

正交饱和设计的统计分析

张 晓 琴

(华东师范大学统计系, 上海市, 200062; 山西大学数学科学学院, 太原市, 030006)

摘要

本文利用非中心 F 统计量对多水平的正交饱和设计进行了研究, 并且给出了方差以及非中心参数的一种估计, 通过示例得到了令人满意的结果.

关键词: 正交饱和设计, 显著因子, 非中心 F 统计量, 方差估计.

学科分类号: O212.

§ 1. 引言

在一个试验设计中, 当被考虑的因子(包括交互作用)个数多到使得需估计参数的个数达到可估参数的最大个数时, 这样的试验设计称为饱和设计. 当一个饱和设计又是一个正交设计时, 称为正交饱和设计. 在这种设计下, 若不进行重复试验, 各因子(包括交互作用)的自由度之和等于总试验次数减一, 从而不再有剩余的自由度可用于误差的估计. 这时, 虽然仍能估计出各因子的效应, 但却无法再用通常的方差分析来对因子进行显著性检验.

在效应稀疏原理的假设下, 为了分析无重复部分析因设计, 人们已经提出了许多的方法, 这些已知的方法主要是: [5] ~ [23]. 已有的相关方法可以很容易的用来分析二水平的正交饱和设计, 但是对于多水平的情况就不太方便了. 因此这就需要寻找其它的方法来解决.

本文为了解决上述问题, 采用大家都很熟悉的非中心 F 统计量来进行相关的分析, 同时对非中心参数给出了一个较好的估计. 本文的结构如下: § 2 重述正交饱和设计模型; § 3 给出本文的检验统计量及其分布; § 4 对非中心参数进行估计; § 5 给出示例来说明本文方法的有效性.

§ 2. 正交饱和设计的统计模型

对于给定的完全正交设计 $H = L_n(p^m) = (b_{ij})_{n \times m}$, 其中 n 为行数, m 为列数(因子个数), p 为水平数, $b_{ij} \in \{1, 2, \dots, p\}$. 相应于此正交设计 H , 我们取设计阵为 $X = (x_{ij})_{n \times m}$, 其中 $x_{ij} = x_j(b_{ij}) = (b_{ij} - 1) \cdot [2/(p-1)] - 1$ 为正交表 H 的元素的正交化变换, 即所有的 x_{ij} 的取值都是区间 $[-1, 1]$ 上包括 -1 和 1 在内的 p 个等分点. 具体来讲, 当 $p = 2$ 时, $x_{ij} = -1, 1$; 当 $p = 3$ 时, $x_{ij} = -1, 0, 1$; 当 $p = 4$ 时, $x_{ij} = -1, -1/3, 1/3, 1$; 等等.

对正交饱和设计问题, 通常可用如下的线性统计模型来描述:

$$y_i = \sum_{j=0}^m \beta_j x_{ij} + \varepsilon_i = \mu_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (1)$$

本文 2006 年 3 月 1 日收到, 2006 年 6 月 6 日收到修改稿.

其中

- β_0 是一般水平, $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$ 代表因子的主效应或某些需考察的交互效应, 它们都是待估参数;
- n 是试验次数, m 正交表的列数(因子个数);
- $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)'$ 是观测值向量;
- $x_0 = (x_{10}, x_{20}, \dots, x_{n0})' = \mathbf{1}_n$ 是元素均为 1 的 n 维列向量, $x_j = (x_{1j}, x_{2j}, \dots, x_{nj})'$, $j = 1, 2, \dots, m$ 由试验设计来确定. 矩阵 $X = (x_1, \dots, x_m)$ 为上述正交表 H 所对应的设计阵, 且 X 的各个元素 x_{ij} 之间有下面的关系成立:

$$\begin{cases} \bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij} = 0, & \frac{1}{r} \sum_{i \in H_{jk}} x_{ij} = 0, & \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij} x_{ij'} = 0, \\ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij}^2 = \frac{1}{r} \sum_{i \in H_{j'k}} x_{ij}^2 = W(p), & j, j' = 1, 2, \dots, m, & j \neq j'. \end{cases} \quad (2)$$

其中 $r = n/p$, $H_{jk} = \{i : b_{ij} = k, i = 1, 2, \dots, n\}$ 为因子 x_j 的水平 k 的 示性集合, $W(p) = (1/p) \sum_{k=1}^p x_j^2(k)$ 为因子 x_j 的 试验权重. 当各因子 x_j 的水平数分别为 p_j 时, 有 $W(p_j) = (1/p_j) \sum_{k=1}^{p_j} x_j^2(k)$, 即试验权重是相应的水平数 p_j 的函数. 当各个 p_j 都相同且都为 p 时, 对于给定的设计阵 X , $W(p)$ 是一个常数.

- $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)'$ 是误差向量. 假设
 - $\varepsilon_i, i = 1, 2, \dots, n$ 是相互独立同分布的随机变量, 且有 $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2 I_n)$;
 - 在 m 个因子中有 q ($1 \leq q < m$) 个非零效应的因子, 即 $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m$ 中有 q 个不等于零. 为以后叙述方便, 上述模型 (1) 及其相关的假设统称为模型 (1).

