

现代应用数学方法丛书 7

正交与均匀试验设计

方开泰 马长兴 著

香港特区政府研究基金
香港浸会大学研究基金 资助

科学出版社

2001

内 容 简 介

正交试验设计是因子设计中流行最广的方法.均匀设计是一种新的因子设计,和正交设计相比具有更多的选择和灵活性.均匀设计又是用于大系统的电脑仿真试验设计方法之一,是能充满设计空间的设计,并且对探索试验结果(响应)和因素之间的模型有稳健性.本书介绍了上述两种试验设计的理论、模型、方法和应用.综述了近20年来均匀设计理论的发展.均匀性在正交设计、区组设计和超饱和设计中的重要应用.

本书可供实验工作者,数学和统计专业的大学生、研究生、教师参考.也可供从事市场、金融、社会科学及政策决策的问卷调查设计人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

正交与均匀试验设计/方开泰,马长兴著.-北京:科学出版社,2001

(现代应用数学方法丛书)

ISBN 7-03-009189-2

I. 正… II. ①方…②马… III. ①正交设计:试验设计(数学)
②均匀性-试验设计(数学) IV. O212.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 05576 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2001 年 9 月第 一 版 开本:850×1168 1/32

2001 年 9 月第一次印刷 印张:8 $\frac{1}{4}$

印数:1—3 000 字数:210 000

定价: 17.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈新欣〉)

献给我的妻子、女儿

李庭梅 方颖 方燕

——方开泰

献给我的妻子、儿子

杜月华 马凌楠

——马长兴

《现代应用数学方法丛书》编委会

名誉主编 胡国定

主 编 方开泰

副 主 编 程 侃

编 委 (以姓氏笔画为序)

井竹君 方开泰 冯士雍

毕 颖 沈世镒 应隆安

杨德庄 周子康 赵凤治

顾基发 程 侃

总 序

应用数学的发展与自然科学和社会科学广泛的交叉和渗透密切相关。一方面，它为形形色色的物理、化学、生物、社会等现象提供描述和分析的数学工具。另一方面，这些实际问题的解决又为数学学科的发展提供了动力和永不枯竭的源泉。许多成功的应用数学方法，如解非线性方程的牛顿-高斯法、曲线拟合的最小二乘法、线性规划的单纯形法等，成了当今应用数学工作者手中不可缺少的工具。它们之所以有如此强大的生命力，原因在于方法本身有坚实的理论基础，同时又有鲜明的应用背景，能用于不同的领域。因此，成功的应用数学方法是理论联系实际桥梁和纽带。

我国的数学要达到世界先进水平，要对人类有所贡献，重要的一点是要有一批独创的应用数学方法。《现代应用数学方法》丛书的出版，希望能为鼓励和促进我国的数学工作者创造或介绍更多的现代应用数学方法增加一个舞台。

这套丛书的宗旨是介绍现代应用数学方法。这些方法应该是目前世界上最先进的，或者是我国独创的，或者是国外已经普遍使用但国内知之甚少的方法。丛书着重阐明所介绍方法的应用背景和思想，避开深奥的数学论证，力求深入浅出、图文并茂。有数值及应用性的例子，使读者易于理解和使用，丛书要求短小精练，突出新的方法，不求齐全。书末所附的文献将指出方法的理论背景以及最近的进展，以便读者进一步深入研究。

本丛书的出版得到国家“天元”项目的资助，得到科学出版社的大力支持，是全体编委努力的成果。我们要特别感谢许多作者在百忙中为丛书撰写文稿，付出了辛勤的劳动。我们希望这套丛书的出版对我国应用数学的发展起到促进作用，衷心地希望丛

书成为广大读者的良师益友.

胡国定 (南开大学)

方开泰 (中国科学院应用数学所)

序 言

在科学实验与工农业生产中，经常要做实验．如何科学地做实验呢？解决这个问题有一个专门的学问，称为“试验设计”．

若一个实验中有 s 个因素需要考虑，每个因素取 q 个水平，则共有 q^s 个水平组合．若对每个水平组合做一次试验，则共需做 q^s 次试验．当 q^s 较大时，就难于实现了．我们往往只要从中选取一部分有代表性的试验来做，这种方法称为“部分因子实验法”．通常用的正交试验设计就是一种有效的部分因子实验法．

20 世纪 70 年代末，由于导弹设计的要求，提出了一个五因素的实验，其中每个因素的水平个数均要多于 10，而实验次数又要求不超过 50．方开泰与我一起研究了这个问题，我们将 50 年代末发展起来的“伪蒙特卡罗方法”移植来处理这个问题，取得了较好的效果，这样既解决了实验问题，也启发了一种新的试验设计途径，这就是所谓“均匀试验设计”的起源．方开泰与我长达 10 多年愉快而富有成效的合作从此开始了．我们的成果总结在我们的书“*Number-theoretic methods in statistics*” (Chapman & Hall, 1994) 之中，均匀试验设计也是一种部分因子设计．

往后的主要工作为这些方法进行深入的比较与分析．特别进行统计学的研究．方开泰与其合作者从多个角度进行了研究，取得了丰硕的成果．他们的成果总结在这本书里．

他们对正交设计进行了深入研究．实际上，正交试验设计的基点是以方差分析为统计模型，所以选出的代表点具有“均匀”与“整齐”的特点，其实质的优点就是试验点散布的均匀性．方开泰等证明了“任一正交设计一定是某一多项式回归模型的 D-最优设计”．

与正交设计相比，均匀设计给试验者更多的选择，从而可以

用更少的试验，即可获得所期望的结果。而且均匀设计是一种稳健试验设计，也是电脑仿真试验设计的重要方法之一。

首先的问题是如何度量一个有限集合的均匀度？通常都是用外尔（H. Wegl）意义下的偏差。但这一度量对试验设计所需的小样本不够灵敏。叶扶德（F. Hickernell）等人做了很好的工作。他们引进了一些更灵敏及便于计算的度量，特别是中心化 L_2 偏差 CD_2 。方开泰与温克尔（P. Winker）等用 CD_2 作为度量，将以往的均匀设计表作了重新计算。得到了散布更为均匀的小样本。方开泰又与穆克剂（R. Mukerjee）一起求出了 CD_2 与字长型之间对于 2 水平的因子设计的解析关系式。

方开泰等还从均匀性出发，得到了均匀设计与正交设计之间的比较与内在联系，并将均匀性与正交性相结合，提出了均匀正交设计。他们还考虑了均匀设计在区组设计与超饱和设计在质量工程中的应用及均匀设计内表与外表的计算程序等。

