L_p -星偏差是设计 ξ_n 的经验分布与均匀分布 F_u 之间的 L_p 距离. 自然地, 可以把偏差推广到设计 ξ_n 的经验分布与任意目标分布之间的距离, 或二者之差的范数. 为此, 需要定义由分布组成的空间.

回顾1.4节的知识, 设 $K(\cdot, \cdot)$ 为试验空间 \mathcal{X} 上的核, 令

$$\mathcal{M} = \left\{ \mu : \mathcal{X} \text{ 上满足 } \int_{\mathcal{X}^2} K(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \mu(d\mathbf{x}) \mu(d\mathbf{z}) < \infty \text{ 的符号测度} \right\}.$$

定义 \mathcal{M} 上的内积为

$$\langle \mu, \nu \rangle_{\mathcal{M}} = \int_{\mathcal{X}^2} K(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \mu(d\mathbf{x}) \nu(d\mathbf{z}), \quad \forall \mu, \nu \in \mathcal{M}.$$

则 \mathcal{M} 是以 K 为再生核的再生核 Hilbert 空间. 相应地, 定义 $\mu \in \mathcal{M}$ 的范数

$$\|\mu\|_{\mathcal{M}} = [\langle \mu, \mu \rangle_{\mathcal{M}}]^{\frac{1}{2}}.$$

定义 4.2. 给定试验空间 \mathcal{X} , \mathcal{X} 上的核 $K(\cdot, \cdot)$ 以及目标分布 μ_0 , 设计 ξ_n 的偏差定义为

$$\Phi(\xi_n, K) = \|\mu_0 - \mu_{\xi_n}\|_{\mathcal{M}}, \tag{4.16}$$

其中, μ_{ξ_n} 表示 ξ_n 的经验分布.

将(4.16)式展开, 可得到偏差的具体计算公式

$$\Phi(\xi_n, K) = \left\{ \int_{\mathcal{X}^2} K(\mathbf{x}, \mathbf{z}) \mu_0(d\mathbf{x}) \mu_0(d\mathbf{z}) - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \int_{\mathcal{X}} K(\mathbf{x}_i, \mathbf{z}) \mu_0(d\mathbf{z}) + \frac{1}{n^2} \sum_{i,k=1}^n K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k) \right\}^{\frac{1}{2}}. \tag{4.17}$$

由此可见, 偏差完全由试验空间 \mathcal{X} 、核 K 以及目标分布 μ_0 确定. 在均匀设计中通常取目标分布为均匀分布 F_u , 此时, 偏差的计算公式为

$$\Phi(\xi_n, K) = \left\{ \int_{\mathcal{X}^2} K(\mathbf{x}, \mathbf{z}) dF_u(\mathbf{x}) dF_u(\mathbf{z}) - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \int_{\mathcal{X}} K(\mathbf{x}_i, \mathbf{z}) dF_u(\mathbf{z}) + \frac{1}{n^2} \sum_{i,k=1}^n K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k) \right\}^{\frac{1}{2}}. \tag{4.18}$$

为了计算简便, 通常取 K 为 \mathcal{X} 上的可分核, 即具有形式

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \prod_{i=1}^p K_i(x_i, z_i).$$

下面给出几种常见偏差的可分核及其计算公式.

中心化偏差

取核如下:

$$K_c(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = 2^{-p} \prod_{i=1}^p \left(2 + \left| x_i - \frac{1}{2} \right| + \left| z_i - \frac{1}{2} \right| - |x_i - z_i| \right),$$

可得到中心化偏差的计算公式:

$$\begin{aligned} \varPhi_c(\xi_n) = & \left\{ \left(\frac{13}{12} \right)^p - \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{j=1}^p \left(1 + \frac{1}{2} |x_{ij} - 0.5| - \frac{1}{2} |x_{ij} - 0.5|^2 \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^n \prod_{j=1}^p \left(1 + \frac{1}{2} |x_{ij} - 0.5| + \frac{1}{2} |x_{kj} - 0.5| - \frac{1}{2} |x_{ij} - x_{kj}| \right) \right\}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

可卷偏差

取核如下:

$$K_w(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \prod_{i=1}^p \left(\frac{3}{2} - |x_i - z_i| + |x_i - z_i|^2 \right),$$

可得到可卷偏差的计算公式:

$$\varPhi_w(\xi_n) = \left\{ - \left(\frac{4}{3} \right)^p + \frac{1}{n} \left(\frac{3}{2} \right)^p + \frac{2}{n^2} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{k=i+1}^n \prod_{j=1}^p \left(\frac{3}{2} - |x_{ij} - x_{kj}| + |x_{ij} - x_{kj}|^2 \right) \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (4.20)$$

离散偏差

以上讨论中均假定试验空间 $\mathcal{X} = [0, 1]^p$, 下面考虑因子设计中的均匀性度量问题. 假定共有 p 个因子, 第 j 个因子有 q_j 个水平, 记 $\mathcal{X}_j = \{1, \dots, q_j\}$, 则试验区域 $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 \times \dots \times \mathcal{X}_p$. 取核函数

$$K_d(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \prod_{j=1}^p K_j(x_j, z_j),$$

其中

$$K_j(x_j, z_j) = \begin{cases} a, & z_j = t_j, \\ b, & z_j \neq t_j, \end{cases} \quad \{z_j, t_j\} \subset \mathcal{X}_j, a > b > 0.$$

可得到离散偏差的计算公式:

$$\Phi_d(\xi_n) = \left\{ - \prod_{j=1}^p \left[\frac{a + (q_j - 1)b}{q_j} \right] + \frac{1}{n^2} \sum_{i,k=1}^n \prod_{j=1}^s \left[a^{\delta_{x_{ij} x_{kj}}} b^{1-\delta_{x_{ij} x_{kj}}} \right] \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (4.21)$$

其中, 当 $x_{ij} = x_{kj}$ 时 $\delta_{x_{ij} x_{kj}} = 1$, 否则为 0.