易见, 上述模型 (1) 为多元线性回归模型, 其中 $\beta = (\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_m)'$ 为未知参数. 且其最小二乘估计为:

$$\hat{\beta} = \left(\frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}, \frac{\sum_{i=1}^n x_{i1} y_i}{\sum_{i=1}^n x_{i1}^2}, \dots, \frac{\sum_{i=1}^n x_{im} y_i}{\sum_{i=1}^n x_{im}^2} \right)' = \left(\frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n}, \frac{\sum_{i=1}^n x_{i1} y_i}{nW(p)}, \dots, \frac{\sum_{i=1}^n x_{im} y_i}{nW(p)} \right)'. \quad (3)$$

且由高斯-马尔可夫定理知, $\hat{\beta}$ 是 β 的最小方差线性无偏估计. 且有 $\hat{\beta}_j \sim N(\beta_j, \tau^2)$, $j = 1, 2, \dots, m$, 其中

$$\tau^2 = \frac{\sigma^2}{x_j' x_j} = \frac{\sigma^2}{nW(p)}, \quad (4)$$

且 $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_m$ 是相互独立的统计量.

我们的任务是, 利用 n 个观测值 y_1, y_2, \dots, y_n , 借助某个方法来判断, 在 m 个效应中是否存在着显著效应, 也就是对假设

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \dots = \beta_m = 0 \quad \text{vs} \quad H_1 : \text{诸 } \beta_j \text{ 不全为零}$$

进行检验. 若 H_0 被拒绝, 则说明有显著性因子存在. 然后再确定哪些因子是显著的. 这也相当于我们考虑如下的假设检验问题:

$$H_{j0} : \beta_j = 0 \quad \text{vs} \quad H_{j1} : \beta_j \neq 0, \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (5)$$

《应用概率统计》版权所有

§ 3. 检验统计量及其分布

3.1 检验统计量

由于模型 (1) 是基于正交饱和设计, 故此时的误差平方和等于 0, 从而其总平方和 SS_T 与各列的效应平方和 SS_j 之间有如下总平方和分解公式:

$$SS_T = SS_1 + SS_2 + \cdots + SS_m, \quad f_T = f_1 + f_2 + \cdots + f_m.$$

其中 $SS_T = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n y_i^2 - n\bar{y}^2$, $\bar{y} = (1/n) \sum_{i=1}^n y_i$; $SS_j = r \sum_{k=1}^p (\hat{\mu}_{jk} - \bar{y})^2$, $\hat{\mu}_{jk} = (1/r) \sum_{i \in H_{jk}} y_i$; $f_T = n - 1$ 为总平方和自由度, $f_j = p - 1$ 为第 j 列平方和的自由度, $j = 1, 2, \dots, m$.

我们知道, 平方和除以自己的自由度称为均方和. 从而因子 x_j 的均方和为:

$$MS_j = \frac{SS_j}{p-1}, \quad (6)$$

而 $SS_T - SS_j$ 的均方和为:

$$MS_T - MS_j = \frac{SS_T - SS_j}{n-p}. \quad (7)$$

在模型 (1) 下有 $y_i \sim N(\mu_i, \sigma^2)$, 从而易见 $\bar{y} \sim N(\bar{\mu}, \sigma^2/n)$, $\hat{\mu}_{jk} \sim N(\mu_{jk}, \sigma^2/r)$, 其中 $\bar{\mu} = (1/n) \sum_{i=1}^n \mu_i = \beta_0$, $\mu_{jk} = (1/r) \sum_{i \in H_{jk}} \mu_i = \beta_0 + \beta_j x_j(k)$. 所以

$$\mathbb{E}(SS_T) = \mathbb{E}\left(\sum_{i=1}^n y_i^2 - n\bar{y}^2\right) = \sum_{i=1}^n \mathbb{E}(y_i^2) - n\mathbb{E}(\bar{y}^2) = (n-1)\sigma^2 + \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2.$$

注意到

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2 &= \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m \beta_j x_{ij} \right)^2 = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^m \beta_j^2 x_{ij}^2 + \sum_{j \neq j'} \beta_j x_{ij} \beta_{j'} x_{ij'} \right) \\ &= \sum_{j=1}^m \beta_j^2 \sum_{i=1}^n x_{ij}^2 + \sum_{j \neq j'} \beta_j \beta_{j'} \sum_{i=1}^n x_{ij} x_{ij'} = nW(p) \sum_{j=1}^m \beta_j^2, \end{aligned}$$

所以

$$\mathbb{E}(SS_T) = (n-1)\sigma^2 + \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2 = (n-1)\sigma^2 + nW(p) \sum_{j=1}^m \beta_j^2. \quad (8)$$

又注意到

$$\begin{aligned} SS_j &= r \sum_{k=1}^p (\hat{\mu}_{jk} - \bar{y})^2 = r \sum_{k=1}^p (\hat{\mu}_{jk}^2 - 2\hat{\mu}_{jk}\bar{y} + \bar{y}^2) \\ &= r \sum_{k=1}^p \left(\frac{1}{r} \sum_{i \in H_{jk}} y_i \right)^2 - 2r\bar{y} \sum_{k=1}^p \frac{1}{r} \sum_{i \in H_{jk}} y_i + n\bar{y}^2 \\ &= \frac{1}{r} \sum_{k=1}^p \left(\sum_{i \in H_{jk}} y_i \right)^2 - n\bar{y}^2 = \frac{1}{r} \sum_{k=1}^p \left(\sum_{i \in H_{jk}} y_i^2 + 2 \sum_{i < i' \in H_{jk}} y_i y_{i'} \right) - n\bar{y}^2, \end{aligned}$$