上述只是列举了方开泰及其合作者的部分工作，供读者阅读本书时注意。除此之外，本书附有详细的文献，可供需要了解工作细节的读者查阅。

均匀设计已发展了 20 多年，已逐步被国内外学者与工程师接受，并注意与重视。例如美国《统计百科全书》曾约请方开泰与我写过长达 6000 字的伪蒙特卡罗方法条目。最近拉奥（C. R. Rao）还约请方开泰为他主编的《统计手册》撰写一章介绍均匀设计及其在工业中的应用。可以预料，在今后的岁月中，均匀设计的理论与应用还会更蓬勃地发展。

最后，我愿意借此机会，对于多年与方开泰的合作与交往中，从他那里学得了统计学的知识及处理实际工业问题的方法，表示最衷心地感谢。我预祝本书的出版对我国在进一步开展试验设计与普及中起到更好的推动作用。

王 元

中国科学院数学研究所

2000 年 12 月 12 日

前 言

在工农业生产和科学试验中，特别是在高科技的发展中，试验是必不可少的。如何安排试验是一门大学问。试验安排得好，会事半功倍。如何科学地组织试验，包括许多环节：选题、精心挑选要考察的因素及其变化范围，如何决定因素的水平以及做试验的水平组合，试验中的技术细节和组织工作等等。这些环节，有的是属于管理科学，有的是需要数学和统计学的方法来设计试验方案，后者称为**统计试验设计**。

统计试验设计的方法很多，如单因素试验、双因素试验、随机区组试验、不完全区组试验、拉丁方试验、正交试验设计、最优试验设计、稳健试验设计、均匀试验设计等。每一种方法，有其特定的统计模型，统计学家要论证该方法在该统计模型下的优良性。这些内容形成了“统计试验设计”这个分支，迄今已有 80 年历史。

古典的试验设计方法，通常取的试验范围不很大，故可以用比较简单的统计模型来描绘。在诸方法中，正交试验设计是流行最广的一个。正交试验建立于方差分析模型的基础上，当因素的水平不多，试验范围不大时，是非常有效的试验设计方法。20 世纪 60 年代，田口玄一等日本统计学家将设计和数据分析表格化，使正交设计大大易于应用者的理解和使用。我国于 60 年代引进了田口玄一的方法，本书的第一作者于 1972 年提出了“直观分析法”将方差分析的思想体现于点图和极差计算之中，使正交设计的统计分析大大简化，对正交设计在我国的普及起了促进作用。在“优选法”普及的基础上，将正交设计法通过书籍、办班、成果展览会、现场参观、电视讲座等形式，使之在科学试验中“家喻户晓”。

随着系统工程和高科技的发展，**电脑仿真试验**成为统计试验设计的一个崭新的方向，要求“充满空间”（space filling）的试验设计方法．在 70 年代末，几乎是同时，出现了两个最有影响的方法：拉丁超立方体抽样（Latin hypercube sampling）和均匀设计（uniform design）．前者在西方流行，今年 2 月，国际权威刊物“Technometrics”庆祝该刊创办 40 年出版了一期专辑，其中选了近 40 年最有影响的三篇试验设计的论文，其中一篇就是 M. D. McKay, R. J. Beckman, and W. J. Conover 的第一次提出拉丁超立方体抽样的经典论文．均匀设计于 1978 年由王元和方开泰提出，目的是解决导弹弹道系统的指挥仪设计．20 多年来，均匀设计的理论发展迅速，应用十分广泛，国际同行对均匀设计给予充分肯定和关注．如近年来有关电脑仿真试验的综述 Bates, Buck, Riccomagno 和 Wynn (1996) 以及 Koehler 和 Owen (1996) 对均匀设计都给予肯定和好评．今年 Technometrics 刊登了本书第一作者和他的合作者介绍均匀设计的文章和近期的研究成果．著名的统计学家 C. R. Rao 主编的《统计手册》，邀请本书第一作者撰写一章介绍均匀设计的理论和在工业中的应用．显然，均匀设计已成为电脑仿真试验的主要方法之一．

有趣的是，均匀设计也可视为部分因子设计的方法之一．若一个试验中有 s 个因素，每个因素取 q 个水平，共有 q^s 个水平组合．当 q^s 太大时，使用者从中取一部分有代表性的水平组合来实施（做试验），这种方法称为**部分因子试验**．正交试验法是利用正交性来挑选部分的水平组合，而均匀设计是利用均匀性来挑选．正交性是希望每个因素的水平之间分配均衡，任两个因素的全部水平组合也分配均衡，**这种均衡性本质上也是均匀性**，因此正交设计和均匀设计应有许多共性，正交设计可视为均匀设计的特例．这是我们将这两种试验放在一起介绍的主要原因．

本书着重介绍正交试验设计和均匀试验设计的理论、方法和应用，介绍这两种试验的联系和各自的特点．考虑到电脑软件的发展和普及，有些方法的细节（如回归分析中的筛选变量技术，

统计诊断方法等)没有介绍. 本书想兼顾非统计专业的读者和统计专业的教师、研究生和大学生. 在方法介绍上, 尽量通俗, 希望非统计专业的读者能够易于理解; 在理论和最近发展的部分, 希望统计专业的读者能够了解当前研究的前沿. 非统计专业的读者需要有统计学的基础知识, 如回归分析、方差分析等. 对于想在这方面作研究的专业人士, 需要有统计专业硕士以上的水平.

本书共分四章. 第一章介绍试验设计的基本概念、模型、方差分析和回归分析方法及回归诊断. 第二章的前六节介绍正交试验设计的方法, 后两节综述正交设计的比较和 D -最优性. 第三章介绍均匀试验设计在部分因子设计及电脑仿真试验的应用, 不同的建模方法, 如多项式回归, B 样条和人工神经网络等. 该章还介绍了均匀试验设计在质量工程(即田口玄一的三次设计)和混料试验设计中的应用. 本书的最后一章讨论了均匀设计的优良性, 指出均匀设计是一种对模型的变化稳健的试验设计方法, 同时又是在非参数回归模型下的允许, minimax 设计, 和具有其他许多优点的一种设计. 该章还系统地介绍了均匀性在正交设计的比较和分类中的应用, 讨论了均匀性和正交性的关系和两种设计的密切联系. 进一步, 我们还介绍了均匀设计在构造超饱和设计、平衡不完全区组(BIB)等设计中的应用.