Lee 偏差

仍考虑离散的情形, 设共有 p 个因子, 第 j 个因子有 q_j 个水平, $\mathcal{X}_j = \{1, \dots, q_j\}$, 试验区域 $\mathcal{X} = \mathcal{X}_1 \times \dots \times \mathcal{X}_p$. 一般地, 假设水平数 q_1, \dots, q_t 是奇数, 而 q_{t+1}, \dots, q_p 是偶数, $0 \leq t \leq p$. 当 $t = 0$ 时, 表示所有因子的水平数都是偶数, 而当 $t = p$ 时, 所有因子的水平数都是奇数. 对各因素的水平做变换

$$k \rightarrow \frac{2k-1}{2q_j}, \quad k = 1, \dots, q_j, \quad j = 1, \dots, p.$$

使得水平值都在 $[0, 1]$ 之间, 从而使试验区域 \mathcal{X} 变换为 $[0, 1]^p$ 中的格子点 \mathcal{X}' , 设计 ξ_n 也变换为 $\xi_n^* = (x_{ij})$, 并以 ξ_n^* 的偏差作为 ξ_n 的偏差. 取核函数

$$K_l(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \prod_{j=1}^p (1 - \min \{|x_j - z_j|, 1 - |x_j - z_j|\}),$$

可得到 Lee 偏差的计算公式:

$$\Phi_l(\xi_n) = \frac{1}{n} - \left(\frac{3}{4} \right)^{p-t} \prod_{i=1}^t \left(\frac{3}{4} + \frac{1}{4q_i^2} \right) + \frac{2}{n^2} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \prod_{k=1}^p (1 - \min \{|x_{ik} - x_{jk}|, 1 - |x_{ik} - x_{jk}|\}). \quad (4.22)$$

本节介绍了 L_p -星偏差、中心化偏差、可卷偏差、离散偏差和 Lee 偏差, 这五种偏差都是均匀性的度量, 每种偏差有其自身的特点, 文献中总结出如下结论:

- (1) 所有偏差均为置换不变的, 且都满足 Koksma-Hlawka 不等式, 但全变差 $V(f)$ 的定义方式可能不同;
- (2) 除 L_p -星偏差外, 其余偏差均照顾到低维投影的均匀性, 且均具有反射不变性;
- (3) 中心化偏差和可卷偏差是构造均匀设计的两类比较好的均匀性度量, 离散偏差和 Lee 偏差可用于探索均匀设计与因子设计之间的关系.

均匀设计的求解

给定 (n, \mathcal{X}, Φ) , 求解均匀设计仍然是一个复杂的问题, 尤其是 n 和 p 比较大的时候. 求解方法可分为理论求解、求近似解和数值求解三类. 采用数值求解算法时, 由于目标函数不可微, 因而不能采用传统的梯度优化算法, 只能采用智能优化算法或称随机优化算法, 如模拟

退火算法、粒子群算法、遗传算法等。受篇幅所限，本节仅简单介绍理论求解算法和求近似解的好格子点法。

对于 $\mathcal{X} = [0, 1]$ 的简单情形，可从理论上得到均匀设计。如果偏差取中心化偏差 Φ_c ，Fang et al.(2002) 指出，这时只有一个均匀设计

$$\xi_n^* = \left\{ \frac{1}{2n}, \frac{3}{2n}, \dots, \frac{2n-1}{2n} \right\},$$

且 $\Phi_c(\xi_n^*) = 1/(\sqrt{12}n)$ ， ξ_n^* 也是星偏差下的均匀设计 (Fang and Wang, 1994)，其偏差值为 $1/(2n)$ 。如果偏差取可卷偏差 Φ_w ，则有无限多个均匀设计，它们具有形式

$$\xi_n^*(a) = \left\{ \frac{2i-1}{2n} + a, i = 1, \dots, n \right\}, \quad a \in \left[-\frac{1}{2n}, \frac{1}{2n} \right].$$

其偏差值 $\Phi_w(\xi_n^*(a)) = 1/(6n^2)$ 。

对于 $\mathcal{X} = [0, 1]^p (p \geq 2)$ 的情形，均匀设计的求解在计算复杂性上为 NP 难题。近似求解方法的思路是将解空间缩小为有限个设计，从中挑选出偏差最小的设计。为此，首先给出 U 型设计的概念。

定义 4.3. 若 $n \times p$ 矩阵 $\mathbf{U} = (u_{ij})$ 的第 j 列取值为 $1, 2, \dots, q_j$ ，且这 q_j 个数出现的次数相同，则称 \mathbf{U} 为 U 型设计或 U 型矩阵。进一步，如果 $q_1 = q_2 = \dots = q_j = q$ ，则称 \mathbf{U} 为对称 U 型设计，否则称为非对称 U 型设计。若部分因子的水平数相同，记该 U 型设计为 $\mathcal{U}(n; q_1^{p_1}, \dots, q_m^{p_m})$ ，其中 $\sum_{i=1}^m p_i = p$ ，所有这类设计的集合记为 $\mathcal{U}(n; q_1^{p_1}, \dots, q_m^{p_m})$ 。

显然， U 型设计具有如下性质：

- q_j 整除 n ，且在第 j 列中有 n/q_j 个相同的水平；
- $\mathcal{U}(n; q_1, \dots, q_p)$ 的任意 $r < p$ 列组成的设计仍为 U 型设计；
- 变换一个 U 型设计的行和列所得的设计仍为 U 型设计，将 U 型设计的任意列中的水平置换，仍为 U 型设计。

利用变换

$$k \rightarrow \frac{2k-1}{2q_j}, \quad k = 1, \dots, q_j, \quad j = 1, \dots, p$$

可以将 U 型设计变换为 $[0, 1]^p$ 上的设计。

均匀设计的近似求解方法就是从 U 型设计类 $\mathcal{U}(n; n^p)$ 中挑选出偏差最小的设计。例如，考虑设计问题 $(5, [0, 1]^2, \Phi)$ 的均匀设计，设计的第一列可设定为 $1, \dots, 5$ ，则设计的第二列为 $\{1, \dots, 5\}$ 的任意置换，共有 $5! = 120$ 个，通过比较这 120 个 U 型设计的偏差值可得到均匀设计的近似解。

一般地，给定设计问题 $(n, [0, 1]^p, \Phi)$ ，若 U 型设计的第一列取自然顺序 $1, \dots, n$ 。则总共有 $(n!)^{p-1}$ 个 $\mathcal{U}(n; n^p)$ 个 U 型设计。当 n 和 p 较大时，利用穷举法挑选均匀设计的近似

解计算量将变得十分大, 需要进一步约减设计空间. 好格子点法 (good lattice point method, glpm) 是一种易于理解且计算简单的方法.

