

TECHNISCHE HOGESCHOOL EINDHOVEN

Afdeling Algemene Wetenschappen

Onderafdeling der Wiskunde

STATISTISCHE THEORIE

van

PROEFOPZETTEN

Prof. Dr. R. Doornbos

Najaarssemester 1980

Bijl 1 Moog



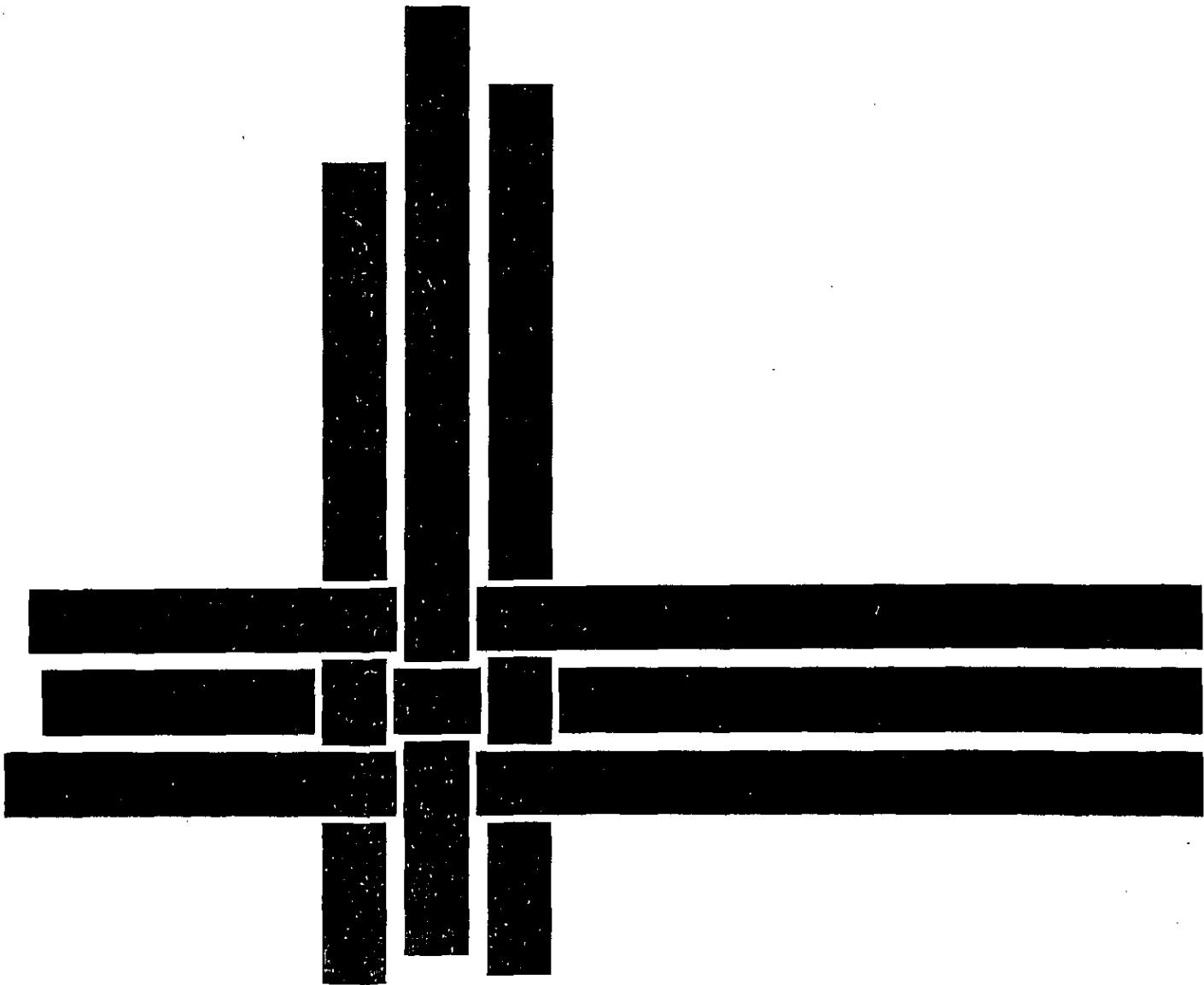
Technische Hogeschool
Eindhoven

Dictaatnummer 2.222
Prijs f. 6,00

Onderafdeling der Wiskunde en Informatica

Statistische Theorie van Proefopzetten

Prof.dr. R. Doornbos



2. 2. 2. 2.

TECHNISCHE HOGESCHOOL EINDHOVEN

Onderafdeling der Wiskunde

Statistische Theorie van Proefopzetten

Prof. Dr. R. Doornbos

Najaarssemester 1980

Statistische Theorie van Proefopzetten

<u>Inhoudsopgave</u>	pag.
1. <u>Literatuur</u>	4
2. <u>Inleiding</u>	5
2.1. Enkele eenvoudige voorbeelden	5
2.2. Blokvorming, vrijheidsgraden en verloting	8
3. <u>Lineaire modellen</u>	11
3.1. Een paar voorbeelden	11
3.2. Schatting van de parameters	14
3.3. Betrouwbaarheidsintervallen en toetsen	20
3.4. Variantie-analyse en toetsen voor meerdere parameters	29
3.5. Variantie-analyse voor orthogonale proefschema's	33
4. <u>Proefopzetten met verloting binnen blokken</u>	34
5. <u>Latijnse vierkanten</u>	41
5.1. Twee-dimensionale blokvorming	41
5.2. Grieks-Latijnse vierkanten	45
6. <u>Faktoriële proefopzetten</u>	46
7. <u>Codering en orthogonale polynomen</u>	51
7.1. De invloed van verschillende coderingen op het resultaat	51
7.2. Orthogonale contrasten	56
7.3. Orthogonale polynomen	60
7.4. Het verband tussen twee coderingssystemen	62
8. <u>2^n-proeven</u>	64
8.1. Algemeen	64
8.2. Het Yates-algorithme	68
8.3. Blokvorming	70
8.4. Fraktionele 2^n -proeven	74
9. <u>Roteerbare proefopzetten</u>	78
9.1. Een aanvulling op een 2^n -experiment	78
9.2. Proefopzetten van de tweede orde	80
10. <u>Verschillende modellen voor orthogonale proeven met kwalitatieve factoren</u>	82
10.1. Een nieuwe modelformulering voor factoren met vaste niveau's	82
10.2. Factoren met stochastische niveau's	86
10.3. Gemengde modellen	88
10.4. Geneste factoren	89
10.5. Rekenregels voor gemengde modellen	90
<u>Aanvulling 1981</u>	

1. Literatuur

W.G. Cochran and G.M. Cox, Experimental Designs, Wiley, 1957.

Een systematische verzameling van proefopzetten met formules voor de analyse.

D.R. Cox, The planning of experiments, Wiley, 1958.

Duidelijke behandeling van de principes die aan statistische proefopzetten ten grondslag liggen. Toegelicht met praktische voorbeelden, meestal zonder numerieke uitwerking.

O.L. Davies en anderen, The design and analysis of industrial experiments, Oliver and Boyd, 1956.

Uitstekend boek met veel praktijkvoorbeelden, voornamelijk uit de chemische industrie.

R.A. Fisher, The design of experiments, Oliver and Boyd, sinds 1935 vele malen herdrukt.

Dit boek legde de grondslag voor de ontwikkeling van de theorie van proefopzetten. Nog steeds boeiend om te lezen, niet eenvoudig.

C.C. Li, Introduction to experimental statistics, McGraw-Hill, 1964.

Duidelijk boek op elementair niveau met veel eenvoudige voorbeelden.

W. Mendenhall, Introduction to linear models and the design and analysis of experiments, Wadsworth, 1968.

Een eenvoudige inleiding in theorie en toepassing van lineaire modellen. Veel vraagstukken.

2. Inleiding

Het opzetten en organiseren van proeven vormt een essentieel onderdeel van experimenteel wetenschappelijk onderzoek. In een wetenschappelijk onderzoek kunnen de volgende fasen worden onderscheiden:

1. Theorie, veronderstelling, hypothese
2. Voorspelling
3. Waarneming
4. Analyse,

waarna de theorie wordt gewijzigd of verfijnd, m.a.w. nieuwe hypothesen worden geformuleerd.

Als de waarnemingen een stochastisch karakter hebben, wat in meerdere of mindere mate bijna altijd het geval is, speelt de statistiek uiteraard een rol bij de analyse.

Als de experimenten niet zorgvuldig zijn opgezet kunnen vaak geen of slechts triviale conclusies worden getrokken. Toen de grondlegger van de statistische proefopzetten R.A. Fisher in 1919 benoemd werd tot statisticus bij het landbouwkundig proefstation te Rothamsted lagen daar waarnemingen van 70 jaren experimenteren. "Raking over the muck heap" bracht hem tot de slotsom dat er bijna geen betrouwbare conclusies uit vielen te trekken. Vervolgens ontwikkelde hij de principes waarop moderne proefopzetten zijn gebaseerd. Toepassing van deze principes kan veel teleurstellingen voorkomen.