所以有

$$\begin{aligned}
 E(SS_j) &= \frac{1}{r} \sum_{k=1}^p \left(\sum_{i \in H_{jk}} E(y_i^2) + 2 \sum_{i < i' \in H_{jk}} (E y_i)(E y_{i'}) \right) - n E(\bar{y}^2) \\
 &= \frac{1}{r} \sum_{k=1}^p \left(\sum_{i \in H_{jk}} (\sigma^2 + \mu_i^2) + 2 \sum_{i < i' \in H_{jk}} \mu_i \mu_{i'} \right) - n \left(\frac{\sigma^2}{n} + \bar{\mu}^2 \right) \\
 &= (p-1)\sigma^2 + r \sum_{k=1}^p (\mu_{jk} - \bar{\mu})^2 = (p-1)\sigma^2 + nW(p)\beta_j^2. \tag{9}
 \end{aligned}$$

从而

$$E(SS_T - SS_j) = (n-p)\sigma^2 + nW(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2. \tag{10}$$

由 (9), (10) 式知

$$E(MS_j) = \sigma^2 + \frac{n}{p-1} W(p) \beta_j^2, \quad E(MS_T - MS_j) = \sigma^2 + \frac{n}{n-p} W(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2,$$

从而可知, 当 (5) 的 H_{j0} 成立时, MS_j 为 σ^2 的无偏估计, 但是不论 H_{j0} 是否成立, $MS_T - MS_j$ 均为 σ^2 的有偏估计, 偏差为 $[n/(n-p)] \cdot W(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2$.

由上述分析可见, $MS_T - MS_j$ 与 MS_j 之比所形成的统计量

$$F_j = \frac{MS_T - MS_j}{MS_j} = \frac{(SS_T - SS_j)/(n-p)}{SS_j/(p-1)}, \tag{11}$$

在 (5) 的 H_{j0} 成立时是一个较大的量, 而当 H_{j0} 不成立时 F_j 的值较小. 因此这里我们就取 F_j 为检验统计量, 且当 F_j 小于某个临界值时, 就有理由拒绝 H_{j0} . 而要确定这个临界值, 就有必要确定 F_j 的分布.

3.2 检验统计量 F_j 的分布

记 $Y = (y_1, y_2, \dots, y_n)'$, 则由模型 (1) 知, $Y \sim N_n(\mu, \sigma^2 I_n)$, 其中 $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_n)'$, 记 $X = Y/\sigma$, 则 $X \sim N_n(\nu, I_n)$, 其中 $\nu = \mu/\sigma$.

为了推出检验统计量 F_j 的分布, 我们需要下述的相关定理.

引理 1 设 X_1, X_2, \dots, X_n 独立, $X_i \sim N(\mu_i, 1)$, $i = 1, 2, \dots, n$, $X = (X_1, X_2, \dots, X_n)'$, 设 A 为 n 阶对称方阵, 则 $X'AX$ 服从 (中心或非中心) χ^2 分布的充要条件是 A 为幂等阵. 当此条件成立时, $Y = X'AX \sim \chi^2_{r, \lambda}$, 此处 r 为 A 之秩 $\text{rk}(A)$, 而 $\lambda = \mu'A\mu$ 为非中心参数.

引理 2 (Cochran 引理) 设随机变量 $X \sim N_n(\mu, I_n)$, $X'AX = \sum_{j=1}^k Q_j$, 其中 $Q_j = X'A_jX$, $j = 1, 2, \dots, k$, 其中诸 A_j 都是对称阵, 并且 $\text{rk}(A) = r$, $\text{rk}(A_j) = r_j$, $j = 1, 2, \dots, k$, 则 $Q_j \sim \chi^2_{r_j, \lambda_j}$, 其中 $\lambda_j = \mu'A_j\mu$, $j = 1, 2, \dots, k$. 并且相互独立的充要条件是 A 为幂等阵, 并且 $r = \sum_{j=1}^k r_j$.

上述引理的证明可参见 [1]. 下面就来推导本文的检验统计量的分布.

(1) 令 P 表示如下的方阵

$$P = \begin{pmatrix} 1 - 1/n & -1/n & \cdots & -1/n \\ -1/n & 1 - 1/n & \cdots & -1/n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1/n & -1/n & \cdots & 1 - 1/n \end{pmatrix} = I_n - \frac{1}{n}\mathbf{1}_n\mathbf{1}'_n,$$

其中 $\mathbf{1}_n$ 表示分量全是 1 的 n 维列向量, I_n 表示 n 阶单位阵, 则

$$\frac{SS_T}{\sigma^2} = X'PX. \quad (12)$$

易验证: P 为幂等阵, 即 $P' = P$, $P^2 = P$, 并且 P 的秩 $\text{rk}(P) = \text{tr}(P) = (1 - 1/n) \cdot n = n - 1$, 由引理 1 知 $SS_T/\sigma^2 \sim \chi_{n-1, \lambda}^2$, 其中 $\lambda = \nu'P\nu = (1/\sigma^2) \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2 = nW(p)(1/\sigma^2) \sum_{j=1}^m \beta_j^2$.

(2) 若用 U_r 表示元素全为 $1/r - 1/n$ 的 r 阶方阵, 即

$$U_r = \begin{pmatrix} 1/r - 1/n & \cdots & 1/r - 1/n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1/r - 1/n & \cdots & 1/r - 1/n \end{pmatrix}_{r \times r},$$

或写为 $U_r = (1/r - 1/n)\mathbf{1}_r\mathbf{1}'_r$, 令 P_1 表示如下分块形式的 n 阶方阵:

$$P_1 = \begin{pmatrix} U_r & & & \\ & U_r & & \\ & & \ddots & \\ & & & U_r \end{pmatrix}_{n \times n},$$

空白处的元素全为 $-1/n$, 则

$$\frac{SS_j}{\sigma^2} = X'P_1X. \quad (13)$$

易验证: P_1 为幂等阵, 并且 P_1 的秩 $\text{rk}(P_1) = \text{tr}(P_1) = p \cdot \text{tr}(U_r) = n \cdot (1/r - 1/n) = p - 1$. 由引理 1 知 $SS_j/\sigma^2 \sim \chi_{p-1, \lambda_j}^2$, 其中 $\lambda_j = \nu'P_1\nu = (1/\sigma^2)r \sum_{k=1}^p (\mu_{jk} - \bar{\mu})^2 = nW(p)(1/\sigma^2)\beta_j^2$.