给定 n , 定义正整数集合

$$\mathcal{H}_n = \{h : h < n, \gcd(n, h_j) = 1\} := \{h_1, \dots, h_m\},$$

其中 $\gcd(n, h_j) = 1$ 表示 h_j 和 n 互质, 它们的最大公约数为 1. 约定 $1 = h_1 < \dots < h_m < n$. 在数论中, 称把 n 映成集合 \mathcal{H}_n 的元素个数 m 的映射为 **欧拉函数**, 记为 $m = \phi(n)$ ¹. 令

$$u_{ij} = ih_j \mod n,$$

这里, $\mod n$ 是同余运算, 当 $ih_j > n$ 时减去 n 的适当倍数使得余数落到 $[1, n]$ 中, 则矩阵 $\mathbf{V} = (u_{ij})$ 为 $n \times m$ 的 U 型设计, 其中 $m = \phi(n)$. 若 $m \geq p$, 则从 \mathbf{V} 中任选 p 列组成的设计仍然是 U 型设计, 一共有 C_m^p 个子 U 型设计, 从中选取均匀性最好的设计作为均匀设计问题 $(n, [0, 1]^p, \Phi)$ 的一个近似解. 该子阵的 h_{k_1}, \dots, h_{k_p} 组成的向量 $\mathbf{h} = (h_{k_1}, \dots, h_{k_s})$ 称为该设计的**生成向量**. 显然, 如果 \mathbf{V}_0 为均匀性最好的设计, 总可以通过适当的行/列变换得到等价的设计 \mathbf{V}_0^* , 使得 \mathbf{V}_0^* 的第一列为 $[1, 2, \dots, n]^T$. 为了减少计算复杂度, 取 $h_1 = 1$, 在 $\{h_2, \dots, h_m\}$ 中选取其余的 $p - 1$ 个元素构成生成向量, 故总共只有 C_{m-1}^{p-1} 个生成向量. 给定 $(n, [0, 1]^p, \Phi)$, 好格子点法的构造过程可总结如下:

Step (1) 寻找正整数集 $\mathcal{H}_n = \{h : h < n, \gcd(n, h) = 1\} = \{h_1, \dots, h_m\}$, 这里 $m = \phi(n)$.

若 $m \geq p$, 则进入 Step (2), 否则好格子点法无法构造所需的均匀设计;

Step (2) 取 $h_{k_1} = h_1 = 1$, 并在 \mathcal{H}_n 的其余 $m - 1$ 个元素中任取 $p - 1$ 个元素, 产生生成向量 $\mathbf{h}^{(k)} = (h_{k_1}, \dots, h_{k_p})$. 由 $\mathbf{h}^{(k)}$ 生成一个 $n \times p$ 的 U 型矩阵 $\mathbf{U}^{(k)} = (u_{ij}^{(k)})$, 其中

$$u_{ij}^{(k)} = ih_{k_j} \mod n.$$

记这 C_{m-1}^{p-1} 矩阵的全体为 $\mathcal{U}_{n,p}$.

Step (3) 从 $\mathcal{U}_{n,p}$ 中选择偏差最小的设计作为所求均匀设计问题的近似解.

好格子法中要求 h_j 与 n 互质的目的是使得向量 $\mathbf{h}_j = (h_j, 2h_j, \dots, nh_j) \mod n$ 构成 $\{1, 2, \dots, n\}$ 的一个置换. 数论中的结果保证了当 h_j 与 n 互质时, 向量 \mathbf{h}_j 是 $\{1, 2, \dots, n\}$ 的一个置换.

¹ 欧拉函数可以由素数分解公式方便地算出. 对于任一正整数 n , 设其素数分解为

$$n = p_1^{r_1} \cdots p_t^{r_t}, \quad i = 1, \dots, n, \quad j = 1, \dots, \phi(n),$$

其中 p_1, \dots, p_t 为互不相同的素数, r_1, \dots, r_t 为正整数, 则欧拉函数

$$\phi(n) = n \left(1 - \frac{1}{p_1}\right) \cdots \left(1 - \frac{1}{p_t}\right).$$

例如

$$\phi(15) = 15 \left(1 - \frac{1}{3}\right) \left(1 - \frac{1}{5}\right) = 8.$$

对于素数 p , $\phi(p) = p - 1$, 对于偶数 n , $\phi(n) \leq n/2$.

欧拉函数 $\phi(n)$ 的大小对好格子点法求出的近似均匀设计的均匀性有很大影响。当 $\phi(n)$ 很小时，可选的列数太少，选出来的设计可能均匀性比较差。实践表明，当 $\phi(n)/n$ 接近于 1 时，用好格子点法选择的均匀设计有较好的均匀性。当 n 为偶数时， $\phi(n)/n < 1/2$ 较小，(王元, 方开泰, 1981) 和 (方开泰, 李久坤, 1994) 建议将 n 替换成 $n+1$ ，由此生成一个 $(n+1) \times \phi(n+1)$ 的矩阵 \mathbf{U}^* ，由于 \mathbf{U}^* 的最后一行全为 $n+1$ ，将 \mathbf{U}^* 的最后一行删去得到 \mathbf{U} ，从 \mathbf{U} 中选择偏差最小的 p 列构成近似均匀设计，这就是**修正的好格子点法**。

例 4.5. 求均匀设计问题 $(6, [0, 1]^2, \Phi_c)$ 的近似解。若用好格子点法直接求解，由于

$$\phi(6) = 6 \left(1 - \frac{1}{2}\right) \left(1 - \frac{1}{3}\right), \quad \mathcal{H}_6 = \{1, 5\},$$

用生成向量 $\mathbf{h} = (1, 5)$ 构造两因素设计，可得

$$\xi_6 = \begin{pmatrix} 1 & 5 \\ 2 & 4 \\ 3 & 3 \\ 4 & 2 \\ 5 & 1 \\ 6 & 6 \end{pmatrix}$$

其中中心化偏差 $\Phi_c(\xi_6) = 0.1023$ 。由于直接构造时，生成向量没有其他选择，往往均匀性不好。由于 $6+1=7$ 为素数，可以考虑修正的好格子点法。 $\mathcal{H}_7 = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ ，由它生成 7×6 的 U 型矩阵去掉最后一行变为 6×6 的 U 型矩阵，共有 $C_{6-1}^{2-1} = 5$ 种取法，其均匀性最好的一个是由 $\mathbf{h} = (1, 3)$ 生成的设计

$$\xi_6^* = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 6 \\ 3 & 2 \\ 4 & 5 \\ 5 & 1 \\ 6 & 4 \end{pmatrix},$$

其中中心化偏差 $\Phi_c(\xi_6^*) = 0.0902$ 。由此可见，当 $n+1$ 为素数时，修正的好格子点法得到的设计往往具有更好的均匀性。

如前所述，均匀设计的求解十分困难，统计学家把一些均匀设计编制成表，以便工程技术人员查用。

以记号 $U_n(q^p)$ 或 $U_n^*(q^p)$ 表示均匀设计表，其中 U 表示均匀设计， n 表示要做 n 次试验， q 表示每个因素有 q 个水平， p 表示该表有 p 列。通常加 * 的均匀设计表有更好的均匀性，应优先选用。当试验数 n 给定时， U_n 表比 U_n^* 表能安排更多的因素。故当因素个数较多

且超过 U_n^* 的使用范围时可考虑使用 U_n 表. 每个均匀设计表都附有一个使用表, 它指示如何从设计表中选用适当的列, 以及由这些列所组成的试验方案的偏差.