2.1. Enkele eenvoudige voorbeelden

Wij houden ons bezig met situaties waarbij de invloed van verschillende factoren op een afhankelijke variabele moet worden onderzocht. Het gaat er daarbij in de eerste plaats om om vast te stellen welke factoren van belang zijn en verder om de grootte van hun invloed te bepalen. De experimenten moeten daarbij zo worden opgezet dat factoren die niet in het plan zijn opgenomen (bv. omdat ze aan de onderzoeker niet bekend zijn) de geldigheid van de conclusies niet kunnen aantasten.

Voorbeeld 2.1.1

Men wil de invloed onderzoeken van het alcoholgehalte van het bloed op de reactietijd van automobilisten. De proefpersonen krijgen verschillende doses alcohol en na een vaste tijd wordt een bloedproef genomen en een gestandaardiseerde test voor de reactietijd uitgevoerd. De bedoeling is na te gaan hoe

de reactiesnelheid (y) afhangt van het alcoholpercentage (x). Nu is de hoogte van x niet rechtstreeks te regelen, maar wel de dosis alcohol (z). Daar z en x nauw samenhangen kan men de z -waarden zo kiezen dat de bijbehorende x -waarden groepen vormen die elkaar niet overlappen. Hoe moeten nu de alcohol-doses over de automobilisten worden verdeeld? De deelnemers zelf laten kiezen is misschien wel een benadering van de reële situatie maar voor de juiste beantwoording van de gestelde vraag niet bevorderlijk. Het is bv. goed denkbaar dat habituele drinkers een grotere dosis zullen nemen en minder beïnvloed worden dan anderen. De enige manier om dergelijke systematische en ongewenste invloeden onschadelijk te maken is verloting. Hiermee wordt bedoeld dat we door het lot laten bepalen welke dosis alcohol iedere deelnemer krijgt toegewezen. Daarbij kan er eventueel tegelijkertijd voor worden gezorgd dat de doses in gelijke aantallen over de proefpersonen worden verdeeld.

Op de praktische uitvoering van het verlodingsprincipe wordt in de volgende paragraaf nader ingegaan.

Voorbeeld 2.1.2

Klassiek is het voorbeeld van "The lady tasting tea" uit Fisher's "Design of Experiments". Lezing van het oorspronkelijke stuk (hoofdstuk II van het boek) wordt van harte aanbevolen. Een dame beweert dat ze aan een kop thee met melk kan proeven of de melk of de thee het eerst is ingeschonken. Om dit op de proef te stellen wordt de volgende proef genomen. Er worden acht koppen thee ingeschonken, vier op elke manier, en deze acht koppen worden in een willekeurige volgorde aan de dame aangeboden. Het is de proefpersoon bekend dat ze acht koppen krijgt voorgezet, van elke soort vier, en dat de volgorde willekeurig zal zijn, d.w.z. door loting zal worden bepaald.

Bij dit experiment is een eenvoudige statistische toets aan te geven voor de nulhypothese H_0 dat de dame niet in staat is tussen de twee soorten thee te onderscheiden. Er zijn in totaal $\binom{8}{4} = 70$ manieren om vier objecten uit acht te kiezen en dat komt overeen met alle mogelijke uitkomsten van onze proef. Onder de nulhypothese hebben de 70 groepen van 4 een even grote kans om gekozen te worden. Als we de nulhypothese verwerpen als al de uitspraken juist zijn, is de kans H_0 ten onrechte te verwerpen gelijk aan $1/70 = 0,014$. Er zijn 16 manieren om van iedere soort 3 juist en 1 fout aan te wijzen. Als we ook in dit geval H_0 verwerpen wordt de onbetrouwbaarheid van de toets dus $17/70 = 0,243$. Dit resultaat is dus onvoldoende overtuigend.

De verloting van de volgorde van aanbieding dient ervoor om te zorgen dat de proefpersoon niet door een bepaald systeem in de volgorde op het spoor wordt gebracht. Om er zeker van te kunnen zijn dat onder de nulhypothese alle mogelijke uitkomsten even waarschijnlijk zijn moet er bovendien voor worden gezorgd dat storende factoren zoals verschillen in temperatuur, verschillende kopjes en verschillende hoeveelheden suiker de zaak niet in de war kunnen sturen. Ook dit kan door verloting worden bereikt, bv. door nadat de suiker is gedoseerd door loting vast te stellen in welke 4 kopjes eerst melk zal worden geschonken. Daarnaast zal uiteraard binnen redelijke grenzen worden geprobeerd de storende factoren te elimineren door gelijke kopjes, gelijke hoeveelheden suiker e.d. te nemen. De verloting garandeert nl. wel dat de toets geldig blijft in die zin dat de onbetrouwbaarheid bekend is, maar wanneer het te onderzoeken effect verdwijnt in de "ruis" van verstorende effecten is het onderscheidingsvermogen te klein geworden.

Als de dame in kwestie niet pretendeert altijd het verschil tussen eerst melk of eerst thee te kunnen proeven, maar wel met een kans groter dan 0,5, is het aantal van 8 koppen te klein. Bij 12 koppen is de kans op alles goed onder H_0 $1/924 = 0,001$ en de kans op 5 goed van elk soort $36/924 = 0,039$. Verwerpen we H_0 bij 5 of meer goed dan is de onbetrouwbaarheid dus $37/924 = 0,04$, dus nu kan bij een onbetrouwbaarheidsdrempel van 5% één foute uitspraak worden geaccepteerd. Een andere mogelijkheid om het onderscheidingsvermogen te vergroten is te bereiken door een andere proefopzet. In plaats van van tevoren vast te stellen dat van elke soort 4 koppen worden genomen loten we nu per kop of eerst thee of eerst melk wordt geschonken. De kans op 8 correcte uitspraken is dan $(1/2)^8 = 1/256$, de kans op 7 juiste is $8/256$. Verwerpen we H_0 in beide gevallen dan is de onbetrouwbaarheid 0,035.

Voorbeeld 2.1.3

Stel dat wij twee wasmiddelen willen vergelijken om na te gaan of het ene middel wollen stoffen meer doet krimpen dan het andere. Het ligt voor de hand dat wij ons niet tot één soort stof zullen beperken omdat dit niet tot algemeen geldige resultaten zou leiden. Stel dat elk wasmiddel op 10 lappen stof wordt toegepast, zodat in totaal 20 waarnemingen worden gedaan. Wij beschouwen nu twee mogelijke proefopzetten.

Neem eerst een reeks proeven waarbij 20 stukken stof aselekt over de twee wasmiddelen worden verdeeld. De analyse zal dan uitgaan van het verschil van

twee gemiddelden, elk van 10 waarnemingen. De gemiddelden zijn weinig nauwkeurig tengevolge van de verschillen tussen de stoffen.

Een tweede mogelijkheid is om 10 soorten stof te kiezen en van elke soort een lap doormidden te delen waarna de ene helft met het ene en de andere helft met het andere wasmiddel wordt gewassen. Nu gaan we bij de analyse uit van het gemiddelde van 10 verschillen dat waarschijnlijk nauwkeuriger is omdat de verschillen tussen de 10 stoffen het resultaat niet beïnvloeden.

(Welke veronderstelling wordt hier impliciet gemaakt?)

2.2. Blokvorming, vrijheidsgraden en verloting

In deze paragraaf worden op een niet formele manier een aantal begrippen ingevoerd en toegelicht terwijl bovendien een aantal veel gebruikte termen met het Engelse equivalent worden geïntroduceerd.

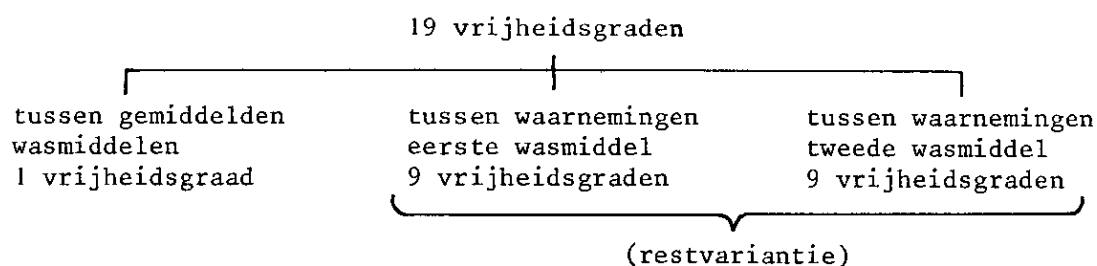
Een proef bestaat uit waarnemingen die worden uitgevoerd aan (experimentele) eenheden (experimental units) die een behandeling (treatment) ondergaan.