(3) 若用 P_2 表示如下分块形式的 n 阶方阵:

$$P_2 = \begin{pmatrix} I_r - (1/r)\mathbf{1}_r\mathbf{1}'_r & & & \\ & I_r - (1/r)\mathbf{1}_r\mathbf{1}'_r & & \\ & & \ddots & \\ & & & I_r - (1/r)\mathbf{1}_r\mathbf{1}'_r \end{pmatrix}_{n \times n},$$

空白处的元素全为 0, 则

$$\frac{SS_T - SS_j}{\sigma^2} = X'P_2X, \quad (14)$$

易验证: P_2 为幂等阵, 并且 P_2 的秩 $\text{rk}(P_2) = \text{tr}(P_2) = p \cdot \text{tr}[I_r - (1/r)\mathbf{1}_r\mathbf{1}'_r] = n \cdot (1 - 1/r) = n - p$. 由引理 1 知 $(SS_T - SS_j)/\sigma^2 \sim \chi_{n-p, \lambda-\lambda_j}^2$, 其中

$$\lambda - \lambda_j = \nu' P_2 \nu = \frac{1}{\sigma^2} n W(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2. \quad (15)$$

(4) 因为 $n - 1 = (p - 1) + (n - p)$, 由引理 2 知, (11) 和 (12) 相互独立, 且当 H_{j0} 成立时, 检验统计量

$$F_j = \frac{(SS_T - SS_j)/(n - p)}{SS_j/(p - 1)} = \frac{[(SS_T - SS_j)/\sigma^2]/(n - p)}{(SS_j/\sigma^2)/(p - 1)}$$

中 $SS_j/\sigma^2 \sim \chi_{p-1}^2$, $(SS_T - SS_j)/\sigma^2 \sim \chi_{n-p, \lambda-\lambda_j}^2$, 此时我们发现, 检验统计量 F_j 正好是自由度为 $(n - p, p - 1)$ 的非中心参数为 $\nu_j = \lambda - \lambda_j$ 的非中心 F 分布.

对于分子自由度为 n_1 , 分母自由度为 n_2 的非中心 F 分布, 当非中心参数已知时, 可以借助于 SAS 系统中的 F 分布的分位数函数 $\text{finv}(\alpha, n_1, n_2, \mu)$ 来计算其相应的分位数. 上面函数计算的是分子自由度为 n_1 , 分母自由度为 n_2 , 非中心参数为 μ 的非中心 F 分布的 α 分位数. 例如: $\text{finv}(0.95, 2, 10, 3.2) = 7.5838$. 当非中心参数未知时, 就需要首先想办法来估计它. 下面就给出本文的解决方法.

§ 4. 非中心参数 $\nu_j = \lambda - \lambda_j$ 的估计

由 (15) 知

$$\nu_j = \lambda - \lambda_j = \frac{1}{\sigma^2} n W(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2,$$

因此要估计 $\nu_j = \lambda - \lambda_j$, 就需要估计 σ^2 和 $n W(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2$. 下面我们分别给出解决方法.

4.1 σ^2 的估计

在模型 (1) 下, 由 (8) 式可见: 若记

$$\begin{aligned} \Lambda^2 &= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\mu_i - \bar{\mu})^2 \\ &= \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \beta_j^2, \end{aligned} \quad (16)$$

则有 $E(\Lambda^2) = \sigma^2$. 即可以认为在 $[1/(n-1)] \cdot n W(p) \sum_{j=1}^m \beta_j^2$ 已知的条件下, Λ^2 是 σ^2 的无偏估计, 且这里 Λ^2 非负. 但问题是这里的各个 β_j 未知, 需要事先被估计出来. 这个问题应该是很好解决的. 因为我们在前面的 (8) 式中已经给出了 β_j 的最小二乘估计: $\hat{\beta}_j = \sum_{i=1}^n x_{ij} y_i / [n W(p)]$, $j = 1, 2, \dots, m$. 所以我们可以用 $\hat{\beta}_j$ 来代替 (16) 式中的 β_j 对 Λ^2 进行修正. 且不妨记修正的 Λ^2 为 $\tilde{\Lambda}^2$, 且

$$\tilde{\Lambda}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \hat{\beta}_j^2.$$

首先由于 $\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_m$ 相互独立, 且 $\hat{\beta}_j \sim N(\beta_j, \sigma^2/[n W(p)])$, $j = 1, 2, \dots, m$, 故

$$E\left(\frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \hat{\beta}_j^2\right) = \frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \left(\beta_j^2 + \frac{\sigma^2}{n W(p)}\right) = \frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \beta_j^2 + \frac{m}{n-1} \sigma^2.$$

所以

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(\tilde{\Lambda}^2) &= \mathbb{E}\left(\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \hat{\beta}_j^2\right) \\ &= \frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \beta_j^2 + \sigma^2 - \frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \beta_j^2 - \frac{m}{n-1} \sigma^2 \\ &= \left(1 - \frac{m}{n-1}\right) \sigma^2 = \left(1 - \frac{1}{p-1}\right) \sigma^2 = \frac{p-2}{p-1} \sigma^2.\end{aligned}\quad (17)$$

这里用到了 $m = (n-1)/(p-1)$, 且要求 $p > 2$.