例如, 表 $U_6^*(6^4)$ 表示要做 6 次试验, 每个因素有 6 个水平, 该表有 4 列. 表 4.2 是 $U_6^*(6^4)$ 的使用表. 它表示若有 2 个因素, 应选用 (1, 3) 两列来安排试验; 而若有 3 个因素, 应选用 (1, 2, 3) 三列. 最后一列 Φ 表示刻划均匀度的偏差. 可见, 均匀设计表有如下特点:

- 每个因素的每个水平做且仅做一次试验.
- 任两个因素的试验点在平面的格子点上, 每行每列有且仅有一个试验点.
- 均匀设计表任两列组成的试验方案一般不等价, 因此, 每个均匀设计表必须有一个附加的使用表.

表 4.1: $U_6^*(6^4)$

试验号	1	2	3	4
1	1	2	3	6
2	2	4	6	5
3	3	6	2	4
4	4	1	5	3
5	5	3	1	2
6	6	5	4	1

表 4.2: $U_6^*(6^4)$ 的使用表

因子数	列号			Φ
2	1	3		0.1875
3	1	2	3	0.2656
4	1	2	3	0.2990

使用均匀设计表安排计算机试验时, 需要把表变换到试验区域 $[0, 1]^p$ 上来, 变换方法这里不再叙述. 下面以一个例子来说明均匀设计的应用.

例 4.6 (方开泰, 例 6.3). content...

4.3.3 基于准则的最优设计

基于准则的确定性方法首先构造某种空间填充准则, 然后设计优化算法求解最好的设计. 常见的准则包括极大极小准则、极小极大准则和均匀性准则.

包含 n 个设计点的极大极小距离设计 $\xi_{\max \min}$ 满足

$$\min_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \xi_{\min \max}} d(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \max_{\xi_n \subset \mathcal{X}} \min_{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \xi_n} d(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \quad (4.23)$$

即最大化设计点之间的最小距离, 而包含 n 个点的极小极大设计 $\xi_{\min \max}$ 满足

$$\max_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}} \inf_{\boldsymbol{x}' \in \xi_{\min \max}} d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \min_{\xi_n \subset \mathcal{X}} \max_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{X}} \inf_{\boldsymbol{x}' \in \xi_n} d(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}'), \quad (4.24)$$

即最小化设计区域中的点与设计之间的最大距离.

4.4 序贯设计

4.4.1 基于 Kriging 模型的序贯试验设计

序贯试验设计包括构造初始设计、增加试验点方法和停止准则三部分。其基本流程见图4.2。

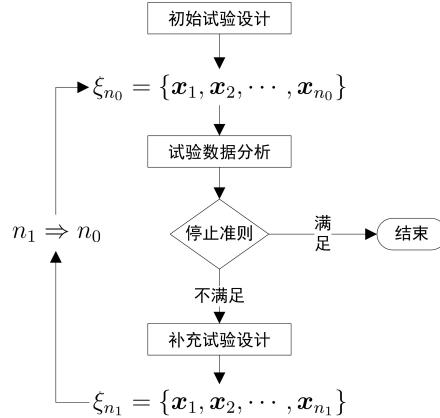


图 4.2: 序贯设计的一般流程

初始设计可采用4.1节提供的各种空间填充设计方法。由于本节以 Kriging 模型来代理响应关系，也可采用**积分均方误差** (integrated mean square error) 最小准则。即使得 $\hat{y}(\mathbf{x})$ 在 $\mathcal{X} = [0, 1]^p$ 上的积分均方误差

$$\text{IMSE}(\hat{y}(\mathbf{x})) = \int_{\mathcal{X}} \mathbb{E}[(y(\mathbf{x}) - \hat{y}(\mathbf{x}))^2] d\mathbf{x} \quad (4.25)$$

达到最小。其中均方误差 $\mathbb{E}[(y(\mathbf{x}) - \hat{y}(\mathbf{x}))^2]$ 已由(4.5)式给出。

按照初始设计进行试验后，采用 Kriging 模型对试验数据建模，而后考虑补充试验设计。直观来看，希望在响应模型变化越剧烈的地方补充更多的试验，遗憾的是我们无法知道响应模型在哪些地方变化剧烈。因此，采用在预测值 $\hat{y}(\mathbf{x})$ 的 MSE 大的地方补充试验，即一次补充一个试验点 \mathbf{x}_{n+1} ，使得

$$\text{MSE}[\hat{y}(\mathbf{x}_{n+1})] = \sup_{\mathbf{x} \in \mathcal{X}} \text{MSE}[\hat{y}(\mathbf{x})]. \quad (4.26)$$

可根据预测模型的精度终止序贯试验，即当 $\sup_{\mathbf{x}} \text{MSE}[\hat{y}(\mathbf{x})]$ 小于某给定阈值时终止试验，也可以根据所能承受的试验次数来确定终止时刻。

例 4.7. 考虑二元函数 (*Haupt* 函数)

$$y = x_1 \sin(4x_1) + 1.1 \cdot x_2 \sin(2x_2), \quad x_1, x_2 \in [0, 3.5], \quad (4.27)$$

4.4.2 水平集驱动的最优设计

考虑响应模型 $y = F(\mathbf{x}, \omega)$ 的水平集

$$\Gamma_\alpha(\omega) = \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} : F(\mathbf{x}, \omega) \geq \alpha\}.$$

注意, $\Gamma_\alpha(\omega)$ 是一个随机集. 如果用 Kraining 模型对 F 建模, 利用预测公式(4.4), 可得到水平集的估计:

$$\Gamma_\alpha(\omega) = \{\mathbf{x} \in \mathcal{X} : \mathbf{f}^T(\mathbf{x})\hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{r}^T(\mathbf{x})\mathbf{C}^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\beta}}) \geq \alpha\}. \quad (4.28)$$

4.5 习题

习题 4.1. 假定 $\{f(x) : x \in [0, 1]\}$ 为均值函数 $\mathbb{E}[f(x)] \equiv 0$, 方差核为

$$R(x_1, x_2) = \exp\left\{-|x_1 - x_2|^2\right\}$$

的 *Gauss* 过程, 现得到一组数据 $\mathcal{D}_n := \{(x_i, y_i) : i = 1, 2, \dots, n\}$, 试利用引理 1.2, 写出条件分布 $f(x)|\mathcal{D}_n$.