本书所附的均匀设计表都是以中心化 L_2 -偏差为均匀性测度的, 用随机优化中的门限接受法算出的. 我们非常感谢德国的 Peter Winker 博士为计算这些均匀设计表付出的精力和时间. 均匀设计表列出的有两类, 一类为 $U_n(n^s)$, 另一类为 $U_n(q^s)$, $q = 2, 3, 4, 5$. 有关的表太多, 我们精选了部分放在附录中, 更多的表可以通过网页 <http://www.math.hkbu.edu.hk/UniformDesign/> 获得, 或从均匀设计软件 4.0 版中获得. 后者是中国均匀设计学会与香港浸会大学统计学研究和咨询中心共同开发的.

本书的写作得到香港政府基金 RGC/97-98/47 和 RC/98-99/Gen-30 的资助, 得到我国著名科学家钱学森和周光召院士的许多鼓励和支持, 同时也得到香港浸会大学校长谢志伟博士、副校

长曾宪博教授以及理学院院长吴清辉教授的关心、鼓励和支持. 作者感谢中国科学院王元院士多年的合作、鼓励和帮助, 感谢香港浸会大学数学系系主任叶扶德 (Fred J. Hickernell) 教授和作者的愉快合作和始终不渝的支持, 特别是他在均匀性测度和均匀设计的稳健性方面的贡献. 作者感谢美洲统计学院院士、美国宾州大学林共进教授对均匀设计的支持、贡献和对本书提出的宝贵意见. 我们感谢为本书的理论和方法做过贡献的同事、学生和合作者: 陈令由、何伟文、李久坤、李润泽、梁逸曾、刘民千、卢贤巨、潘建新、覃红、沈世镒、田国梁、王柱、魏刚、谢民育、徐洪泉、许青松、许志强、杨振海、张金廷、张林、章渭基. 特别我们感谢李久坤和刘民千应邀为本书分别撰写了 § 3.9 和 § 4.7, § 4.8. 香港浸会大学数学系的技术员魏文忠、杨昌荣和林湘明的优质服务给我们创造了一个良好的电脑写作环境. 我们的研究一直得到中国均匀设计学会的大力支持, 借此机会我们感谢殷鹤龄、梁逸曾、刘永才、张建舟、杨洪元、王柱、杜明亮、刘秀芳、张承恩、曾绍钧的支持和帮助.

方开泰

香港浸会大学数学系

ktfang@hkbu.edu.hk

马长兴

南开大学统计学系

cxma@nankai.edu.cn

目 录

第一章 试验设计简介	1
§ 1.1 统计试验设计	1
§ 1.2 试验设计的统计模型	3
§ 1.3 回归分析和方差分析	6
§ 1.4 因素间的交互作用	13
§ 1.5 有重复试验的回归和方差分析	17
§ 1.6 回归分析中的变量筛选技术	20
§ 1.7 回归诊断	26
§ 1.8 广义线性模型	29
第二章 正交试验设计	35
§ 2.1 多因素试验	35
§ 2.2 正交表	40
§ 2.3 正交试验的统计模型和数据分析	43
§ 2.4 水平数不同的试验	51
§ 2.5 有交互作用的试验	56
§ 2.6 混杂现象与混杂技巧	63
§ 2.7 比较正交设计的优良性准则	66
§ 2.8 正交设计的 D -最优性	77
第三章 均匀试验设计	83
§ 3.1 引言	83
§ 3.2 均匀性度量	88
§ 3.3 均匀设计表的构造	93
§ 3.4 均匀设计在因子试验中的实施 (I)	103
§ 3.5 均匀设计在因子试验中的实施 (II)	107
§ 3.6 含有定性因素试验的均匀设计	110

§ 3.7 电脑仿真试验	113
§ 3.8 B 样条函数及其建模	120
§ 3.9 人工神经网络及其建模	128
§ 3.10 均匀设计在质量工程中的应用.....	135
§ 3.11 混料均匀设计.....	144
§ 3.12 均匀设计应用的广泛性.....	152
第四章 均匀性在因子和区组设计中的应用和均匀设计的优 良性.....	157
§ 4.1 均匀性和正交性	157
§ 4.2 均匀性与字长型的关系	163
§ 4.3 均匀性用于区分非同构类	169
§ 4.4 均匀正交表	175
§ 4.5 均匀设计的稳健性和偏差的一般定义	183
§ 4.6 均匀设计在回归模型中的优良性	188
§ 4.7 离散均匀性与正交性	195
§ 4.8 均匀性与区组设计	207
参考文献.....	212
索引.....	227
附录 均匀设计和正交设计表.....	231

第一章 试验设计简介

本章扼要地介绍部分试验设计的方法、思想和它们的数学模型.介绍了线性模型(包括方差分析模型、回归分析模型)和广义线性模型的理论和方法,筛选变量的技术和回归诊断.这些方法对其他几章是十分有用的.

§ 1.1 统计试验设计

科学试验是人们认识自然、了解自然的重要手段,许多重要的科学规律都是通过科学试验发现和证实的.在工农业生产中,希望通过试验达到优质、高产和低消耗.所以,科学试验是人类赖以生存和发展的重要手段.当试验比较简单时,人们凭经验就可以进行.随着科学和技术的发展,试验涉及的因素众多,它们之间的关系更加复杂,光凭经验已不能达到预期要求,于是产生了“试验设计”这个分支.设计一个试验涉及到目的、构思、试验方案、技术保证、分析数据以及组织管理等.本书只讨论与统计有关的方面,所以本章更为恰当的标题应为“统计试验设计简介”.

统计试验设计是统计学的重要分支,它能大量节省试验的次数.能将试验数据从随机误差的烟幕中去伪存真,抓住事物的规律.所以“一个精心设计的试验是认识世界的有效方法”(Atkinson and Donev (1992)).统计试验设计有如下要素:

A. 试验的目的

试验的目的是因时因地而异,不同的研究项目有不同的目的.在工农业生产中,高产、优质和低消耗是经常追求的目标.在化工、材料科学及食品工业中追求最佳配方.在科学研究中则比较

重视发现事物变化的规律. 在高科技仿真试验中, 追求用简单的统计模型来近似系统的复杂模型.