注意到修正后的 $\tilde{\Lambda}^2$ 不再是 σ^2 的无偏估计, 所以此基础上需要进行修偏. 由 (17) 式可知,

$$\mathbb{E}\left(\frac{p-1}{p-2} \tilde{\Lambda}^2\right) = \sigma^2.$$

所以修偏后的 σ^2 的无偏估计取为:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{p-1}{p-2} \tilde{\Lambda}^2 = \frac{p-1}{p-2} \left(\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \hat{\beta}_j^2 \right), \quad p > 2. \quad (18)$$

其中 $\hat{\beta}_j = \sum_{i=1}^n x_{ij} y_i / [n W(p)]$, $j = 1, 2, \dots, m$.

4.2 $W(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2$ 的估计

同样的道理, 由于我们已经求出了 β_j , $j = 1, 2, \dots, m$ 的最小二乘估计 $\hat{\beta}_j$ (见 (3)), 所以可用下式来估计 $\delta_j = W(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2$:

$$\tilde{\delta}_j = n W(p) \sum_{l \neq j} \hat{\beta}_l^2. \quad (19)$$

显然此时有:

$$\mathbb{E}(\tilde{\delta}_j) = \mathbb{E}\left(n W(p) \sum_{l \neq j} \hat{\beta}_l^2\right) = n W(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2 + (m-1)\sigma^2 = \delta_j + (m-1)\sigma^2.$$

即 $\tilde{\delta}_j$ 是 δ_j 的有偏估计, 偏差为 $(m-1)\sigma^2$, 且这里的 σ^2 是未知的, 我们可以用上面 (18) 式的 $\hat{\sigma}^2$ 来估计. 这样可以得到 δ_j 的一个非负修偏估计为:

$$\hat{\delta}_j = n W(p) \sum_{l \neq j} \hat{\beta}_l^2 - (m-1)\hat{\sigma}^2. \quad (20)$$

4.3 非中心参数 $\nu_j = \lambda - \lambda_j$ 的估计

由上面的讨论可知, 结合 (18) 和 (20) 可以得到非中心参数 $\nu_j = \lambda - \lambda_j = (1/\sigma^2)n W(p) \sum_{l \neq j} \beta_l^2$ 的一个估计为:

$$\hat{\nu}_j = \frac{1}{\hat{\sigma}^2} n W(p) \sum_{l \neq j} \hat{\beta}_l^2 - (m-1). \quad (21)$$

其中

$$\hat{\beta}_j = \frac{\sum_{i=1}^n x_{ij} y_i}{n W(p)}, \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad \hat{\sigma}^2 = \frac{p-1}{p-2} \left(\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 - \frac{1}{n-1} n W(p) \sum_{j=1}^m \hat{\beta}_j^2 \right), \quad p > 2.$$

这样对于水平数大于 2 的正交饱和设计而言, 检验统计量 (11) 的非中心参数的估计问题就解决了. 下面我们通过示例来说明本文方法的有效性.

§ 5. 示 例

例 1 现在我们考虑一个基于 $L_{27}(3^{13})$ 的 3 水平的正交饱和设计, 共有 13 个因子. 在这 13 个因子中, 其真实效应非零的因子是 8 个, 分别是: $\beta_1 = \beta_2 = 2, \beta_3 = \beta_4 = \beta_5 = 1.5, \beta_6 = \beta_7 = 3, \beta_8 = 1$, 而 $\beta_0 = 10, \beta_9 = \cdots = \beta_{13} = 0$. 对应的模型为: $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_{13} x_{13} + \varepsilon$, 其中 $\varepsilon \sim N(0, 1)$. 我们先用计算机产生 27 个标准正态分布的随机数 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{27}$, 记 $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{27})'$, 再按上述模型得观测值向量 $y = (y_1, y_2, \dots, y_{27})' = (1_{27}, X)\beta + \varepsilon$. 在这里, $p = 3, W(p) = 2/3, x_{ij}$ 的取值为: -1, 0, 1. 按照本文所讲方法可以算得 $\hat{\sigma} = 1.03847$, 各因子效应的最小二乘估计值、对应的非中心 F 统计量 F_j 及其非中心参数 $\hat{\nu}_j$, 计算结果见表 1. 这里举例说明计算过程. 例如

$$F_1 = \frac{(SS_T - SS_1)/24}{SS_1/2} = 0.5761, \quad \hat{\nu}_1 = \frac{1}{1.03847} \cdot 27 \cdot \frac{2}{3} \cdot \sum_{i=2}^{15} \hat{\beta}_i^2 - 12 = 609.$$

若取 $\alpha = 0.01$, 查附表知: $x_{0.01}(24, 2, 600) = 5.5641, x_{0.01}(24, 2, 650) = 6.0164$, 从而由线性插值公式 (参见附表中 (22) 式) 可算得 $x_{0.01}(24, 2, 609) = 5.651$. 可见此时 $F_1 = 0.5761 < 5.651$, 因此第一个因子显著. 其它的计算类似. 从而 $\alpha = 0.01$ 时选出了所有显著性因子: 因子 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8.