Zo'n behandeling wordt verkregen door voor een aantal factoren, die de uitkomst beïnvloeden en die systematisch kunnen worden gevarieerd, bepaalde niveaus (levels) te kiezen. Wanneer de experimentele eenheden een homogene groep vormen, d.w.z. dat er geen aanleiding is ze op grond van één of meerdere kenmerken te onderscheiden, kunnen de behandelingen door loting aselekt over de eenheden worden verdeeld. Bij voorbeeld 2.1.1 is een situatie beschreven waarbij dit is gebeurd. We kunnen ons echter goed voorstellen dat verschillende automobilisten verschillend op alcohol reageren. Als deze verschillen groot zijn kan worden overwogen om elke automobilist op een aantal verschillende dagen de verschillende doses te geven en de reactiesnelheid te meten. De experimentele eenheid is dan één automobilist op één bepaalde dag. Bij voorbeeld 2.1.3 is in het tweede geval iets dergelijks gebeurd. Een experimentele eenheid is daar de helft van een bepaalde lap stof.

De experimentele eenheden zijn nu in blokken verdeeld. Bij voorbeeld 2.1.1 wordt een blok bepaald door één persoon en bestaat het uit evenveel eenheden als er verschillende doses zijn. In voorbeeld 2.1.3 bestaat een blok uit 2 eenheden, nl. de helften van één lap stof. Deze methode noemt men blokvorming. De bedoeling is om de variabiliteit tengevolge van storende factoren binnen de blokken zo klein mogelijk te maken om de invloed van de te onderzoeken factoren zo nauwkeurig mogelijk te kunnen beoordelen. We hebben daartoe als het ware een extra factor, nl. die van de blokken toegevoegd waarin we op zichzelf niet geïnteresseerd zijn.

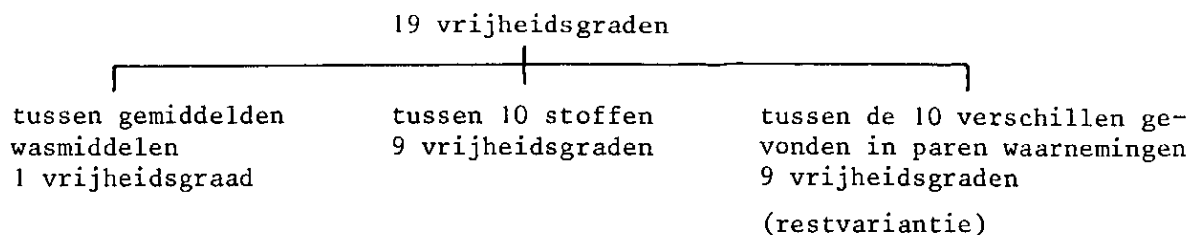
We kunnen dit principe ook beschrijven met behulp van het begrip vrijheidsgraden (degrees of freedom). We zullen dit begrip later weer ontmoeten als parameter van steekproefverdelingen maar hier wordt het alvast informeel ingevoerd. Het aantal vrijheidsgraden van een aantal waarnemingen (onderworpen aan stochastische invloeden) is het aantal waarden dat vrij kan worden gekozen. Als bv. van 3 waarnemingen x_1 , x_2 en x_3 vastligt dat de som gelijk is aan 25 (3 soorten balletjes uit een bak geschept met een schep met 25 gaatjes) dan is het aantal vrijheidsgraden 2. In het algemeen hebben n waarnemingen, mits deze niet lineair afhankelijk zijn, n vrijheidsgraden. Maar de afwijkingen van het steekproefgemiddelde $x_i - \bar{x}$ ($i = 1, \dots, n$) hebben $n - 1$ vrijheidsgraden en \bar{x} heeft 1 vrijheidsgraad. We kunnen ook zeggen dat met \bar{x} het algemene niveau wordt gemeten (één vrijheidsgraad voor het gemiddelde, of voor het totaal) en dat er verder nog $n - 1$ onafhankelijke verschillen, ook wel vergelijkingen of contrasten, kunnen worden gemeten. Dat kunnen verschillen tussen individuele waarnemingen zijn, maar ook verschillen tussen gemiddelden van groepen e.d.

We zullen dit toelichten aan de hand van voorbeeld 2.1.3. Daar hebben we te maken met 20 waarnemingen, dus 19 vrijheidsgraden + 1 voor het totaal (of gemiddelde). Bij de eerste proefopzet worden deze 19 vrijheidsgraden op de volgende manier benut:



Eén vrijheidsgraad dient om het verschil tussen de 2 wasmiddelen te meten. Om te kunnen beoordelen of dit verschil alleen aan toevallige oorzaken kan worden toegeschreven hebben wij een maat nodig voor de variabiliteit tussen de waarnemingen bij één wasmiddel. Hiervoor zijn bij ieder wasmiddel 10 waarnemingen en 9 vrijheidsgraden beschikbaar. In totaal dus 18 vrijheidsgraden voor het bepalen van de "meetfout" of restvariantie.

Bij de tweede proefopzet zijn er weer 19 vrijheidsgraden beschikbaar voor het meten van verschillen, maar nu worden er 9 benut voor het meten van verschillen tussen de 10 soorten stof:



In de restvariantie zitten nu niet meer de verschillen tussen de stoffen en daardoor zal een klein verschil tussen de wasmiddelen beter gevonden worden als tenminste de verschillen tussen de stoffen belangrijk genoeg zijn om het verlies in vrijheidsgraden (9 i.p.v. 18) te compenseren.

Door blokvorming wordt bereikt dat de waarnemingen binnen een blok betrekking hebben op meer homogene groepen van experimentele eenheden. De fluctuaties binnen de blokken kunnen dan als toevallige fouten worden beschouwd mits de behandelingen door verloting over de eenheden zijn verdeeld.

Hoe kan deze verloting nu in de praktijk worden uitgevoerd? Men kan briefjes nummeren, schudden en dan trekken of mechanische hulpmiddelen voor het genereren van aselechte getallen toepassen, zoals de kanskolf en de "10-zijdige" dobbelsteen. De meest gebruikte methode is het gebruik van tabellen van aselechte getallen (bv. tabel 8.4 van het Statistisch Compendium). Ook kunnen aselechte getallen door de computer worden gegenereerd. Er zijn ook tabellen van aselechte permutaties van de getallen 1-9 en 1-16 (Cochran en Cox) en van 1-10, 1-25, 1-50 en 1-100 (tabel 8.5 Statistisch Compendium).

Om nu bv. in voorbeeld 2.1.2 een volgorde te kiezen om de 8 koppen thee aan de dame aan te bieden nemen we een aselechte permutatie van 10 uit tabel 8.5 en laten de getallen 9 en 0 weg. We kunnen bv. aan het begin van de tabel beginnen en bij een volgende toepassing verder gaan waar de vorige ophield. Verdere methoden van verloting zullen in latere hoofdstukken bij de betreffende toepassingen aan de orde komen.

3. Lineaire modellen

Bij de theorie van proefopzetten hebben wij te maken met situaties waarin een variabele y (de afhankelijke of te verklaren variabele) afhangt van een aantal onafhankelijke of verklarende variabelen x_1, \dots, x_k . Wij beperken ons tot situaties waarbij het verband lineair is, dus

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k .$$

Het doel van de proeven is het toetsen van dit model en het schatten van de parameters $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$. Dit impliceert dat aangenomen wordt dat er een stochastisch element in de waarnemingen zit. Verondersteld wordt dat deze toevalsfout alleen voorkomt in de responsie y en niet in de variabelen x_1, \dots, x_k . Dat wil zeggen x_1, \dots, x_k kunnen ofwel precies worden waargenomen of willekeurig worden gekozen. Het model is dus in feite:

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k + \underline{e} ,$$

waarin \underline{e} de toevallige fout voorstelt, met $E\underline{e} = 0$.

3.1. Een paar voorbeelden

Voorbeeld 3.1.1

In voorbeeld 2.1.1 is gesproken over de reactiesnelheid y van automobilisten afhankelijk van het alcoholpercentage x . Het eenvoudigste lineaire model voor dit geval is

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x + \underline{e} .$$

Als wij bereid zijn aannamen te doen over de kansverdeling van \underline{e} is het mogelijk op grond van waarnemingen van \underline{y} bij verschillende waarden van x de parameters β_0 en β_1 te schatten en bv. te toetsen of $\beta_1 = 0$.