B. 因素、试验范围、响应

在一项试验中, 凡欲考察的变量称为**因素**, 如反应温度、压力、催化剂品种、施化肥量、水稻品种等. 若因素的取值可以在某一区间内连续变化时, 称为**定量因素**, 如反应温度、压力、施化肥量等; 若因素只能取有限个类别时, 称为**定性因素**, 如催化剂和水稻品种等. 因素被考察的范围称为**试验范围**. 在试验中未被考察的变量应当尽量固定, 它们在该试验中不称为因素. 在本书中, 因素常用 $A, B, C, \dots$ 或 $x_1, x_2, x_3, \dots$ 表示. 试验的结果称为**响应** (response) 或**输出** (output), 用 y 表示. 在试验范围内, 因素被考察的值称为**水平**. 例如, 若反应温度是因素 A , 它的试验范围取为 $80^{\circ}\text{C} \sim 200^{\circ}\text{C}$. 在此范围内若选择在 $80^{\circ}\text{C}, 120^{\circ}\text{C}, 160^{\circ}\text{C}, 200^{\circ}\text{C}$ 处试验, 则这些温度称为 A 的水平, 并记为 $A_1 = 80^{\circ}\text{C}, A_2 = 120^{\circ}\text{C}, A_3 = 160^{\circ}\text{C}, A_4 = 200^{\circ}\text{C}$.

试验的目的是研究因素以及因素间的交互作用对响应的影响和它们之间的关系. 一个好的试验设计, 是用最少的试验来获取响应和因素之间关系的最多信息.

C. 随机误差

在试验中总存在一些不可控制的因素, 如气温、湿度、原材料不够均匀、操作人员的差异等, 它们的综合作用称为**随机误差**. 由于随机误差的存在, 在“相同的”条件下做的试验, 其响应不尽相同, 它们的波动大小反映了随机误差的大小. 随机误差有时会干扰试验者的视线, 甚至误导试验的结论. 一个好的试验设计, 可以大大降低随机误差的干扰, 体现统计试验设计的威力. 而数理统计提供的各种数据分析方法, 可帮助试验者从错综复杂的数据中, 从随机误差的干扰中去伪存真, 找到客观存在的规律, 发现“庐山真面目”.

D. 统计模型

统计试验设计的诸方法之所以能够高效率,其主要原因之一是它们是在特定的数学模型下达到最优的方法.例如,“正交设计”是在特定的方差分析模型下达到最优,“最优设计”是在特定的回归模型下达到最优,而“均匀设计”是在特定的稳健回归模型下达到最优,详细讨论请见下节.

§ 1.2 试验设计的统计模型

试验设计是研究探索未知的方法,本世纪以来发展了丰富多采的试验设计方法,每一种方法都基于特定的统计模型.让我们用最简单的单因素试验来说明诸方法的思想 and 相应的模型.

例 1.1 在一项生物试验中,若响应 y 与因素 x 之间有威布尔生长曲线模型(参见图 1.1)

$$y = 1 - e^{-2x^2}, x \geq 0. \quad (1.1)$$

而试验者对 y 和 x 之间的关系一无所知,希望通过试验来揭示 y 与 x 之间的关系.下面是常见的几种方法和模型.

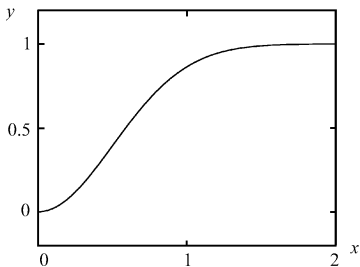


图 1.1 威布尔生长曲线模型

A. 方差分析模型

试验者选择 x 的若干个水平,并在这些水平下进行重复试验.例如取 4 个水平 $x=0, 2/3, 4/3, 2$,并在每个水平下作三次试验,其试验结果点在图 1.2 中,该试验的模型为

$$y_{ij} = \mu_j + \epsilon_{ij}, j = 1, 2, 3, 4, i = 1, \dots, n_j, \quad (1.2)$$

式中

y_{ij} :在水平 j 下的第 i 次试验的响应值;

n_j :在水平 j 下的试验重复数(本例 $n_j=3$);

μ_j :响应 y 在水平 j 下的真值;

ϵ_{ij} :在水平 j 下的第 i 次试验的随机误差.

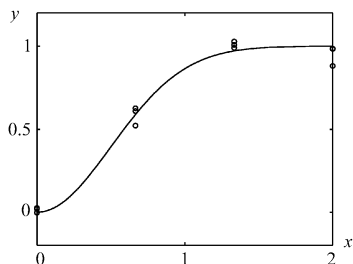


图 1.2 方差分析模型拟合

常设 $E(\epsilon_{ij})=0$, $\text{Var}(\epsilon_{ij})=\sigma^2$ (未知), $\{\epsilon_{ij}\}$ 相互独立. 通过试验结果 $\{y_{ij}\}$ 我们可以用最小二乘法估计出所有的 μ_j 及 σ^2 . 若已知随机误差 ϵ_{ij} 的概率分布, 也可用极大似然估计法估计出 μ_j 及 σ^2 . 令

$$\mu = \frac{1}{4}(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4),$$

$$\alpha_j = \mu_j - \mu, \quad j=1,2,3,4,$$

则模型(1.2)又可表示为

$$y_{ij} = \mu + \alpha_j + \epsilon_{ij}, \quad j=1,2,3,4, \quad i=1,2,3, \quad (1.3)$$

式中 α_j 称为因素 x 在水平 j 时的主效应, μ 称为响应的总均值, 显而易见,

$$\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 = 0. \quad (1.4)$$

当所有的 α_j 都接近于 0 时, 因素 x 对响应的影 响不大; 当 α_j 的值较大时, 表明因素 x 对响应的影 响大. 由于随机试验误差的大小会干扰试验的结果, 所以 α_j 值波动的大小必须与 σ 的大小作相对比较, 方差分析及其 F 检验就是进行这种相对比较, 根据 F 检验结果可给出关于因素对响应的影 响是否显著的结论, 详见下节. 一个好的试验设计就是用最少的试验对 α_j 和 σ^2 获得精度最佳的估计.

B. 回归模型

若试验者根据过去的经验, 认为 y 与 x 之间有回归模型, 例如

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \epsilon, \quad (1.5)$$

式中 $\beta_0, \beta_1, \beta_2$ 为回归系数, ϵ 为随机误差, $E(\epsilon) = 0, \text{Var}(\epsilon) = \sigma^2, \beta_0, \beta_1, \beta_2, \sigma^2$ 未知. 试验者希望通过试验来最准确地建立模型 (1.5), 即对 β_0, β_1 和 β_2 作最准确的估计, 根据这一要求来设计因素 x 的取值. 基于这一思想产生了“最优设计”, 这里“最优”是在一定的统计意义下定义的. 常见的有 D -最优, A -最优, E -最优等.