习题 4.2. 考虑 *Kriging* 模型(4.1)中, 利用 n 组样本 $\mathbf{y} = [y(\mathbf{x}_1), \dots, y(\mathbf{x}_n)]^T$ 来预测 \mathbf{x} 处的响应值 $y(\mathbf{x})$. 线性预测是指用 \mathbf{y} 的线性函数 $a + \mathbf{c}^T \mathbf{y}$ 来预测 $y(\mathbf{x})$, 线性无偏预测指满足

$$\mathbb{E}(a + \mathbf{c}^T \mathbf{y}) = \mathbb{E}[y(\mathbf{x})],$$

的线性预测, 即

$$a + \mathbf{c}^T \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}) \boldsymbol{\beta},$$

因而, $a = 0$ 且 $\mathbf{c}^T \mathbf{X} = \mathbf{f}^T(\mathbf{x})$. 定义最佳线性无偏预测 (*best linear unbiased prediction*) 为均方误差最小的线性无偏预测, 即优化问题

$$\begin{cases} \min \left\{ \mathbb{E} [\mathbf{c}^T \mathbf{y} - y(\mathbf{x})]^2 : \mathbf{c} \in \mathbb{R}^n \right\}, \\ s.t. \quad \mathbf{c}^T \mathbf{X} = \mathbf{f}^T(\mathbf{x}). \end{cases} \quad (4.29)$$

的解. 试问(4.4)是最佳线性无偏预测吗?

第五章 复杂系统的试验评估框架

考虑评价某系统或过程的性能. 按照实验设计与分析的基本流程: 试验前的建模、试验设计、试验数据分析, 首先需要梳理系统的输入、输出以及输入输出关系. 复杂系统输入输出之间的关系通常并不是一个黑盒, 采用还原论的方法对系统进行分解, 往往能够得到响应关系的一些结构信息.

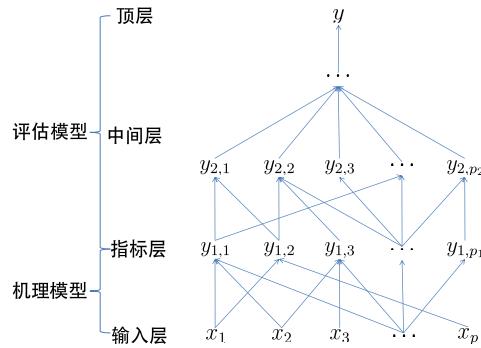


图 5.1: 性能评估模型

5.1 试验前的建模

评估模型建立过程：层次交互模型，三层先验信息。

多类型因子建模的问题

多类型试验建模的问题

5.1.1 试验因子

5.1.2 指标体系与评估模型

5.1.3 响应函数建模

三类先验信息

5.1.4 层次交互模型及其性质

非参数回归分析中有**维数灾难** (curse of dimensionality) 的概念，即估计回归函数 f 时，达到相同量级的精度所需要的试验点数（样本量）随着因子的个数 p 指数增长。本节简单介绍维数灾难的含义。

考虑 p 维回归问题，设 (\mathbf{x}, y) 为取值于 $\mathbb{R}^p \times \mathbb{R}$ 的随机向量，满足 $\mathbb{E}y^2 < \infty$ 。目标是估计 \mathbf{x} 与 y 之间的关系，以根据 \mathbf{x} 的取值来预测 y 。以函数 $f : \mathbb{R}^p \mapsto \mathbb{R}$ 来估计这一关系，其在 \mathbf{x} 处的损失记为 $\ell(y, f(\mathbf{x}))$ ，如平方损失 $\ell_2(y, f(\mathbf{x})) = [y - f(\mathbf{x})]^2$ 。风险为损失的期望，即

$$R(f) = \mathbb{E}[\ell(y, f(\mathbf{x}))], \quad (5.1)$$

因而平方损失下的风险为

$$R(f) = \mathbb{E}\{|y - f(\mathbf{x})|^2\}.$$

需要指出的是，上述期望是针对 \mathbf{x} 和 y 的联合分布求的，因此风险除与估计量 f 有关，还与 (\mathbf{x}, y) 的分布有关。记 $m(\mathbf{x}) = \mathbb{E}(y|\mathbf{x})$ ，由于

$$\mathbb{E}\{|y - f(\mathbf{x})|^2\} = \mathbb{E}\{|y - m(\mathbf{x})|^2\} + \int |f(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x})|^2 \mathbb{P}_{\mathbf{x}}(\mathrm{d}\mathbf{x}),$$

条件期望的性质表明，上式第一项已经达到了最小。于是，一个好的估计 f 应使上式第二项

$$\int |f(\mathbf{x}) - m(\mathbf{x})|^2 \mathbb{P}_{\mathbf{x}}(\mathrm{d}\mathbf{x})$$

尽可能地小，称它为估计量 f 的 L_2 误差。

实际问题中， (\mathbf{x}, y) 的分布未知， m 也未知。多元非参数回归就是要根据数据集 $\mathcal{D}_n = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, 2, \dots, n\}$ 来找到估计 $f_n(\cdot) = f_n(\cdot, \mathcal{D}_n)$ ，使得 L_2 误差最小，这里 $(\mathbf{x}, y), (\mathbf{x}_1, y_1), \dots, (\mathbf{x}_n, y_n)$ 为独立同分布随机变量。条件期望 $m(\mathbf{x})$ 刻画了 \mathbf{x} 与 y 之间的

关系, 它表示“真实的模型”, 得对它做一些限制才能确保非参数回归是有意义的. 通常假定 m 属于某已知的、以 $\mathbb{R}^p \mapsto \mathbb{R}$ 的函数组成集合 \mathcal{F} , 记作 $m \in \mathcal{F}$. 例如, 很多文献中假定 \mathcal{F} 为 $[0, 1]^p$ 上 (β, C) 光滑函数组成的集合.

定义 5.1. 给定一个 p 重指数 $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_p)$, 定义 $|\alpha| := \alpha_1 + \dots + \alpha_p$ 以及

$$D^\alpha := \frac{\partial^{|\alpha|}}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdots \partial x_p^{\alpha_p}}.$$

给定 $\beta > 0$ 和 $C > 0$, 以 q 表示不超过 β 的最大整数. 称函数 $f : [0, 1]^p \mapsto \mathbb{R}$ 为 (β, C) 光滑的, 如果 f 存在 q 阶连续偏导数, 且对任意满足 $|\alpha| = q$ 的 p 重指数 $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_p)$,

$$|D^\alpha f(\mathbf{x}_1) - D^\alpha f(\mathbf{x}_2)| \leq C \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|_2^{\beta-q}$$

对任意 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in [0, 1]^p$ 都成立.