Er zijn allerlei andere modellen denkbaar zoals

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 x^2 + \underline{e}$$

of

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 \log x + \underline{e} .$$

Ook deze modellen zijn lineair! Lineair slaat namelijk op de onbekende parameters en daarin zijn ook de beide laatstgenoemde modellen lineair. Door te definiëren:

$$\begin{aligned}x_1 &:= x \\x_2 &:= x^2\end{aligned}$$

respectievelijk

$$x_1 := \log x ,$$

zijn deze modellen ook uiterlijk weer tot de algemene vorm teruggebracht. In paragraaf 2.2 is een andere proefopzet voor hetzelfde probleem besproken waarbij een aantal, bv. p , proefpersonen elk een aantal doses hebben gekregen. Het model zou nu kunnen zijn:

$$y_i = \beta_{0i} + \beta_{1i}x + \underline{e}_i \quad (i = 1, \dots, p) .$$

Interessante hypothesen zijn nu

$$\beta_{1i} = \beta_1 \quad (i = 1, \dots, p) ,$$

dus de invloed van de hoeveelheid alcohol op de reactiesnelheid is voor alle proefpersonen gelijk, of zelfs:

$$\left. \begin{aligned}\beta_{1i} &= \beta_1 \\ \beta_{0i} &= \beta_0\end{aligned} \right\} \quad (i = 1, \dots, p) .$$

Opmerking. De aandachtige lezer ziet dat het model met de p proefpersonen zoals hierboven weergegeven niet past in de algemene formulering aan het begin van dit hoofdstuk. Met soortgelijke methoden als in het volgende voorbeeld worden toegepast is dit toch goed mogelijk, maar daarop wordt op dit moment niet ingegaan.

Voorbeeld 3.1.2

Bij de vergelijking van de twee wasmiddelen van voorbeeld 2.1.3 is het model behorend bij de eerste proefopzet

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x + \underline{e} ,$$

waarin x een hulpvariabele (dummy variable) is die als volgt is gedefiniëerd:

- $x = 0$ als wasmiddel A wordt gebruikt;
- $x = 1$ als wasmiddel B wordt gebruikt.

Als we de verwachte krimp bij gebruik van A en B respectievelijk met μ_A en μ_B aangeven, dan zien we dat geldt

$$\begin{aligned}\mu_A &= \beta_0 \\ \mu_B &= \beta_0 + \beta_1 ,\end{aligned}$$

of

$$\begin{aligned}\beta_0 &= \mu_A \\ \beta_1 &= \mu_B - \mu_A .\end{aligned}$$

Het lijkt meer voor de hand te liggen een modelformulering te kiezen die symmetrisch is in A en B. Gebruikelijk is bv. in dit geval

$$y_i = \mu + v_i + e_i \quad (i = 1,2) ,$$

met als bijvoorwaarde: $v_1 + v_2 = 0$, dus $v_1 = v$, $v_2 = -v$, waaruit volgt:

$$\begin{aligned}\mu_A &= \mu + v \\ \mu_B &= \mu - v .\end{aligned}$$

Ook dit is als een lineair model te schrijven, nl.

$$y = \mu + v_1 x_1 + v_2 x_2 + e ,$$

als we afspreken dat

$$\begin{aligned}x_1 &= 1 \text{ en } x_2 = 0 \text{ als A wordt gebruikt,} \\ x_1 &= 0 \text{ en } x_2 = 1 \text{ als B wordt gebruikt.}\end{aligned}$$

Analyse van dit model levert echter wat meer complicaties op en daarom kiezen wij voor het eerste model.

Toetsen van de hypothese $\mu_A = \mu_B$ is dan hetzelfde als toetsen dat $\beta_1 = 0$.

Bij de tweede proefopzet, waarbij we 10 stoffen, genummerd 1,2,...,10, hebben, luidt het model

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_9 x_9 + \beta_{10} x_{10} + e .$$

Hierin is

- $x_1 = 1$ als de 2e stof wordt gebruikt;
- $x_1 = 0$ als niet de 2e stof wordt gebruikt;
-
- $x_9 = 1$ als de 10e stof wordt gebruikt;
- $x_9 = 0$ als niet de 10e stof wordt gebruikt;
- $x_{10} = 0$ als wasmiddel A wordt gebruikt;
- $x_{10} = 1$ als wasmiddel B wordt gebruikt.

Op deze wijze geven β_1, \dots, β_9 het krimpgedrag van de stoffen 2, ..., 10 t.o.v. stof 1 aan en β_{10} is weer het verschil in krimp tussen wasmiddel B en wasmiddel A.

De keuze van stof 1 als vergelijkingsmaatstaf is uiteraard niet van belang, hiervoor zou ook één van de andere stoffen genomen kunnen worden.

3.2. Schatting van de parameters

Om in het model

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_k x_k + \underline{e}$$

de parameters $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$ te kunnen schatten hebben we waarnemingen van \underline{y} nodig bij verschillende x-waarden. Stel dat er n van deze waarnemingen worden verricht:

$$\begin{aligned} y_1 &= \beta_0 + \beta_1 x_{11} + \dots + \beta_k x_{1k} + e_1 \\ y_2 &= \beta_0 + \beta_1 x_{21} + \dots + \beta_k x_{2k} + e_2 \\ &\dots \dots \dots \\ y_n &= \beta_0 + \beta_1 x_{n1} + \dots + \beta_k x_{nk} + e_n \end{aligned}$$

We nemen aan dat $E e_i = 0$ ($i = 1, \dots, n$), $\sigma^2(e_i) = \sigma_0^2$ en $cov(e_i, e_j) = 0$, dus ongecorreleerde storingstermen met dezelfde variantie.

Om de notatie nog wat compacter te kunnen maken voeren we de variabele x_0 in die identiek gelijk is aan 1, zodat

$$y_i = \beta_0 x_{i0} + \beta_1 x_{i1} + \dots + \beta_k x_{ik} + e_i \quad (i = 1, \dots, n)$$

In matrixnotatie:

$$\underline{y} = X\beta + \underline{e}$$

waarin \underline{y} en \underline{e} kolomvectoren zijn met n elementen, β een kolomvector met $k+1$ elementen en X een matrix met n rijen en $k+1$ kolommen. De veronderstellingen over \underline{e} kunnen nu worden samengevat als: $\underline{\xi}\underline{e} = 0$ en $\underline{\xi}\underline{e}\underline{e}' = \sigma_0^2 I$, als I de $n \times n$ eenheidsmatrix is.

De klassieke schattingsmethode is die der kleinste kwadraten: Kies bij gerealiseerde waarden y_1, \dots, y_n de parameters β_0, \dots, β_k zo dat

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \beta_0 x_{i0} - \dots - \beta_k x_{ik})^2 = \sum e_i^2 = e'e$$

minimaal is, of:

$$(\underline{y} - X\underline{\beta})'(\underline{y} - X\underline{\beta})$$

minimaal. De resulterende schattingen geven wij aan met b_0, b_1, \dots, b_k . Differentiëren van de kwadratische vorm naar $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$ en gelijk aan 0 stellen van de afgeleiden geeft:

$$\begin{aligned} -2 \sum_i x_{i0} (y_i - b_0 x_{i0} - \dots - b_k x_{ik}) &= 0 \\ \dots \dots \dots & \\ -2 \sum_i x_{ik} (y_i - b_0 x_{i0} - \dots - b_k x_{ik}) &= 0 \end{aligned}$$

In matrixnotatie:

$$-2X'(\underline{y} - X\underline{b}) = 0$$

We krijgen dus $k+1$ zogenaamde "normaalvergelijkingen"

$$X'X\underline{b} = X'\underline{y}$$

of

$$\underline{b} = (X'X)^{-1} X'\underline{y} = (X'X)^{-1} X'(X\underline{\beta} + \underline{e}) = \underline{\beta} + (X'X)^{-1} X'\underline{e}$$

Van de op deze wijze verkregen schatters kunnen we direkt inzien dat ze zuiver zijn:

$$\underline{\xi}\underline{b} = \underline{\xi}(X'X)^{-1} X'\underline{y} = (X'X)^{-1} X'X\underline{\beta} = \underline{\beta}$$

De variantie-covariantiematrix van \underline{b} , d.w.z. de matrix waarvan het element op de i -de rij en de j -de kolom $cov(\underline{b}_i, \underline{b}_j)$ is, is

$$\mathcal{E}(\underline{b} - \beta)(\underline{b} - \beta)' = \mathcal{E}[(X'X)^{-1} X' \underline{e} \underline{e}' X(X'X)^{-1}] = (X'X)^{-1} \sigma_0^2 .$$

Men kan bewijzen dat \underline{b} de beste lineaire zuivere schatter van β is, d.w.z. onder alle schatters die zuiver zijn en bovendien lineaire functies van \underline{y} is \underline{b} degene die voor elke lineaire combinatie van β_0, \dots, β_k de schatter met de kleinste variantie oplevert. Dus β_0, \dots, β_k worden elk afzonderlijk zo nauwkeurig mogelijk geschat, maar ook bv. $\beta_1 - \beta_0$ etc.

Voorbeeld 3.2.1

Wij zullen een stel waarnemingen analyseren die we hebben verkregen door uit te gaan van een model waarin de parameters bekend zijn. Deze situatie doet zich in de praktijk uiteraard niet voor.