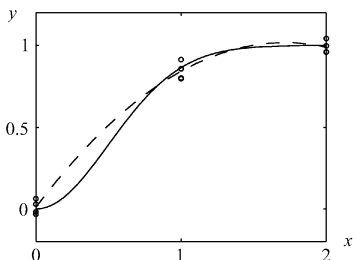


图 1.3 最优设计模型拟合

若试验范围选为 $[0, 2]$, D -最优建议在 $x = 0, 1, 2$ 各作 4 次试验, 图 1.3 给出了试验结果和模型 (1.5) 的拟合情形, 图中实线为真模型, 虚线为拟合模型.

C. 非参数回归模型

若试验者对模型没有太多的知识, 这时只能假定

$$y = g(x) + \epsilon, \quad (1.6)$$

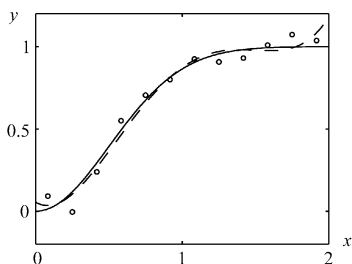


图 1.4 均匀设计模型拟合

式中函数 g 未知, ϵ 为随机误差, 常假定 $E(\epsilon) = 0, \text{Var}(\epsilon) = \sigma^2, \sigma^2$ 未知. 试验者希望通过试验来建立模型 (1.6). 由于 $g(x)$ 中未包含未知参数, 故 (1.6) 称为非参数回归模型. 一个好的试验设计能求得一个精度较高的估计 $\hat{g}(x)$, 均匀设计就是这样一种试验, 它将试验点在试验范围内均匀分布. 对例 1.1, 若试验范围取为 $[0, 2]$ 并决

定做 12 次试验, 则试验点取为 $\frac{1}{12}, \frac{3}{12}, \dots, \frac{23}{12}$, 试验结果及拟和情

况见图1.4. 图中实线为真模型,虚线为拟合模型.

D. 稳健回归模型

若试验者知道因素和响应之间为非线性回归模型,但具体的形式未知,他还进一步知道,真模型与二次模型相近,于是他采用模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + h(x) + \epsilon, \quad (1.7)$$

式中 $h(x)$ 为真模型与二次模型之差. 更一般的稳健回归模型为

$$y = f(x) + h(x) + \epsilon, \quad (1.8)$$

式中函数 f 已知,例如多项式, $h(x)$ 为模型偏差. 稳健回归设计是研究当模型偏差在某一确定范围时,如何给出试验点使之能最精确地建立模型(1.8). 可以证明,当 $h(x)$ 满足一定条件时,上面提到的均匀设计适用于这种模型.

§ 1.3 回归分析和方差分析

回归分析和方差分析是试验设计分析的主要工具,它们是统计线性模型的最重要组成成分. 介绍线性模型的理论和方法的书籍十分多,例如 Seber (1977), Myers (1990), Sen and Srivastava (1990), 方开泰等 (1988), 周纪芾 (1990) 等. 为了节省篇幅,本节将扼要介绍与本书有关的线性模型的理论 and 公式,以便于以后各章的叙述. 读者可以从其他文献中找到上述理论和公式的详细论证. 统计软件 SAS 和均匀设计软件提供了我们所需要的参数估计和假设检验的数值计算.

若在一项试验中,有 s 个因素 $x_1, \dots, x_s$, 其试验结果(响应)与因素间有如下的关系

$$y = \beta_1 g_1(x_1, \dots, x_s) + \dots + \beta_m g_m(x_1, \dots, x_s) + \epsilon, \quad (1.9)$$

式中函数 $g_1, \dots, g_m$ 已知, $\beta_1, \dots, \beta_m$ 为回归系数,未知, ϵ 为随机误差,均值为 0, 方差均为 σ^2 . σ^2 代表了试验的精度, σ^2 大表示试验误差大. 由于 $E(\epsilon) = 0$, 在文献中常将回归模型(1.9)表为

$$E(y) = \beta_1 g_1(x_1, \dots, x_s) + \dots + \beta_m g_m(x_1, \dots, x_s).$$

通过试验设计和相应的试验,获得了一组数据 $\{y_i, x_{i1}, \dots, x_{is}; i=1, \dots, n\}$,希望通过这组数据来最精确地估计回归系数 $\beta_1, \dots, \beta_m$ 和 σ^2 .在统计中,有许多有效的参数估计方法,其中最小二乘法一直在回归模型估计理论中占统治地位.将试验数据代入模型(1.9)中,得

$$y_i = \beta_1 g_1(x_{i1}, \dots, x_{is}) + \dots + \beta_m g_m(x_{i1}, \dots, x_{is}) + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

其中 ϵ_i 独立同分布.上模型可以表示成矩阵形式

$$y = G\beta + \epsilon, \quad (1.10)$$

式中

$$G = \begin{bmatrix} g_1(x_1) & \cdots & g_m(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ g_1(x_n) & \cdots & g_m(x_n) \end{bmatrix}, \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_m \end{bmatrix},$$

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{bmatrix}, x'_i = \begin{bmatrix} x_{i1} \\ \vdots \\ x_{is} \end{bmatrix}, i = 1, \dots, n.$$

矩阵 G 称为广义设计矩阵或结构矩阵,它既包含了试验设计的信息(即试验点 $x_i, i=1, \dots, n$),又包含了拟合模型的信息.