定义 5.2. 设 $a_n > 0$, $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 0$, $C_1 > 0$ 和 $C_2 > 0$ 为常数. 称数列 $\{a_n\}$ 为函数类 \mathcal{F} 的极小极大收敛速度下界 (*lower minimax rate of convergence*), 如果

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \inf_{m_n} \sup_{m \in \mathcal{F}} \frac{R(m_n, m)}{a_n} = C_1,$$

称 $\{a_n\}$ 为函数类 \mathcal{F} 的可达收敛速度 (*achievable rate of convergence*), 如果存在估计 m_n 使得

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \sup_{m \in \mathcal{F}} \frac{R(m_n, m)}{a_n} = C_2.$$

如果 $\{a_n\}$ 即为极小极大收敛速度下界, 又为可达收敛速度, 则称 $\{a_n\}$ 为最优极小极大收敛速度 (*optimal minimax rate of convergence*), 简称最优收敛速度.

Stone[26] 证明了如果回归函数 $m : [0, 1]^p \mapsto \mathbb{R}$ 是 (β, C) 光滑的, 则估计 m 的最优收敛速度为

$$-n^{\frac{2\beta}{2\beta+p}}.$$

由此可得到, 达到某给定精度 ε 所需要的样本量 $n \simeq (\varepsilon^{-1})^{1+\frac{p}{2\beta}}$, 随着 p 指数增长. 这一结论有如下直观解释: 在 $[0, 1]$ 上取网格点, 为使点的密度达到 $1/n$, 需要取 n 个点; 在 $[0, 1]^2$ 上取网格点, 为使点的密度达到 $1/n$, 需要 n^2 个点; 一般地, 在 $[0, 1]^p$ 上取网格点, 为使点的密度达到 $1/n$, 需要 n^p 个点. 可见点的数目随着 p 指数增长.

受资源的限制, 需要挖掘 m 的结构信息, 以降低样本量增长的速度, 以下是文献中三种常见的结构.

- Stone [27] 假定 m 为可加模型 (additive model)

$$m(x_1, \dots, x_p) = m_1(x_1) + m_2(x_2) + \dots + m_p(x_p). \quad (5.2)$$

该模型将估计一个 $[0, 1]^p$ 上的 (β, C) 光滑函数转化为估计 p 个 $[0, 1]$ 上的 (β, C) 光滑函数, 最优收敛速度为 $n^{-\frac{2\beta}{2\beta+1}}$, 所需样本数随着 p 增长呈线性增长. (Stone, 1994) 将可加结构推广到所谓的**交互模型** (interact model)

$$m(\mathbf{x}) = \sum_{I \subset \{1, \dots, p\}, |I|=p^*} m_I(\mathbf{x}_I), \quad p^* \in \{1, 2, \dots, p\}. \quad (5.3)$$

该模型将估计一个 $[0, 1]^p$ 上的 (β, C) 光滑函数转化为估计有限个 $[0, 1]^{p^*}$ 上的 (β, C) 光滑函数, 最优收敛速度为 $-n^{\frac{2\beta}{2\beta+p^*}}$, 一定程度上降低了样本量的增长速度.

- 半参数回归中的**单指数模型** (single index model) 为

$$m(\mathbf{x}) = g(\mathbf{a}^T \mathbf{x}), \quad (5.4)$$

该模型将估计一个 $[0, 1]^p$ 上的 (β, C) 光滑函数转化为估计一个 $[0, 1]$ 上的 (β, C) 光滑函数和一个 p 维向量 \mathbf{a} , 最优收敛速度为 $n^{-\frac{2\beta}{2\beta+1}}$. 将这种思路推广, 得到所谓的**投影追踪** (projection persuit)

$$m(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K g_k(\mathbf{a}_k^T \mathbf{x}), \quad (5.5)$$

该模型将估计一个 $[0, 1]^p$ 上的 (β, C) 光滑函数转化为估计 K 个 $[0, 1]$ 上的 (β, C) 光滑函数和 K 个 p 维向量 \mathbf{a} , 基本能够达到单变量函数估计的速度.

- (Horowitz, Mammen, 2007) 提出以下**层次回归模型** (hierarchical regression model)

$$m(\mathbf{x}) = g \left(\sum_{l_1=1}^{L_1} g_{l_1} \left(\sum_{l_2=1}^{L_2} g_{l_1, l_2} \left(\dots \sum_{l_r=1}^{L_r} g_{l_1, \dots, l_r} (x^{l_1, \dots, l_r}) \right) \right) \right), \quad (5.6)$$

其中, x^{l_1, \dots, l_r} 表示 \mathbf{x} 中的某单变量, 该模型将估计一个 $[0, 1]^p$ 上的 (β, C) 光滑函数转化为估计 $\sum_{i=1}^r L_i$ 个 $[0, 1]$ 上的 (β, C) 光滑函数, 理论表明它基本可以达到估计一维函数的速度.

上述三种模型基本思路都是将估计一个高维函数转化为估计几个低维函数, 以降低样本量需求. 层次交互模型综合了交互模型、投影追踪模型和层次回归模型的结构, 可以想见, 其应用范围更广.

首先给出层次交互模型的定义.

定义 5.3. 设 $p \in \mathbb{N}$, $p^* \in \{1, \dots, p\}$, $m : \mathbb{R}^p \mapsto \mathbb{R}$.

- 称 m 为 p^* 维 0 层的**层次交互模型**, 如果存在向量 $\mathbf{a}_1, \dots, \mathbf{a}_{p^*} \in \mathbb{R}^p$ 以及函数 $f : \mathbb{R}^{p^*} \mapsto \mathbb{R}$, 使得 $m(\mathbf{x}) = f(\mathbf{a}_1^T \mathbf{x}, \dots, \mathbf{a}_{p^*}^T \mathbf{x})$;

- 称 m 为 p^* 维 $l+1$ 层的层次交互模型, 如果存在正整数 K , K 个未知函数 $g_k : \mathbb{R}^{p^*} \mapsto \mathbb{R}$ ($k = 1, \dots, K$) 以及一组 p^* 维 l 层的层次交互模型 $\{f_{1,k}, \dots, f_{p^*,k} : k = 1, \dots, K\}$, 使得

$$m(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K g_k(f_{1,k}(\mathbf{x}), \dots, f_{p^*,k}(\mathbf{x})).$$

可以证明, 如果 p^* 阶 l 层层次交互模型 m 中, 所有函数均维 (β, C) , 则 m 也为 (β, C) 光滑的. 图5.2给出的是一个 2 维 1 层的层次交互模型的结构. 为了加深理解, 下面看几个例子.