Het model is

$$\underline{y} = 50 - 2x + 0,04x^2 + \underline{e} .$$

De toevalsfout \underline{e} is normaal verdeeld met gemiddelde 0 en standaardafwijking 2, dus $\sigma_0^2 = 4$. Uit een tabel hebben wij 7 realisaties van een dergelijke stochastische variabele genomen. Verder kiezen we voor x de waarden 20, 25, (5), ..., 50.

Het resultaat is dan als volgt:

x_i	$\mathcal{E}y_i$	e_i	y_i
20	26	-0,2	25,8
25	25	3,1	28,1
30	26	-1,4	24,6
35	29	3,4	32,4
40	34	2,8	36,8
45	41	0,3	41,3
50	50	-4,0	46,0

In een reëel experiment zijn uiteraard alleen de eerste kolom (ingesteld) en de laatste kolom (waargenomen) bekend.

Eerst worden nu de variabelen als volgt gecodeerd:

$$x_0 = 1, x_1 = (x - 20)/5, x_2 = x_1^2, z = y - 20 ,$$

dit om het rekenwerk te vergemakkelijken. Dit geeft:

z_i	x_{i0}	x_{i1}	x_{i2}
5,8	1	0	0
8,1	1	1	1
4,6	1	2	4
12,4	1	3	9
16,8	1	4	16
21,3	1	5	25
26,0	1	6	36

$$X'X = 7 \begin{bmatrix} 1 & 3 & 13 \\ 3 & 13 & 63 \\ 13 & 63 & 325 \end{bmatrix}, \quad (X'X)^{-1} = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 64 & -39 & 5 \\ -39 & 39 & -6 \\ 5 & -6 & 1 \end{bmatrix}$$

$$X'z = \begin{bmatrix} 95,0 \\ 384,2 \\ 1875,4 \end{bmatrix}, \quad b = [X'X]^{-1} X'z = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 473,2 \\ 26,4 \\ 45,2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5,633 \\ 0,314 \\ 0,538 \end{bmatrix}.$$

De geschatte relatie is dus

$$z = 5,633 + 0,314 x_1 + 0,538 x_1^2,$$

terwijl de oorspronkelijke, omgerekend in z en x_1 , luidt

$$z + 20 = 50 - 2(5x_1 + 20) + 0,04(5x_1 + 20)^2$$

of

$$z = 6 - 2x_1 + x_1^2.$$

Voorbeeld 3.2.2

In het geval van de wasmiddelen (zie de voorbeelden 2.1.3 en 3.1.2) ziet bij de eerste proefopzet de matrix X er bij passende rangschikking der waarnemingen als volgt uit:

$$\begin{array}{l} 10 \text{ rijen} \\ 10 \text{ rijen} \end{array} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \cdot & \cdot \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ \cdot & \cdot \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \Rightarrow X'X = \begin{bmatrix} 20 & 10 \\ 10 & 10 \end{bmatrix} = 10 \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} .$$

Dus

$$(X'X)^{-1} = \frac{1}{10} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad X'y = \begin{bmatrix} 20 \\ \sum_{i=1}^{10} y_i \\ 20 \\ \sum_{i=11}^{20} y_i \end{bmatrix},$$

$$b = (X'X)^{-1} X'y = \frac{1}{10} \begin{bmatrix} 10 \\ \sum_{i=1}^{10} y_i \\ 20 \\ \sum_{i=11}^{20} y_i - \sum_{i=1}^{10} y_i \end{bmatrix} .$$

Noemen we de eerste 10 waarnemingen y_{1i} ($i = 1, \dots, 10$) en de tweede 10 y_{2i} ($i = 1, \dots, 10$), verder

$$y_{1.} := \sum_{i=1}^{10} y_{1i}, \quad y_{2.} := \sum_{i=1}^{10} y_{2i},$$

$$\bar{y}_{1.} := \frac{1}{10} y_{1.} \quad \text{en} \quad \bar{y}_{2.} := \frac{1}{10} y_{2.},$$

dan is blijkbaar

$$b_0 = \bar{y}_{1.}$$

$$b_1 = \bar{y}_{2.} - \bar{y}_{1.}$$

conform de intuïtie.

Als we bij de 2e proefopzet de volgorde van de elementen van y opnieuw zo kiezen dat eerst 10 uitkomsten van behandeling met A en daarna de overeenkomstige uitkomsten met B worden genomen, dan is de X-matrix (zie voor de codering pag. 14):

$$X_{20 \times 11} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 1 & 0 & \dots & 1 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{en} \quad X'X = \begin{bmatrix} 20 & 2 & \dots & 2 & 10 \\ 2 & 2 & \dots & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 2 & 0 & \dots & 2 & 1 \\ 10 & 1 & \dots & 1 & 10 \end{bmatrix}$$

$$(X'X)^{-1} = \frac{1}{20} \begin{bmatrix} 11 & -10 & \dots & -10 & -2 \\ -10 & 20 & \dots & 10 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ -10 & 10 & & 20 & 0 \\ -2 & 0 & & 0 & 4 \end{bmatrix}, \quad X'y = \begin{bmatrix} y_{..} \\ y_{.2} \\ \vdots \\ y_{.10} \\ y_{2.} \end{bmatrix},$$

als y_{ij} de waarneming is aan de j -de stof behandeld met het i -de wasmiddel ($i = 1, 2; j = 1, \dots, 10$).

We zien bv. dat

$$\begin{aligned} b_1 &= \frac{1}{20} (-10y_{..} + 20y_{.2} + 10y_{.3} + \dots + 10y_{.10}) = \\ &= \frac{1}{20} (10y_{.2} - 10y_{.1}) = \frac{1}{2} (y_{.2} - y_{.1}) = \bar{y}_{.2} - \bar{y}_{.1} \end{aligned}$$

Algemeen:

$$b_{j-1} = \bar{y}_{.j} - \bar{y}_{.1} \quad (j = 2, \dots, 10)$$

Verder is

$$b_{10} = \frac{1}{20} (-2y_{..} + 4y_{2.}) = \frac{1}{10} (y_{2.} - y_{1.}) = \bar{y}_{2.} - \bar{y}_{1.}$$

Tenslotte:

$$\begin{aligned} b_0 &= \frac{1}{20} [11y_{..} - 10(y_{.2} + \dots + y_{.10}) - 2y_{2.}] = \\ &= \frac{1}{20} (10y_{.1} - y_{2.} + y_{1.}) = \bar{y}_{.1} - \frac{1}{2}(\bar{y}_{2.} - \bar{y}_{1.}) = \bar{y}_{.1} - \frac{1}{2}b_{10} . \end{aligned}$$

3.3. Betrouwbaarheidsintervallen en toetsen

In de vorige paragraaf vonden wij bij het algemene lineaire model

$$\underline{y} = X\underline{\beta} + \underline{e}$$

als kleinste kwadraten schatters voor $\underline{\beta}$:

$$\underline{b} = (X'X)^{-1} X'\underline{y} = \underline{\beta} + (X'X)^{-1} X'\underline{e} .$$

Onder de aanname $\underline{\xi e} = 0$ werd bewezen dat \underline{b} een zuivere schatter is voor $\underline{\beta}$: $\underline{\xi b} = \underline{\beta}$. Verder zagen wij nog dat, als $\underline{\xi ee}' = I\sigma_0^2$, geldt:

$$\text{var } \underline{b} = (X'X)^{-1} \sigma_0^2 .$$

Om betrouwbaarheidsintervallen te kunnen opstellen voor de β_i en om aannamen over het model te kunnen toetsen moeten we veronderstellingen over de verdeling van de elementen van \underline{e} maken. De gebruikelijke veronderstelling is dat de e_i normaal verdeeld zijn.

In Wiskunde 31 en 49 is bewezen dat lineaire combinaties van deze onderling onafhankelijke e_i dan ook normaal verdeeld zijn. Dit geldt dus met name voor de elementen b_i van \underline{b} . Verder geldt (hier niet bewezen) dat de simultane verdeling van b_0, \dots, b_k multinormaal is. Men zegt dan ook wel dat \underline{b} multinormaal verdeeld is. Deze verdeling is door de verwachting $\underline{\xi b} = \underline{\beta}$ en $\text{var}(\underline{b}) = (X'X)^{-1}\sigma_0^2$ volledig vastgelegd.

3.3.1. Het schatten van σ_0^2

De volgende stap is nu dat σ_0^2 geschat moet worden. Hiervoor wordt gebruikt de som van de kwadraten van de afwijkingen van de waarnemingen van het aangepaste model, de zogenaamde restkwadratensom KS_r .