模型(1.9)包含了最常见的各种模型,如线性回归模型

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_s x_s + \epsilon, \quad (1.11)$$

通过原点(不含截矩)的线性回归模型

$$y = \beta_1 x_1 + \dots + \beta_s x_s + \epsilon, \quad (1.12)$$

二次回归模型

$$y = \beta_0 + \sum_{k=1}^s \beta_k x_k + \sum_{j=1}^s \sum_{k=j}^s \beta_{jk} x_j x_k + \epsilon, \quad (1.13)$$

当 $g_1(x_1, \dots, x_s)=1$ 时,模型(1.9)变为

$$y = \beta_1 + \beta_2 g_2(x_1, \dots, x_s) + \dots + \beta_m g_m(x_1, \dots, x_s) + \epsilon, \quad (1.14)$$

以及含有因素非线性项的回归模型,例如

$$y = \beta_0 + \beta_1 \log(x_1) + \beta_2 \exp\{-x_2\} + \beta_3 \sin(x_3) \cos(x_4) + \epsilon.$$

模型(1.10)的最小二乘估计为

$$\hat{\beta} = (G'G)^{-1} G'y, \quad (1.15)$$

A^{-1} 表示矩阵 A 的逆矩阵,这里要求矩阵 $G'G$ 非退化. 这个估计是无偏的,即 $E\hat{\beta} = \beta$, 它的协方差矩阵为

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (G'G)^{-1}, \quad (1.16)$$

式中 σ^2 取决于试验设备的精度、原材料的均匀性和试验环境的稳定性等. 而矩阵 $M \equiv G'G$ 包含了试验点和统计模型的信息,在文献中称为信息矩阵. 文献中,有的作者用 $\frac{1}{n}G'G$ 作为信息矩阵,以取消 n 的影响. 我们希望选择试验点使信息矩阵 M 越小越好. 基于这一思想就产生了最优设计,它是由 J. Kiefer 于 1959 年首先提出来的. 由于 M 是一个矩阵,如何比较两个信息矩阵的大小,可以有多种方法,这就产生了:

a) D -最优设计:取试验点使 M 的行列式达到极大;

b) A -最优设计:取试验点使 $\text{tr}(M^{-1})$ 达到极大,这里 $\text{tr}(A)$ 为 A 的对角线元素之和;

c) E -最优设计:取试验点使 M^{-1} 的最大特征根达到极小;

d) G -最优设计:取试验点使响应预报值的最大方差达到极小.

上述几个准则都有鲜明的统计意义,限于篇幅,我们不作详细介绍,详见 Atkinson and Donev (1992), Silvey (1980), Pukelsheim (1993)等.

误差方差 σ^2 的无偏估计为

$$s^2 = \hat{\sigma}^2 = (y - G\hat{\beta})'(y - G\hat{\beta}) / (n - m). \quad (1.17)$$

下面转入线性模型的假设检验. 这些检验包括:

a) 是否因素 $x_1, \dots, x_s$ 对 y 的变化有显著影响?

b) 是否某个特定因素 x_j 或某个特定的项 $g_i(x_1, \dots, x_s)$ 对 y

的变化有显著影响?

c)是否 $x_1, \dots, x_s$ 的某个线性组合或 $g_1, \dots, g_m$ 的某个线性组合对 y 的变化有显著影响?

为叙述方便,以模型(1.11)为例来介绍上述的检验.检验 a) 是检验假设

$$H_0: \beta_1 = \dots = \beta_s = 0, H_1: \beta_1, \dots, \beta_s \text{ 不全为零}, \quad (1.18)$$

检验 b)是要求检验假设

$$H_0: \beta_1 = 0, H_1: \beta_j \neq 0, \quad (1.19)$$

检验 c)可表为

$$H_0: C\beta = f, H_1: C\beta \neq f, \quad (1.20)$$

其中 C 为秩为 l 的 $l \times m$ 矩阵(这里 $l < m, m = s+1$), f 为 $l \times 1$ 的向量.

检验(1.18)式的常用方法是作方差分析,方差分析的主要思想是将响应的总平方和

$$SS_T = S_{yy} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (1.21)$$

分解为回归平方和

$$SS_R = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (1.22)$$

和残差平方和

$$SS_E = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2, \quad (1.23)$$

式中 $\bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$, $\hat{y}_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_s x_{is}$ 为 y_i 的估计值,这个平方和分解可表为

$$SS_T = SS_R + SS_E.$$

这三个平方和分别有自由度 $n-1$, s 和 $(n-1-s)$.用平方和除以相应的自由度所得的商称为平均平方和,简称均方,记为

$$MS_T = \frac{SS_T}{n-1}, MS_R = \frac{SS_R}{s}, MS_E = \frac{SS_E}{n-s-1}.$$

若假设(1.18)式成立, MS_R 和 MS_E 的期望值相同,故

$$F = \frac{MS_R}{MS_E} = \frac{SS_R/s}{SS_E/(n-s-1)} \tag{1.24}$$

可用来作检验(1.18)式. 用统计学语言来讲,当假设(1.18)式成立时,上述 F 应该服从 $F(s, n-s-1)$ 分布. 将上述计算和检验的结果列入一张“方差分析表”(表 1.1),表中最后一列的 p 值为大于(1.24)式算出的 F 值的概率. 若取 $\alpha=0.05$,当 $p<0.05$ 时,检验显著,否则不显著. 常取 $\alpha=0.05, 0.01$ 或 0.001 .

全相关系数或确定性系数

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_T} \tag{1.25}$$

常用来度量回归模型的拟合程度, R^2 接近于 1 时,拟合效果好.

表 1.1 方差分析表

方差来源	自由度	平方和	均方	F	p 值
回归	s	SS_R	MS_R	$\frac{MS_R}{MS_E}$	
误差	$n-s-1$	SS_E	MS_E		
总和	$n-1$	SS_T			

由于假设检验(1.19)式是(1.20)式的特例,我们只介绍检验假设(1.20)式的统计量,它也是用 F 检验,统计量为

$$F = \frac{(\hat{C\beta}-f)'[C(G'G)^{-1}C']^{-1}(\hat{C\beta}-f)}{ls^2}, \tag{1.26}$$

式中 s^2 由(1.17)式给出,

$$G = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1s} \\ 1 & x_{21} & \cdots & x_{2s} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{ns} \end{bmatrix}$$

当假设(1.20)式成立时, F 服从 $F(l, n-s-1)$.

由统计量(1.26)式不难获得检验(1.19)式的统计量,令 $C=$

$(0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$, 这里 1 在第 $j+1$ 维位置, $\mathbf{f}=0$, 代入(1.26)式得检验统计量

$$F_j = \frac{\hat{\beta}_j^2}{s^2 c_{j+1, j+1}}, \quad (1.27)$$

式中 $\hat{\beta}_j$ 为 β_j 的最小二乘估计, $c_{j+1, j+1}$ 是 $(\mathbf{G}'\mathbf{G})^{-1}$ 的第 $j+1$ 个对角元素. 该检验等价于用 t 检验, 统计量为

$$t_j = \frac{\hat{\beta}_j}{s \sqrt{c_{j+1, j+1}}}. \quad (1.28)$$

当假设(1.19)成立时, t_j 服从自由度为 $n-s-1$ 的 t 分布 $t(n-s-1)$. 在统计软件中, 一般都会对每个变量 x_j 给出它的 F_j 值或 t_j 值.