表 1

序号	$\hat{\beta}_j$	$\hat{\nu}_j$	F_j
1	1.971	609	0.5761
2	1.804	623	0.7166
3	1.243	663	1.5719
4	1.572	641	0.9777
5	1.590	641	0.9554
6	2.890	505	0.2219
7	2.680	532	0.2813
8	1.060	673	2.2487
9	0.003	699	33.1402
10	0.279	697	8.626
11	0.012	699	63.8094
12	-0.504	693	10.2309
13	-0.212	698	50.8518

表 2

序号	$\hat{\beta}_j$	$\hat{\nu}_j$	F_j
1	2.1578	214	0.1256
2	2.5464	153	0.0698
3	0.0697	371	30.4098
4	-0.2278	370	8.5336
5	-0.2467	369	4.8244
6	0.0202	371	11.1766
7	0.0067	371	448.122
8	0.1707	370	30.1728
9	0.1332	371	36.8909
10	-0.1464	370	35.3855
11	-0.0579	371	154.643
12	0.0488	371	402.085
13	0.2388	370	6.95258

例 2 仍然考虑例 1 的模型, 不同的是假设其真实效应非零的因子是 2 个, 分别是: $\beta_1 = 2, \beta_2 = 3$, 而 $\beta_0 = 10, \beta_9 = \cdots = \beta_{13} = 0$. 其余的完全类似于例 1. 此时 $\hat{\sigma} = 0.86043$, 而且在 $\alpha = 0.01$ 时能选出所有显著性因子: 因子 1、因子 2. 计算结果见表 2.

例 3 假如现在我们考虑一个基于 $L_{25}(5^6)$ 的 5 水平的正交饱和设计, 共有 6 个因子. 在这 6 个因子中, 其真实效应非零的因子是 3 个, 分别是: $\beta_1 = 1.5, \beta_2 = 2, \beta_3 = 2.5$, 而 $\beta_0 = 8, \beta_4 =$

$\beta_5 = \beta_6 = 0$. 对应的模型为: $y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 + \beta_5 x_5 + \beta_6 x_6 + \varepsilon$, 其中 $\varepsilon \sim N(0, 1)$. 我们先用计算机产生 25 个标准正态分布的随机数 $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{25}$, 记 $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{25})'$, 再按上述模型得观测值向量 $y = (y_1, y_2, \dots, y_{25})' = (\mathbf{1}_{25}, X)\beta + \varepsilon$. 在这里, $p = 5$, $W(p) = 1/2$, x_{ij} 的取值为: $-1, -1/2, 0, 1/2, 1$. 已算得各因子效应的最小二乘估计值, 见表 3. 按照本文的方法计算的结果也列于表 3. 这里 $\hat{\sigma} = 1.11777$. 取 $\alpha = 0.01$, 可以选出所有显著性因子: 因子 1, 2, 3.

表 3

序号	$\hat{\beta}_j$	$\hat{\nu}_j$	F_j
1	1.431	97	0.96044
2	1.829	84	0.61667
3	2.650	48	0.16856
4	-0.030	118	22.6765
5	-0.031	118	10.3444
6	-0.061	118	15.9295

讨论 本文的方法在进行正交饱和设计的统计分析时, 对于水平数大于 2 的多水平情况, 不论因子个数的多少和实际的显著因子的多少都适用, 都能够相当准确地选出所有的显著因子. 而且作者已经制出了非中心 F 统计量的分位数表, 使其使用更为简便明了 (篇幅所限, 本文仅给出了所列的几个例子所需的表). 本文方法的不足之处在于: 关于非中心参数的估计是分两部分给出的, 这样不便于讨论其统计性质. 因此关于非中心参数的估计问题还值得深入研究.

参 考 文 献

- [1] 王万中, 茹诗松, 实验的设计与分析, 华东师范大学出版社, 1997.
- [2] 茹诗松, 周纪芳, 陈颖, 试验设计, 中国统计出版社, 2004.
- [3] 高惠璇, 统计计算, 北京大学出版社, 1995.
- [4] Montgomery, D.C., 试验设计与分析 (第三版), 汪仁官, 陈荣昭译, 中国统计出版社, 1998.
- [5] Benski, H.C., Use of a normality test to identify significant effects in factorial designs, *Journal of Quality Technology*, **21**(1989), 174–178.
- [6] Berk, K.N., Picard, R.R., Significance tests for saturated orthogonal arrays, *Journal of Quality Technology*, **23**(1991), 79–89.
- [7] Bissell, A.F., Interpreting mean squares in saturated fractional designs, *Journal of Applied Statistics*, **16**(1989), 7–18.
- [8] Bissell, A.F., Mean squares in saturated fractional designs revisited, *Journal of Applied Statistics*, **19**(1992), 351–366.
- [9] Box, G.E.P., Meyer, R.D., An analysis for unreplicated fractional factorials, *Technometrics*, **28**(1986), 11–18.
- [10] Box, G.E.P., Hunter, W.G., Hunter, J.S., *Statistics for Experimenters*, John Wiley, New York, 1978.
- [11] Chen, Y., Kunert, J., A new quantitative method for analyzing unreplicated factorial designs, *Biometrical Journal*, **46**(2004), 125–140.
- [12] Daniel, C., Use of half-normal plots in interpreting factorial two-level experiments, *Technometrics*, **1**(1959), 311–341.