De volgens het aangepaste model geschatte waarde van y noemen we \hat{y} . De restkwadratensom is dan

$$KS_r = (y - \hat{y})'(y - \hat{y}) .$$

Nu is $\hat{y} = Xb$, dus

$$KS_r = (y - Xb)'(y - Xb) = y'y - y'Xb - b'X'y + b'X'Xb .$$

We bedenken dat $y'Xb = b'X'y$ en verder dat $b'X'Xb = b'X'X(X'X)^{-1} X'y = b'X'y$. Dus is

$$KS_r = y'y - b'X'y = y'y - (Xb)'(Xb) .$$

$y'y$ heet de te verklaren kwadratensom KS_t , $(Xb)'(Xb) = b'X'y$ heet de verklarede kwadratensom KS_v . Samengevat:

$$\begin{cases} y'y = (Xb)'(Xb) + (y - Xb)'(y - Xb) \\ KS_t = KS_v + KS_r . \end{cases}$$

Meetkundig beschouwd is y ontbonden in twee componenten Xb en $(y - Xb)$ die loodrecht op elkaar staan: $(Xb)'(y - Xb) = b'X'y - b'X'Xb = 0$. De vectoren y , Xb en $y - Xb$ hebben respectievelijk n , $k+1$ en $n-k-1$ vrijheidsgraden. De n componenten van y zijn lineair onafhankelijk, Xb wordt bepaald door de $k+1$ componenten van b en $y - Xb$ voldoet aan $k+1$ lineaire vergelijkingen, nl. $X'(y - Xb) = 0$, en is dus door $n-k-1$ componenten bepaald.

De kwadraatsommen kunnen als realisaties van stochastische grootheden worden opgevat.

Men kan bewijzen dat

$$E[KS_r] = E[(y - Xb)'(y - Xb)] = (n - k - 1)\sigma_0^2 .$$

Een zuivere schatter voor σ_0^2 krijgen we dus door de restkwadratensom te delen door het bijbehorende aantal vrijheidsgraden $(n-k-1)$. Dit aantal vrijheidsgraden is gelijk aan het aantal waarnemingen n verminderd met het aantal aangepaste parameters $k+1$.

$$\hat{\sigma}_0^2 = s^2 = \frac{KS_r}{n - k - 1} .$$

Verder heeft KS_r/σ_0^2 een χ^2 - (chi-kwadraat) verdeling met $(n-k-1)$ vrijheidsgraden.

Met behulp van het Statistisch Compendium, tabel 3.1 of 3.2, kan dan, uitgaande van s^2 , een betrouwbaarheidsinterval voor σ_0^2 of σ_0 worden bepaald.

In voorbeeld 3.2.2 wordt voor de restkwadratensom voor de beide gevallen het volgende gevonden. Bij de eerste proefopzet (notatie pag. 18 onderaan) geldt

$$\begin{aligned}
 y'y - b'X'y &= \sum_{i,j} y_{ij}^2 - [\bar{y}_{1.} \quad \bar{y}_{2.} \quad - \bar{y}_{1.}] \begin{bmatrix} y_{..} \\ y_{2.} \end{bmatrix} = \\
 &= \sum_j y_{1j}^2 + \sum_j y_{2j}^2 - 10\bar{y}_{1.}(\bar{y}_{1.} + \bar{y}_{2.}) - 10(\bar{y}_{2.} - \bar{y}_{1.})\bar{y}_{2.} = \\
 &= \sum_j y_{1j}^2 - 10\bar{y}_{1.}^2 + \sum_j y_{2j}^2 - 10\bar{y}_{2.}^2 = \\
 &= \sum_j (y_{1j} - \bar{y}_{1.})^2 + \sum_j (y_{2j} - \bar{y}_{2.})^2 .
 \end{aligned}$$

In woorden: de restkwadratensom is de som van de beide kwadratensommen binnen de beide steekproeven. Deze hebben elk 9 vrijheidsgraden, in totaal $18 = 20 - 2$ vrijheidsgraden.

Bij de tweede proefopzet kan worden aangetoond dat de restkwadratensom gelijk is aan

$$\frac{1}{2} \sum_i (d_i - \bar{d}_.)^2 ,$$

waarin

$$d_i := y_{2i} - y_{1i} \quad (i = 1, \dots, 10) .$$

In voorbeeld 3.2.1 kunnen we op twee manieren de restkwadratensom berekenen. In de eerste plaats met de formule

$$z'z - b'X'z$$

en de op pag. 17 gevonden waarden

$$z'z = \sum z_i^2 = 1686,10$$

$$b'X'z = \frac{1}{84} (473,2 \times 95,0 + 26,4 \times 384,2 + 45,2 \times 1875,4) = 1665,06 .$$

(Voor het verkrijgen van een nauwkeurigere uitkomst is de factor $\frac{1}{84}$ apart gehouden.)

Dus

$$KS_r = 1686,10 - 1665,06 = 21,04 .$$

Verder kunnen we berekenen:

$$\hat{y} = Xb = 5,63 x_0 + 0,31 x_1 + 0,54 x_2$$

en vervolgens de residuen: $(y_i - \hat{y}_i) =: r_i$. Het resultaat is: $r'r = 21,04$.

Deze berekening is uitgevoerd ter controle.

De schatting van σ_0^2 is:

$$\hat{\sigma}_0^2 = \frac{21,04}{4} = 5,26, \quad \hat{\sigma}_0 = 2,29.$$

(Het aantal vrijheidsgraden bedraagt $n - (k + 1) = 7 - 3 = 4$.)

Een betrouwbaarheidsinterval voor σ_0 vinden we met tabel 3.2 van het compendium (onbetrouwbaarheid 5%, 2-zijdig):

$$0,60 \times 2,29 < \sigma_0 < 2,87 \times 2,29$$

of

$$1,37 < \sigma_0 < 6,57.$$

3.3.2. Betrouwbaarheidsintervallen en toetsen voor de β_i

Van de schatter \underline{b}_i voor β_i weten we dat hij zuiver is: $\mathcal{E}\underline{b}_i = \beta_i$. Verder is de variantie van \underline{b}_i gelijk aan het i -de element van de hoofddiagonaal van de matrix $(X'X)^{-1}\sigma_0^2$, waarvoor we na het voorafgaande nu een schatting hebben die we $\hat{\sigma}^2(\underline{b}_i)$ zullen noemen. Er geldt dus:

$$\hat{\sigma}^2(\underline{b}_i) = \{(X'X)^{-1}\}_{ii} \hat{\sigma}_0^2.$$

We weten dat \underline{b}_i normaal verdeeld is en dus heeft

$$\frac{\underline{b}_i - \beta_i}{\sigma(\underline{b}_i)}$$

een $N(0,1)$ verdeling. Wanneer $\sigma(\underline{b}_i)$ wordt vervangen door een schatter $\hat{\sigma}(\underline{b}_i)$ die berust op een χ^2 -verdeling met ν vrijheidsgraden, dan heeft het quotiënt

$$\frac{\underline{b}_i - \beta_i}{\hat{\sigma}(\underline{b}_i)}$$

een Student's t -verdeling met ν vrijheidsgraden.

De Student-verdeling is getabelleerd in tabel 2.1 van het Statistisch Compendium. Het gebruik van deze tabel zullen we nog toelichten aan de hand van voorbeeld 3.2.1.

In de vorige paragraaf vonden wij $\hat{\sigma}_0^2 = 5,26$, berustend op 4 vrijheidsgraden.

$$\hat{\sigma}^2(\underline{b}_0) = \frac{1}{84} \times 64 \times 5,26 = 4,01, \quad \hat{\sigma}(\underline{b}_0) = 2,00$$

$$\hat{\sigma}^2(\underline{b}_1) = \frac{1}{84} \times 39 \times 5,26 = 2,44, \quad \hat{\sigma}(\underline{b}_1) = 1,56$$

$$\hat{\sigma}^2(\underline{b}_2) = \frac{1}{84} \times 1 \times 5,26 = 0,063, \quad \hat{\sigma}(\underline{b}_2) = 0,25.$$

Het betrouwbaarheidsinterval met 95% betrouwbaarheid ($P(-2,78 < \underline{t} < 2,78) = 0,95$) voor β_0 is

$$5,633 - 2,78 \times 2,00 < \beta_0 < 5,633 + 2,78 \times 2,00$$

of

$$0,07 < \beta_0 < 11,19 \quad (\beta_0 = 6,00).$$

Evenzo:

$$- 4,02 < \beta_1 < 4,65 \quad (\beta_1 = - 2,00)$$

$$- 0,16 < \beta_2 < 1,23 \quad (\beta_2 = 1,00).$$

Het toetsen van een bepaalde β -waarde gaat weer analoog aan het toetsen met de normale verdeling als σ_0 bekend is, maar nu met de t-verdeling. Stel bv. dat de hypothese $H_0: \beta_0 = 10$ moet worden getoetst. Wij berekenen

$$t = \frac{b_0 - 10}{\hat{\sigma}(b_0)} = \frac{5,63 - 10}{2,00} = - 2,18.$$

Uit tabel 2.1 (4 vrijheidsgraden) volgt dat de tweezijdige overschrijdingskans dicht bij 10% ligt. Bij een onbetrouwbaarheidsniveau van 5% kunnen we H_0 niet verwerpen (vergelijk het betrouwbaarheidsinterval) maar enige twijfel is gerechtvaardigd.