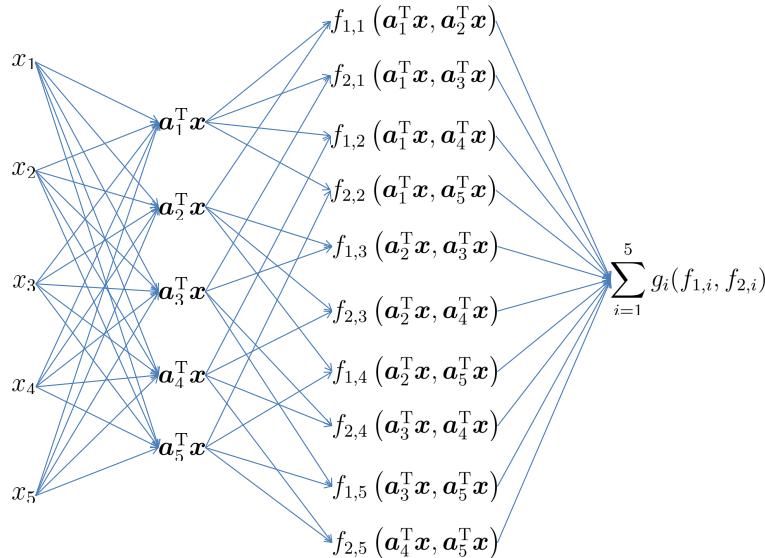


图 5.2: 层次交互模型

如果取 $\mathbf{a}_i = \mathbf{e}_i$, $f_{1,i}(x) = x$, 则可加模型(5.2)可表示为

$$m(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^p g_i(f_{1,i}(\mathbf{a}_i^T \mathbf{x})),$$

它是 1 维 1 层的层次交互模型. 交互模型(5.3)为 p^* 维 1 层的层次交互模型, 单指数模型(5.4)和投影追踪模型(5.5)均为 1 维 1 层层次交互模型, 层次模型(5.6)为 1 维 $r+1$ 层层次交互模型.

多层前馈神经网络 (multilayer feedforward neural networks) 也是一种层次模型. 首先定义**激活函数** (active function) $\sigma : \mathbb{R} \mapsto [0, 1]$ 为满足

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \sigma(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \sigma(x) = 1$$

的单调增函数. 如 sigmoid 函数

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}.$$

每层 K_1, \dots, K_l 个神经元、激活函数为 σ 的 l 层神经网络为

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{K_l} c_i^{(l)} f_i^{(l)}(\mathbf{x}) + c_0^{(l)},$$

其中, $c_0^{(l)}, \dots, c_{K_l}^{(l)}$ 为参数, $f_i^{(l)}$ 迭代地定义为

$$f_i^{(r)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sigma \left(\sum_{j=1}^{K_{r-1}} c_{i,j}^{(r-1)} f_j^{(r-1)}(\mathbf{x}) + c_{i,0}^{(r-1)} \right), & r = 2, \dots, l, \\ \sigma \left(\sum_{j=1}^d c_{i,j}^{(0)} x_i + c_{i,0}^{(0)} \right), & r = 1. \end{cases}$$

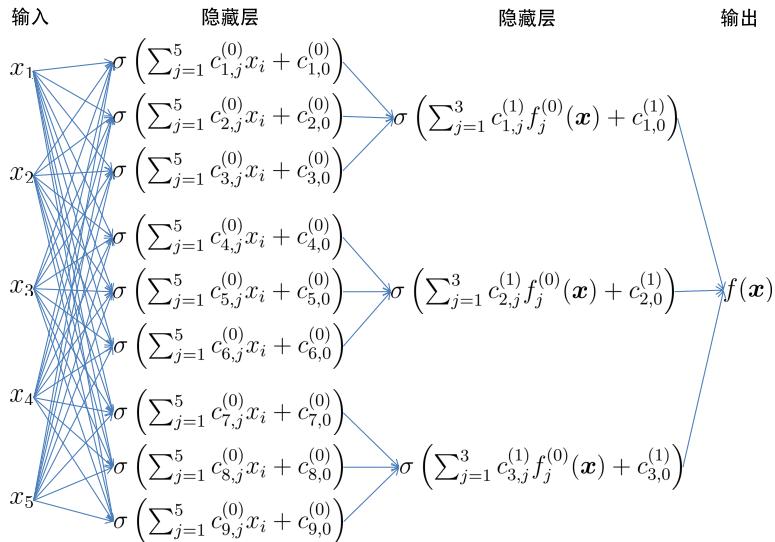


图 5.3: 2 层神经网络

5.1.5 多种试验方式建模

5.1.6 综合试验模型

5.2 试验设计

5.3 基于层次交互模型的统计分析

5.4 序贯设计

5.5 展望

参考文献

- [1] 范诗松, 周纪芗, and 陈颖. 试验设计. 全国统计教材编审委员会“十二五”规划教材. 中国统计出版社, 2012. 38
- [2] Robert J Adler, Jonathan E Taylor, and Robert Adler. *Random Fields and Geometry*. Springer Monographs in Mathematics. Springer New York, New York, NY, 2007. 224
- [3] Ahmed Attia, Alen Alexanderian, and Arvind K. Saibaba. Goal-oriented optimal design of experiments for large-scale Bayesian linear inverse problems. *Inverse Problems*, 34(9):095009, sep 2018. 176
- [4] Jing Cao, J Jack Lee, and Susan Alber. Comparison of Bayesian sample size criteria: ACC, ALC, and WOC. *Journal of Statistical Planning and Inference*, 139(12):4111–4122, dec 2009. 29
- [5] David E. Coleman and Douglas C. Montgomery. A systematic approach to planning for a designed industrial experiment. *Technometrics*, 35(1):1–12, 1993. 26
- [6] X. Deng, C. Devon Lin, K.-W. Liu, and R. K. Rowe. Additive Gaussian Process for Computer Models With Qualitative and Quantitative Factors. *Technometrics*, 59(3):283–292, jul 2017. 215
- [7] Xinwei Deng, Ying Hung, and C. Devon Lin. Design for computer experiments with qualitative and quantitative factors. *Statistica Sinica*, 25:1567–1581, 2015. 215
- [8] Holger Dette and Viatcheslav B. Melas. A note on the de la Garza phenomenon for locally optimal designs. *The Annals of Statistics*, 39(2):1266–1281, apr 2011. 177
- [9] Kai-Tai Fang, Run-ze Li, and Agus Sudjianto. *Design and Modeling for Computer Experiments*, volume 8 of *Chapman & Hall/CRC Computer Science & Data Analysis*. Chapman and Hall/CRC, oct 2005. 215