例 1.2 单因素试验

上节曾介绍了单因素试验的方差分析模型(1.3), 模型中 μ , α_1 , α_2 , α_3 , α_4 , σ^2 未知, 需要通过试验数据来估计.

模型(1.3)可表为线性模型 $\mathbf{y} = \mathbf{G}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$, 其中

$$\begin{pmatrix} y_{11} \\ y_{21} \\ y_{31} \\ y_{12} \\ y_{22} \\ y_{32} \\ y_{13} \\ y_{23} \\ y_{33} \\ y_{14} \\ y_{24} \\ y_{34} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{21} \\ \epsilon_{31} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{32} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{23} \\ \epsilon_{33} \\ \epsilon_{14} \\ \epsilon_{24} \\ \epsilon_{34} \end{pmatrix}$$

式中利用了 $\alpha_4 = -\alpha_1 - \alpha_2 - \alpha_3$ 的关系. 由(1.15)式通过代数运算, 不难求得 μ , α_1 , α_2 , α_3 和 α_4 的最小二乘估计为

$$\hat{\mu} = \bar{y} = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^4 y_j, \hat{\alpha}_j = \hat{y}_j - \bar{y}, j = 1, 2, 3, 4,$$

式中 $y_j = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 y_{ij}, j = 1, 2, 3, 4$. 由(1.16)式, 估计值 $\hat{\mu}, \hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3$ 的协方差矩阵为

$$\text{Cov}(\hat{\beta}) = \sigma^2 (\mathbf{G}'\mathbf{G})^{-1} = \sigma^2 \begin{bmatrix} \frac{1}{12} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{4} & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{12} \\ 0 & -\frac{1}{12} & \frac{1}{4} & -\frac{1}{12} \\ 0 & -\frac{1}{12} & -\frac{1}{12} & \frac{1}{4} \end{bmatrix}.$$

由此可得

$$\text{Var}(\hat{\mu}) = \frac{\sigma^2}{12}, \text{Var}(\hat{\alpha}_j) = \frac{\sigma^2}{4}, j = 1, 2, 3,$$

以及

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\alpha}_4) &= \text{Var}(\hat{\alpha}_1 + \hat{\alpha}_2 + \hat{\alpha}_3) \\ &= \text{Var}(\hat{\alpha}_1) + \text{Var}(\hat{\alpha}_2) + \text{Var}(\hat{\alpha}_3) \\ &\quad + 2 \text{Cov}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_2) + 2 \text{Cov}(\hat{\alpha}_1, \hat{\alpha}_3) + 2 \text{Cov}(\hat{\alpha}_2, \hat{\alpha}_3) \\ &= \frac{\sigma^2}{4}. \end{aligned}$$

由于 $\mu_j = \mu + \alpha_j$, 可用 $\hat{\mu}_j = \hat{\mu} + \hat{\alpha}_j = y_j$ 作为 μ_j 的估计, 它的方差

$$\text{Var}(\hat{\mu}_j) = \text{Var}(\hat{\mu} + \hat{\alpha}_j) = \frac{1}{12} \sigma^2 + \frac{1}{4} \sigma^2 = \frac{1}{3} \sigma^2,$$

与直观是一致的. 进一步, 我们希望检验因素对响应是否有显著的影响, 这就是检验

$$H_0: \alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = 0, H_1: \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4 \text{ 不全为 } 0. \quad (1.29)$$

这个检验与检验假设(1.18)式本质上是一样的, 通过公式(1.21)~(1.24)我们可以计算诸平方和和 F 统计量. 为此, 我们给出较一般的公式.

设因素 A 取了 q 个水平, 在第 j 个水平重复做了 n_j 次试验, 总共做了 $n = n_1 + \cdots + n_q$ 个试验. 该试验的方差分析模型为

$$y_{ij} = \mu_j + \epsilon_{ij} = \mu + \alpha_j + \epsilon_{ij}, j = 1, \dots, q, i = 1, \dots, n_j, \quad (1.30)$$

则 μ, μ_j, α_j 和 σ^2 的估计为

$$\hat{\mu} = \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^q \sum_{i=1}^{n_j} y_{ij} \quad (1.31)$$

$$\hat{\mu}_j = \bar{y}_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} y_{ij} \quad (1.32)$$

$$\hat{\alpha}_j = \hat{\mu}_j - \hat{\mu} = \bar{y}_j - \bar{y}, j = 1, \dots, q \quad (1.33)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-q} \sum_{j=1}^q \sum_{i=1}^{n_j} (y_{ij} - \bar{y}_j)^2. \quad (1.34)$$

总平方和为

$$S_{yy} = \sum_{j=1}^q \sum_{i=1}^{n_j} (y_{ij} - \bar{y})^2, \quad (1.35)$$

回归平方和现在成为因素 A 的平方和

$$SS_A = \sum_{j=1}^q n_j (\bar{y}_j - \bar{y})^2, \quad (1.36)$$

误差平方和的公式为

$$SS_E = \sum_{j=1}^q \sum_{i=1}^{n_j} (y_{ij} - \bar{y}_j)^2, \quad (1.37)$$

方差分析表1.1成为表1.2.

表 1.2 方差分析表

方差来源	自由度	平方和	均方	F	p 值
因素 A	$q-1$	SS_A	$MS_A = SS_A / (q-1)$	$\frac{MS_A}{MS_E}$	
误差	$n-q$	SS_E	$MS_E = SS_E / (n-q)$		
总和	$n-1$	S_{yy}			

§ 1.4 因素间的交互作用

在一个试验中,若有 $s (s > 1)$ 个因素且它们对响应的作用是

各自独立的,则称因素间无交互作用,相应的模型称为可加模型. 例如二因素(记为 A 和 B)的试验,若其方差分析模型为

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \epsilon_{ijk}, \quad (1.38)$$

$$i = 1, \dots, p, \quad j = 1, \dots, q, \quad k = 1, \dots, r,$$

其中 α_i 为因素 A 的主效应, β_j 为因素 B 的主效应, y_{ijk} 为水平组合 $A_i B_j$ 下第 k 次试验的响应值, ϵ_{ijk} 为该次试验的随机误差. 考虑 A 的两个不同的水平组合 i_1 和 i_2 , 其响应值的差

$$y_{i_1jk} - y_{i_2jk} = \alpha_{i_1} - \alpha_{i_2} + \epsilon_{i_1jk} - \epsilon_{i_2jk}$$

由 A 的主效应和随机误差所决定,与 B 取什么水平无关.