Om nauwere betrouwbaarheidsintervallen te verkrijgen moeten meerdere waarnemingen worden uitgevoerd. Het heeft het dubbele effect dat de elementen van de $(X'X)^{-1}$ matrix kleiner worden en het aantal vrijheidsgraden groter.

De schatters \underline{b}_1 en \underline{b}_2 zijn hoog gecorreleerd met een negatieve correlatiecoëfficiënt. Deze is af te lezen uit de $(X'X)^{-1}$ matrix (pag. 17)

$$\rho(\underline{b}_1, \underline{b}_2) = \frac{-6}{\sqrt{39 \times 1}} = -0,961 .$$

Dit komt omdat de vectoren x_1 en x_2 sterk afhankelijk zijn. Dit verschijnsel heet verstrengeling (confounding) en is inherent aan de proefopzet. Wanneer men b_1 iets kleiner en b_2 iets groter maakt blijft de aanpassing vrijwel hetzelfde. Eigenlijk zou men daarvan het gebied waarin (β_1, β_2) waarden kunnen voorkomen in het β_1, β_2 -vlak moeten bekijken. Men verkrijgt dan een betrouwbaarheidsellips.

3.3.3. Toetsen en schatten van een lineaire functie van de β_i

Vaak is een lineaire functie van de parameters van groot belang voor de onderzoeker. Als bv. in een bepaald model β_1 het verschil tussen de behandelingen B en A voorstelt en β_2 het verschil tussen C en A, dan komt $\beta_2 - \beta_1$ met het verschil tussen de behandelingen C en B overeen. Als het verschil tussen C en B van belang is moet dus een uitspraak worden gedaan over $\beta_2 - \beta_1$.

In het algemeen beschouwen we een lineaire combinatie

$$l = a_0\beta_0 + a_1\beta_1 + \dots + a_k\beta_k = a'\beta .$$

De schatter

$$\hat{l} = a_0\underline{b}_0 + a_1\underline{b}_1 + \dots + a_k\underline{b}_k = a'\underline{b}$$

heeft als verwachting l zoals direct is in te zien.

De variantie van \hat{l} is:

$$\text{var}(\hat{l}) = a' \text{var}(\underline{b})a = a'(X'X)^{-1} a\sigma_0^2 .$$

Immers:

$$\begin{aligned} \text{var}(\hat{l}) &= \mathcal{E}(a'\underline{b} - a'\beta)^2 = \mathcal{E}(a'\underline{b} - a'\beta)(\underline{b}'a - \beta'a) = \\ &= \mathcal{E}a'(\underline{b} - \beta)(\underline{b} - \beta)'a = a' \text{var}(\underline{b})a . \end{aligned}$$

Bij bekende σ_0^2 zouden weer betrouwbaarheidsintervallen en toetsen op de normale verdelingen gebaseerd kunnen worden. Vervanging van σ_0^2 door $\hat{\sigma}_0^2$ betekent dat de Student-verdeling moet worden gebruikt.

Als voorbeeld beschouwen wij \underline{b}_1 en \underline{b}_2 uit voorbeeld 3.2.1. Wij zagen dat \underline{b}_1 en \underline{b}_2 sterk negatief gecorreleerd zijn. Hoe goed is nu $\underline{b}_1 + \underline{b}_2$ als schatter voor $\beta_1 + \beta_2$? Wij beschouwen dus

$$k = 0 \beta_0 + 1 \beta_1 + 1 \beta_2 .$$

De schatter $\underline{b}_1 + \underline{b}_2$ heeft dus als variantie:

$$\begin{aligned} [0 \quad 1 \quad 1](X'X)^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \sigma_0^2 &= \\ &= [0 \quad 1 \quad 1] \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 64 & -39 & 5 \\ -39 & 39 & -6 \\ 5 & -6 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \sigma_0^2 = \frac{28}{84} \sigma_0^2 = \frac{1}{3} \sigma_0^2 . \end{aligned}$$

Dit was ook eenvoudiger in te zien:

$$\begin{aligned} \text{var}(\underline{b}_1 + \underline{b}_2) &= \text{var}(\underline{b}_1) + 2 \text{cov}(\underline{b}_1, \underline{b}_2) + \text{var}(\underline{b}_2) = \\ &= \frac{1}{84} (39 - 12 + 1) \sigma_0^2 = \frac{1}{3} \sigma_0^2 . \end{aligned}$$

Dus

$$\hat{\sigma}^2(\underline{b}_1 + \underline{b}_2) = \frac{1}{3} \times 5,26 = 1,75 ; \quad \hat{\sigma}(\underline{b}_1 + \underline{b}_2) = 1,32 .$$

Het betrouwbaarheidsinterval voor $\beta_1 + \beta_2$ is dus:

$$0,852 - 2,78 \times 1,32 < \beta_1 + \beta_2 < 0,852 + 2,78 \times 1,32$$

of

$$- 2,82 < \beta_1 + \beta_2 < 4,52 \quad (\beta_1 + \beta_2 = - 1,00) .$$

Voorbeeld 3.3.1.

Men wil de invloed van de viscositeit van olie en van de temperatuur op de slijtage van de cilinderwand van een dieselmotor nagaan. Men neemt beide factoren (viscositeit en temperatuur) op 2 niveaus en beproeft de 4 combinaties bij 2 motoren. Dit heet een 2 x 2 factorieel schema met 2 herhalingen (replicates) in 2 blokken.

Het resultaat is weergegeven in de volgende tabel:

Motor (blok)	Viscositeit	x_1	temperatuur	x_2	slijtage
1	5	-1	10	-1	3
	5	-1	20	1	5
	10	1	10	-1	7
	10	1	20	1	4
2	5	-1	10	-1	5
	5	-1	20	1	8
	10	1	10	-1	9
	10	1	20	1	5

De gekozen codering, nl.

$$x_1 = \frac{\text{viscositeit} - 7,5}{2,5}$$

$$x_2 = \frac{\text{temperatuur} - 15}{5}$$

is de handigste wanneer we met factoren op 2 niveaus te maken hebben. Dit vereenvoudigt namelijk de $(X'X)$ matrix zoals straks zal blijken. Wij nemen als model

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \beta_4 x_3 + \underline{e}.$$

Zoals in paragraaf 3.1 is uiteengezet zouden wij β_0 met de gemiddelde responsie in blok 1 kunnen laten corresponderen. Als dan $x_3 = 0$ in blok 1 en $x_3 = 1$ in blok 2, dan is β_4 het verschil tussen blok 1 en blok 2. Nu er slechts 2 blokken zijn is het eenvoudiger om $x_3 = -1$ te nemen in blok 1 en $x_3 = +1$ in blok 2, dus overeenkomstig de codering voor de beide factoren. Dan is β_0 het algemene gemiddelde en β_4 het halve verschil tussen de blokken. Als we de meest rechtse kolom van de tabel als y -vector nemen, dan is de X -matrix:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

We berekenen verder:

$$X'X = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix} = I \cdot 8 \Rightarrow (X'X)^{-1} = \frac{1}{8} I .$$

$$X'y = \begin{bmatrix} 46 \\ 4 \\ -2 \\ -12 \\ 8 \end{bmatrix}, \quad b = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} 46 \\ 4 \\ -2 \\ -12 \\ 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5,75 \\ 0,50 \\ -0,25 \\ -1,50 \\ 1,00 \end{bmatrix} .$$

De $X'X$ matrix en diens omgekeerde $(X'X)^{-1}$ zijn zo eenvoudig omdat door de codering de kolommen van X onderling orthogonaal zijn. De schattingen b zijn diens omgekeerde ook zeer eenvoudig van structuur. Zo is bv. b_1 $\frac{1}{8}$ maal (de som van alle waarnemingen bij de hoge viscositeit verminderd met de som van alle waarnemingen bij de lage viscositeit).

De restkwadratensom is

$$KS_r = y'y - b'X'y = 294 - 293 = 1 .$$

Het aantal vrijheidsgraden is $8 - 4 - 1 = 3$. Dus $\hat{\sigma}_0^2 = \frac{1}{3}$, $\hat{\sigma}_0 = 0,577$.

Alle elementen van b hebben dezelfde variantie, nl. $\frac{1}{8} \sigma_0^2$.

De betrouwbaarheidsintervallen voor de β_i hebben daarom allemaal dezelfde lengte ($\alpha = 0,05$)

$$b_i - 3,18 \times \sqrt{\frac{1}{3} \times \frac{1}{8}} < \beta_i < b_i + 3,18 \times \sqrt{\frac{1}{3} \times \frac{1}{8}} \quad (i = 0, 1, \dots, 4)$$

of

$$b_i - 0,65 < \beta_i < b_i + 0,65 .$$

We zien dus onmiddellijk dat b_1 en b_2 niet significant van 0 verschillen, maar de interactieterm b_3 wel.