- [13] Haaland, P.D., O'Connell, M.A., Inference for effect-saturated fractional factorials, *Technometrics*, **37**(1995), 82–93.
- [14] Hamada, M., Balakrishnan, N., Analyzing unreplicated factorial experiments: A review with some new proposals, *Statistica Sinica*, **8**(1998), 1–41.
- [15] Holms, A.G., Berrettoni, J.N., Chain-pooling ANOVA for two-level factorial replicationfree experiments, *Technometrics*, **11**(1969), 725–746.
- [16] Lenth, R.V., Quick and easy analysis of unreplicated factorials, *Technometrics*, **31**(1989), 469–473.
- [17] Loughin, T.M., Noble, W., A permutation test for effects in an unreplicated factorial design, *Technometrics*, **39**(1997), 180–190.
- [18] Schneider, H., Kasperski, W.J., Weissfeld, L., Finding significant effects for unreplicated fractional factorials using the n smallest contrasts, *Journal of Quality Technology*, **25**(1993), 18–27.
- [19] Schoen, E.D., Kaul, E.A.A., Three robust scale estimators to judge unreplicated experiments, *Journal of Quality Technology*, **32**(2000), 276–283.
- [20] Venter, J.H., Steel, S.J., A hypothesis-testing approach toward identifying active contrasts, *Technometrics*, **38**(1996), 161–169.
- [21] Ye, K.Q., Hamada, M., Wu, C.F.J., A step-down lenth method for analyzing unreplicated factorial designs, *Journal of Quality Technology*, **33**(2001), 140–152.
- [22] Zahn, D.A., Modifications of and revised critical values for the half-normal plot, *Technometrics*, **17**(1975a), 189–200.
- [23] Zahn, D.A., An empirical study of the half-normal plot, *Technometrics*, **17**(1975b), 201–211.

The Statistical Analysis of Orthogonal Saturated Design

ZHANG XIAOQIN

(Department of Statistics, East China Normal University, Shanghai, 200062)

(College of Mathematics Science, Shanxi University, Taiyuan, 030006)

The paper uses the non-central F statistic to research the multi-levels orthogonal saturated design, and has produced a kind of estimate about the variance and the non-central parameter. Some satisfying results are obtained when it is applied in the orthogonal saturated design.

附表

下面为统计量 $F_j = [(SS_T - SS_j)/(n - p)]/[SS_j/(p - 1)]$ 的分位数表. 即表中的数据为满足 $P(F_j \leq x_\alpha(n - p, p - 1, \nu)) = \alpha$ 中的 $x_\alpha(n - p, p - 1, \nu)$. 而表中 ν 为相应的非中心参数. 因为非中心参数 ν 的取值范围是 $[0, +\infty)$, 但表中不可能把所有的情况都列出来, 对于表中没有列出的分位数, 我们可以通过下面的插值公式来解决: 若已在表中查得 $x_\alpha(n - p, p - 1, \nu_1)$, $x_\alpha(n - p, p - 1, \nu_2)$, $\nu_1 < \nu_2$, 欲求 $x_\alpha(n - p, p - 1, \nu)$, $\nu_1 < \nu < \nu_2$, 则

$$x_\alpha(n - p, p - 1, \nu) = x_\alpha(n - p, p - 1, \nu_1) - \frac{\nu - \nu_1}{\nu_2 - \nu_1} \cdot \frac{\nu_2}{\nu} [x_\alpha(n - p, p - 1, \nu_1) - x_\alpha(n - p, p - 1, \nu_2)]. \quad (22)$$

$$n - p = 24, \quad p - 1 = 2$$

α	ν											
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
0.01	0.1781	0.1856	0.1932	0.2008	0.2085	0.2163	0.2242	0.2322	0.2401	0.2482	0.2563	0.2644
0.025	0.2315	0.2412	0.2510	0.2609	0.2709	0.2810	0.2911	0.3013	0.3115	0.3218	0.3322	0.3426
0.05	0.2939	0.3062	0.3186	0.3311	0.3437	0.3563	0.3691	0.3819	0.3947	0.4077	0.4206	0.4337
0.1	0.3940	0.4104	0.4270	0.4437	0.4605	0.4773	0.4942	0.5112	0.5283	0.5454	0.5626	0.5798
α	ν											
	12	13	14	15	16	17	18	19	20	25	30	40
0.01	0.2726	0.2809	0.2891	0.2974	0.3058	0.3142	0.3226	0.3310	0.3395	0.3821	0.4253	0.5125
0.025	0.3530	0.3635	0.3741	0.3846	0.3952	0.4059	0.4165	0.4272	0.4380	0.4919	0.5463	0.6561
0.05	0.4467	0.4599	0.4730	0.4862	0.4994	0.5127	0.5260	0.5393	0.5526	0.6197	0.6872	0.8232
0.1	0.5971	0.6144	0.6318	0.6491	0.6666	0.6840	0.7015	0.7190	0.7366	0.8246	0.9131	1.0910
α	ν											
	50	60	70	80	90	100	150	200	250	300	350	400
0.01	0.6006	0.6893	0.7784	0.8677	0.9573	1.0470	1.4969	1.9480	2.3995	2.8513	3.3033	3.7553
0.025	0.7667	0.8779	0.9895	1.1014	1.2134	1.3256	1.8879	2.4514	3.0153	3.5794	4.1438	4.7082
0.05	0.9600	1.0974	1.2351	1.3731	1.5113	1.6496	2.3426	3.0367	3.7313	4.4262	5.1212	5.8163
0.1	1.2697	1.4490	1.6286	1.8085	1.9885	2.1688	3.0711	3.9746	4.8786	5.7828	6.6871	7.5916
α	ν											
	450	500	550	600	650	700	750	800	850	900	950	1000
0.01	4.2075	4.6596	5.1119	5.5641	6.0164	6.4687	6.9210	7.3733	7.8256	8.2779	8.7303	9.1826
0.025	5.2727	5.8373	6.4019	6.9665	7.5311	8.0958	8.6605	9.2251	9.7898	10.355	10.919	11.484
0.05	6.5115	7.2067	7.9020	8.5973	9.2926	9.9879	10.683	11.379	12.074	12.769	13.465	14.160
0.1	8.4961	9.4007	10.305	11.210	12.115	13.019	13.924	14.829	15.733	16.638	17.543	18.448
α	ν											
	1050	1100	1150	1200	1250	1300	1350	1400	1450	1500	1600	1700
0.01	9.6349	10.087	10.540	10.992	11.444	11.897	12.349	12.801	13.254	13.706	14.611	15.516
0.025	12.049	12.613	13.178	13.743	14.308	14.872	15.437	16.002	16.566	17.131	18.261	19.390
0.05	14.856	15.551	16.246	16.942	17.637	18.333	19.028	19.723	20.419	21.114	22.505	23.896
0.1	19.352	20.257	21.162	22.067	22.971	23.876	24.781	25.686	26.590	27.495	29.305	31.114
α	ν											
	1800	1900	2000	2100	2200	2500	3000	3500	4000	4500	5000	5500
0.01	16.420	17.325	18.230	19.135	20.039	22.754	27.278	31.801	36.325	40.849	45.373	49.897
0.025	20.520	21.649	22.779	23.908	25.038	28.426	34.074	39.721	45.369	51.016	56.664	62.312
0.05	25.287	26.677	28.068	29.459	30.850	35.023	41.977	48.931	55.885	62.840	69.794	76.748
0.1	32.924	34.733	36.543	38.352	40.162	45.590	54.638	63.686	72.734	81.781	90.829	99.877