- [10] Laura J. Freeman, Anne G. Ryan, Jennifer L.K. Kensler, Rebecca M. Dickinson, and G. Geoffrey Vining. A tutorial on the planning of experiments. *Quality Engineering*, 25(4):315–332, 2013. [26](#)
- [11] Lurdes Y.T Inoue, Donald A Berry, and Giovanni Parmigiani. Relationship Between Bayesian and Frequentist Sample Size Determination. *The American Statistician*, 59(1):79–87, feb 2005. [29](#)
- [12] Rachel T. Johnson, Gregory T. Hutto, James R. Simpson, and Douglas C. Montgomery. Designed experiments for the defense community. *Quality Engineering*, 24(1):60–79, 2012. [26](#)
- [13] J. Kiefer. General Equivalence Theory for Optimum Designs (Approximate Theory). *The Annals of Statistics*, 2(5):849–879, sep 1974. [183](#)
- [14] John Lawson. *Design and Analysis of Experiments with R*. 2015. [43](#)
- [15] C. Devon Lin, Derek Bingham, Randy R. Sitter, and Boxin Tang. A new and flexible method for constructing designs for computer experiments. *The Annals of Statistics*, 38(3):1460–1477, oct 2010. [215](#)
- [16] Jason L. Loeppky, Jerome Sacks, and William J. Welch. Choosing the Sample Size of a Computer Experiment: A Practical Guide. *Technometrics*, 51(4):366–376, nov 2009. [29](#)
- [17] Douglas C Montgomery. *Design and Analysis of Experiments*. John Wiley & Sons, Inc., 9th edition, 2017. [3](#), [13](#), [15](#), [43](#), [97](#)
- [18] Max D. Morris. Gaussian Surrogates for Computer Models With Time-Varying Inputs and Outputs. *Technometrics*, 54(1):42–50, feb 2012. [215](#)
- [19] M. M. Nassar, S. M. Khamis, and S. S. Radwan. On Bayesian sample size determination. *Journal of Applied Statistics*, 38(5):1045–1054, may 2011. [29](#)
- [20] Matthew Plumlee. Bayesian Calibration of Inexact Computer Models. *Journal of the American Statistical Association*, 112(519):1274–1285, jul 2017. [215](#)
- [21] Peter Z. G. Qian and C. F. Jeff Wu. Bayesian Hierarchical Modeling for Integrating Low-Accuracy and High-Accuracy Experiments. *Technometrics*, 50(2):192–204, may 2008. [215](#)

- [22] Jerome Sacks, William J. Welch, Toby J. Mitchell, and Henry P. Wynn. Design and Analysis of Computer Experiments. *Statistical Science*, 4(4):409–423, nov 1989. [215](#), [222](#)
- [23] S K Sahu and T M F Smith. A Bayesian method of sample size determination with practical applications. *Journal of the Royal Statistical Society: Series A (Statistics in Society)*, 169(2):235–253, mar 2006. [29](#)
- [24] De Santis and Roma La. Using historical data for Bayesian sample size determination. *Journal of the Royal Statistical Society. Series A (Statistics in Society)*, pages 95–113, 2007. [29](#)
- [25] Thomas J. Santner, Brian J. Williams, and William I. Notz. *The Design and Analysis of Computer Experiments*. Springer Series in Statistics. Springer New York, New York, NY, 2003. [215](#), [216](#), [217](#)
- [26] Charles J. Stone. Optimal Global Rates of Convergence for Nonparametric Regression. *The Annals of Statistics*, 10(4):1040–1053, dec 1982. [246](#)
- [27] Charles J. Stone. Additive Regression and Other Nonparametric Models. *The Annals of Statistics*, 13(2):689–705, jun 1985. [246](#)
- [28] Fasheng Sun, Min-Qian Liu, and Peter Z G Qian. On the construction of nested space-filling designs. *The Annals of Statistics*, 42(4):1394–1425, aug 2014. [215](#)
- [29] Rui Tuo and C. F. Jeff Wu. Efficient calibration for imperfect computer models. *The Annals of Statistics*, 43(6):2331–2352, dec 2015. [215](#)
- [30] Rui Tuo, C. F. Jeff Wu, and Dan Yu. Surrogate Modeling of Computer Experiments With Different Mesh Densities. *Technometrics*, 56(3):372–380, jul 2014. [215](#)
- [31] E. Viles, M. Tanco, L. Ilzarbe, and M. J. Alvarez. Planning Experiments, the First Real Task in Reaching a Goal. *Quality Engineering*, 21(1):44–51, dec 2008. [26](#)
- [32] Larry Wassermann. *All of Nonparametric Statistics*, volume 1 of *Springer Texts in Statistics*. Springer New York, New York, NY, 2006. [198](#)
- [33] Henry P Wynn. The Sequential Generation of \$D\$-Optimum Experimental Designs. *The Annals of Mathematical Statistics*, 41(5):1655–1664, oct 1970. [188](#)
- [34] Min Yang. On the de la Garza phenomenon. *The Annals of Statistics*, 38(4):2499–2524, aug 2010. [177](#)

-
- [35] Min Yang, Stefanie Biedermann, and Elina Tang. On Optimal Designs for Nonlinear Models: A General and Efficient Algorithm. *Journal of the American Statistical Association*, 108(504):1411–1420, dec 2013. [188](#)
 - [36] Derek S. Young, Charles M. Gordon, Shihong Zhu, and Bryan D. Olin. Sample size determination strategies for normal tolerance intervals using historical data. *Quality Engineering*, 28(3):337–351, jul 2016. [29](#)
 - [37] Yaming Yu. Monotonic convergence of a general algorithm for computing optimal designs. *The Annals of Statistics*, 38(3):1593–1606, jun 2010. [188](#)
 - [38] Yaming Yu. D-optimal designs via a cocktail algorithm. *Statistics and Computing*, 21(4):475–481, oct 2011. [188](#)
 - [39] Yichi Zhang, Siyu Tao, Wei Chen, and Daniel W. Apley. A Latent Variable Approach to Gaussian Process Modeling with Qualitative and Quantitative Factors. *Technometrics*, 0(0):1–19, jul 2019. [215](#)