如果在一次试验中,不仅因素 A 和 B 对响应有影响,而且它们联合起来对响应也产生影响,这时模型可表为

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + \epsilon_{ijk}, \quad (1.39)$$

$$i = 1, \dots, p, \quad j = 1, \dots, q, \quad k = 1, \dots, r,$$

式中 $(\alpha\beta)_{ij}$ 表示水平组合 $A_i B_j$ 对 y 的交互作用. 我们用 $A \times B$ 表示 A 和 B 的交互作用.

例如,下面是两因素(A 和 B)二水平的两个试验 I 和 II 的响应值

	A_1	A_2		A_1	A_2
B_1	50	55	B_1	50	55
B_2	53	58	B_2	53	62

试验 I 在左边,当 A 从 A_1 变到 A_2 时指标都增加 5,与 B 的水平无关;同样,当 B 从 B_1 变到 B_2 时指标都增加 3,与 A 的水平无关,即

	$A_2 - A_1$		$B_2 - B_1$
B_1	5	A_1	3
B_2	5	A_2	3

而右边的试验 II 情况就不大一样,且看

	$A_2 - A_1$		$B_2 - B_1$
B_1	5	A_1	3
B_2	9	A_2	7

就是说 A 从 A_1 变到 A_2 引起响应变化的大小与 B 取什么水平有关,反之, B 的变化对响应的的影响与 A 取什么水平也有关系,这时 A 和 B 有交互作用. 若将上述两个试验按图1.5方式作图,我们可以看到试验 I 的两条线相互平行,而试验 II 的两条线明显地不平行,前者表明 A 和 B 之间没有交互作用,而后者有交互作用. 由于有试验误差,即使 A 和 B 之间没有交互作用,相应点图的两条线只能近于平行,故我们需要对交互作用有一个定量的估计.

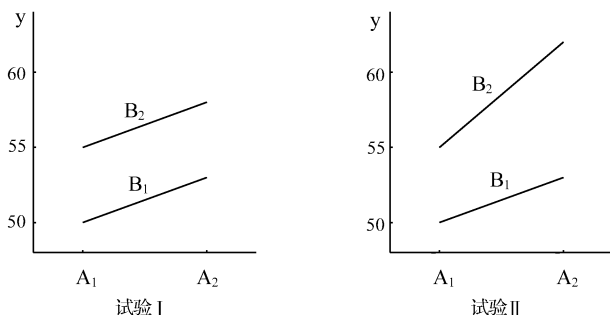


图 1.5 响应与因素的关系

让我们继续讨论模型(1.39), 主效应 α_i 和 β_j 应有的约束条件(参见(1.4)式)

$$\sum_{i=1}^p \alpha_i = \sum_{j=1}^q \beta_j = 0,$$

令 μ_{ij} , $\mu_{i\cdot}$ 和 $\mu_{\cdot j}$ 为响应 y_{ij} 分别在水平组合 $A_i B_j$, 水平 A_i 和 B_j 下的均值. 易见有

$$y_{ijk} = \mu_{ij} + \epsilon_{ijk},$$

$$\mu_{ij} = \mu + (\mu_{i\cdot} - \mu) + (\mu_{\cdot j} - \mu) + (\mu_{ij} - \mu_{i\cdot} - \mu_{\cdot j} + \mu).$$

由单因素试验的讨论知道 $\alpha_i = \mu_{i\cdot} - \mu$, $\beta_j = \mu_{\cdot j} - \mu$, 从而

$$(\alpha\beta)_{ij} = \mu_{ij} - \mu_{i\cdot} - \mu_{\cdot j} + \mu. \quad (1.40)$$

可以验证,它们满足关系

$$\sum_{i=1}^p (\alpha\beta)_{ij} = \sum_{j=1}^q (\alpha\beta)_{ij} = 0, \quad i = 1, \dots, p, \quad j = 1, \dots, q, \quad (1.41)$$

由(1.40)式不难获得 $(\alpha\beta)_{ij}$ 之估计

$$\widehat{(\alpha\beta)}_{ij} = \bar{y}_{ij\cdot} - \bar{y}_{i\cdot\cdot} - \bar{y}_{\cdot j\cdot} + \bar{y}_{\cdot\cdot\cdot},$$

这里

$$\begin{aligned} \bar{y}_{ij\cdot} &= \frac{1}{r} \sum_{k=1}^r y_{ijk}, \quad \bar{y}_{i\cdot\cdot} = \frac{1}{qr} \sum_{j=1}^q \sum_{k=1}^r y_{ijk}, \\ \bar{y}_{\cdot j\cdot} &= \frac{1}{pr} \sum_{i=1}^p \sum_{k=1}^r y_{ijk}, \quad \bar{y}_{\cdot\cdot\cdot} = \frac{1}{pqr} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^q \sum_{k=1}^r y_{ijk}. \end{aligned}$$

如果所有的 $(\alpha\beta)_{ij}$ 均为0,则 A 和 B 之间没有交互作用.当试验中包括了更多的因素时,除了二个因素之间有交互作用,可能有三因素之间的交互作用,四因素之间的交互作用,等等.例如 $A \times B \times C$ 表示因素 A, B, C 之间的三阶交互作用, $A \times B \times C \times D$ 表示因素 A, B, C, D 之间的四阶交互作用.

大量的实践表明,高阶的交互作用常常不存在,或很小可以忽略.在试验设计的统计推断中,普遍采用如下的原则:保证估计诸因素主效应,尽量能估计两两因素之间的交互作用,如有余力,可估计部分高阶交互作用.

如果因素为连续变量 $x_1, \dots, x_s$,且可用回归模型来拟合试验的数据,如何来表达因素间的交互作用呢?如果真模型为可加模型,即

$$y = \beta_0 + \beta_1 g_1(x_1) + \dots + \beta_s g_s(x_s) + \epsilon,$$

表明因素间没有交互作用,式中 $g_1, \dots, g_s$ 为一元函数.若真模型不能表示成上述可加模型时,例如必须包含项 $g_i(x_{i_1}, \dots, x_{i_k})$ 时,且函数 g_i 不能表示 $x_{i_1}, \dots, x_{i_k}$ 的可加模型时,这时因素间有交互作用.由于因素间的交互作用可以有很复杂的结构,若试验