$$n - p = 24, \quad p - 1 = 2$$

α	ν											
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
0.01	0.2257	0.2371	0.2487	0.2606	0.2726	0.2848	0.2972	0.3097	0.3224	0.3352	0.3481	0.3611
0.025	0.2845	0.2989	0.3135	0.3283	0.3433	0.3585	0.3738	0.3883	0.4050	0.4208	0.4367	0.4527
0.05	0.3489	0.3665	0.3843	0.4023	0.4206	0.4390	0.4576	0.4764	0.4953	0.5143	0.5335	0.5527
0.1	0.4447	0.4670	0.4896	0.5125	0.5355	0.5587	0.5821	0.6057	0.6294	0.6532	0.6771	0.7011
α	ν											
	12	13	14	15	16	17	18	19	20	25	30	40
0.01	0.3743	0.3875	0.4009	0.4143	0.4278	0.4414	0.4551	0.4688	0.4826	0.5524	0.6232	0.7670
0.025	0.4689	0.4851	0.5014	0.5178	0.5343	0.5509	0.5675	0.5842	0.6010	0.6855	0.7710	0.9441
0.05	0.5721	0.5916	0.6111	0.6307	0.6504	0.6702	0.6901	0.7100	0.7299	0.8304	0.9318	1.1367
0.1	0.7252	0.7495	0.7737	0.7981	0.8226	0.8471	0.8716	0.8963	0.9209	1.0450	1.1699	1.4215
α	ν											
	50	60	70	80	90	100	150	200	250	300	350	400
0.01	0.9128	1.0598	1.2076	1.3560	1.5048	1.6540	2.4023	3.1529	3.9045	4.6565	5.4089	6.1615
0.025	1.1190	1.2951	1.4719	1.6493	1.8271	2.0051	2.8979	3.7928	4.6886	5.5850	6.4816	7.3784
0.05	1.3432	1.5508	1.7591	1.9679	2.1770	2.3865	3.4361	4.4877	5.5402	6.5932	7.6464	8.6999
0.1	1.6746	1.9288	2.1835	2.4388	2.6944	2.9502	4.2316	5.5148	6.7989	8.0834	9.3681	10.653
α	ν											
	450	500	550	600	650	700	750	800	850	900	950	1000
0.01	6.9142	7.6670	8.4199	9.1728	9.9258	10.679	11.432	12.185	12.938	13.691	14.444	15.197
0.025	8.2753	9.1724	10.069	10.967	11.864	12.761	13.658	14.555	15.453	16.350	17.247	18.145
0.05	9.7534	10.807	11.861	12.914	13.968	15.022	16.076	17.130	18.184	19.238	20.291	21.345
0.1	11.938	13.223	14.508	15.794	17.079	18.364	19.649	20.935	22.220	23.505	24.791	26.076
α	ν											
	1050	1100	1150	1200	1250	1300	1350	1400	1450	1500	1600	1700
0.01	15.950	16.703	17.457	18.210	18.963	19.716	20.469	21.222	21.975	22.729	24.235	25.741
0.025	19.042	19.939	20.837	21.734	22.631	23.529	24.426	25.323	26.221	27.118	28.913	30.708
0.05	22.399	23.453	24.507	25.561	26.615	27.669	28.723	29.777	30.831	31.885	33.993	36.101
0.1	27.361	28.647	29.932	31.217	32.503	33.788	35.074	36.359	37.644	38.930	41.501	44.071
α	ν											
	1800	1900	2000	2100	2200	2500	3000	3500	4000	4500	5000	5500
0.01	27.248	28.754	30.260	31.767	33.273	37.792	45.324	52.856	60.388	67.920	75.452	82.984
0.025	32.502	34.297	36.092	37.887	39.681	45.066	54.040	63.013	71.987	80.961	89.935	98.909
0.05	38.208	40.316	42.424	44.532	46.640	52.964	63.504	74.044	84.584	95.124	105.66	116.20
0.1	46.642	49.213	51.784	54.355	56.926	64.638	77.493	90.347	103.20	116.06	128.91	141.76

《应用概率统计》版权所有