Het teken van b_3 is negatief, lage slijtage treedt dus op als $x_1 x_2$ positief is, dus x_1 en x_2 beide negatief (lage viscositeit en lage temperatuur) of beide positief (hoge viscositeit en hoge temperatuur).

3.4. Variantie-analyse en toetsen voor meerdere parameters

In voorbeeld 3.2.1 gingen wij uit van het model

$$\underline{z} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_1^2 + \underline{e} .$$

Wij zagen in paragraaf 3.3 hoe de hypothesen $\beta_1 = 0$ en $\beta_2 = 0$ apart kunnen worden getoetst. Wanneer we veel van dergelijke toetsen voor afzonderlijke parameters uitvoeren duiken er twee problemen op. Wanneer bij elke toets een onbetrouwbaarheid van bv. 0,05 wordt aangehouden, wat is dan de kans dat van de 10 hypothesen er één of meer ten onrechte worden verworpen? Deze kans kan wel eens onaanvaardbaar hoog worden. De zaak wordt gecompliceerd door het feit dat de toetsingsgrootheden alle dezelfde noemer hebben en daardoor afhankelijk zijn.

Wanneer we nu willen toetsen of z van x_1 afhangt (lineair of eventueel kwadratisch) dan kan dat in één keer gebeuren door het toetsen van de hypothese $H_0: \beta_1 = \beta_2 = 0$.

Uitgaande van de veronderstelling van normaal verdeelde \underline{e} zoals ook in 3.3 werd gedaan kan worden bewezen dat de volgende toetsingsmethode kan worden toegepast.

We vonden als restkwadratensom 21,04 met 4 vrijheidsgraden. Onder de nulhypothese is het model:

$$\underline{z} = \beta_0 + \underline{e} .$$

De schatting voor β_0 is \bar{z} en de restkwadratensom in dit gereduceerde model is

$$KS_{r0} = \sum (z_i - \bar{z})^2 = \sum z_i^2 - 7\bar{z}^2 = 1686,10 - 1289,29 = 396,81 .$$

Het aantal vrijheidsgraden is nu 6.

Het aanpassen van β_1 en β_2 levert dus nog een reductie in de kwadratensom op van

$$KS_{r0} - KS_r = 396,81 - 21,04 = 375,77 .$$

Het kan worden bewezen dat onder H_0 het volgende geldt:

KS_r/σ_0^2 is trekking uit χ^2 -verdeling met 4 vrijheidsgraden.

$(KS_{r0} - KS_r)/\sigma_0^2$ is trekking uit χ^2 -verdeling met 2 vrijheidsgraden.

KS_{r0}/σ_0^2 is trekking uit χ^2 -verdeling met 6 vrijheidsgraden.

Verder zijn, nog steeds onder H_0 , \underline{KS}_r en $(\underline{KS}_{r0} - \underline{KS}_r)$ onafhankelijk van elkaar. Dit heeft tot gevolg dat

$$\frac{(\underline{KS}_{r0} - \underline{KS}_r)/2}{\underline{KS}_r/4}$$

een F-verdeling heeft met 2 en 4 vrijheidsgraden.

In ons geval is

$$F = \frac{4}{2} \frac{375,77}{21,04} = 35,72 .$$

In tabel 4.1 van het compendium zien we dat de kritieke waarde ($\alpha = 0,05$) gelijk is aan 6,94. Dit resultaat is dus sterk significant, m.a.w. de hypothese $\beta_1 = \beta_2 = 0$ moet worden verworpen, terwijl in paragraaf 3.3 bleek dat de hypothesen $\beta_1 = 0$ en $\beta_2 = 0$ afzonderlijk niet konden worden verworpen. Dit hangt samen met de eerder genoemde negatieve correlatie tussen \underline{b}_1 en \underline{b}_2 .

Nu het algemene geval. Wij gaan nu weer uit van het algemene lineaire model

$$(1) \quad \underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + \underline{e}$$

en we willen de hypothese toetsen dat een aantal β 's nul zijn. Zonder verlies van algemeenheid kunnen we hiervoor $\beta_{g+1}, \beta_{g+2}, \dots, \beta_k$ nemen ($g < k$). De hypothese luidt dus:

$$H_0: \beta_{g+1} = \beta_{g+2} = \dots = \beta_k = 0 .$$

Onder H_0 is het model dus:

$$(2) \quad \underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_g x_g + \underline{e} .$$

Wanneer zowel met model (1) als met model (2) de restkwadratensom wordt uitgerekend, dan vinden we respectievelijk KS_r en KS_{r0} . Het is duidelijk dat de restkwadratensom kleiner wordt naarmate het aantal aangepaste parameters groter is, dus geldt $KS_r \leq KS_{r0}$.

Als H_0 waar is hebben zowel $\underline{KS}_r/\sigma_0^2$ als $\underline{KS}_{r0}/\sigma_0^2$ χ^2 -verdelingen met respectievelijk $(n-k-1)$ en $(n-g-1)$ vrijheidsgraden. Ook het verschil $(\underline{KS}_{r0} - \underline{KS}_r)/\sigma_0^2$ heeft een χ^2 -verdeling en wel met $(n-g-1) - (n-k-1) = k-g$ vrijheidsgraden. Nog steeds onder H_0 geldt dus

$$\begin{aligned} \mathfrak{E}\underline{KS}_r &= (n - k - 1)\sigma_0^2 \\ \mathfrak{E}(\underline{KS}_{r0} - \underline{KS}_r) &= (k - g)\sigma_0^2 . \end{aligned}$$

Verder kan worden bewezen dat, onder H_0 , deze twee stochastische variabelen onafhankelijk zijn (met elk een χ^2 -verdeling). Dan is het quotiënt

$$F = \frac{(\underline{KS}_{r0} - \underline{KS}_r)/(k - g)}{\underline{KS}_r/(n - k - 1)}$$

verdeeld volgens een F-verdeling met $(k-g)$ en $(n-k-1)$ vrijheidsgraden. Als de nulhypothese niet juist is, als van $\beta_{g+1}, \beta_{g+2}, \dots, \beta_k$ minstens één van nul verschilt, dan is het model (2) niet meer juist en dan zal de verwachting van \underline{KS}_{r0} groter zijn dan $(n-g-1)\sigma_0^2$. Dan wordt ook de verwachting van de teller van F groter en dus zullen grote F-waarden leiden tot verwerping van H_0 . De F-toets is dus bij deze toepassing altijd rechtseenzijdig.

Opmerking. We vermelden zonder bewijs dat de hiervoor beschreven F-toets voor het geval $g = k-1$, dus $H_0: \beta_k = 0$, equivalent is met de eerder besproken t-toets voor de hypothese $H_0: \beta_k = 0$, waarbij geldt $F = t^2$.

In veel gevallen kunnen eenvoudige regels worden toegepast om het verschil $\underline{KS}_{r0} - \underline{KS}_r$ af te leiden, zonder dat de kleinste kwadraten aanpassing twee keer uitgevoerd hoeft te worden.

Stel we willen bij het voorbeeld van de twee wasmiddelen (voorbeelden 2.1.3, 3.1.2 en 3.2.2) bij de eerste proefopzet de hypothese $H_0: \beta_1 = 0$ toetsen (geen verschil tussen de wasmiddelen).

We zagen (pag. 22) dat

$$KS_r = \sum_j (y_{1j} - \bar{y}_{1.})^2 + \sum_j (y_{2j} - \bar{y}_{2.})^2 = \sum_{i,j} y_{ij}^2 - 10\bar{y}_1^2 - 10\bar{y}_2^2 .$$

Onder de hypothese $\beta_1 = 0$ wordt het model (vgl. pag. 12)

$$\underline{y} = \beta_0 + \underline{e} .$$

We vinden als schatter $\underline{b}_0 = \bar{y}_{..}$ en

$$KS_{r0} = \sum_{i,j} (y_{ij} - \bar{y}_{..})^2 = \sum_{i,j} y_{ij}^2 - 20\bar{y}_{..}^2 .$$

Dus

$$KS_{r0} - KS_r = 10\bar{y}_1^2 + 10\bar{y}_2^2 - 20\bar{y}_{..}^2 = \frac{y_1^2}{10} + \frac{y_2^2}{10} - \frac{y_{..}^2}{20} .$$

De teller van het F-quotiënt, waarmee wordt getoetst dat de factor wasmiddelen geen invloed heeft, wordt dus als volgt gevonden: per niveau van de factor worden de waarnemingen gesommeerd en elke som wordt gekwadraterd en gedeeld door het aantal waarnemingen. Deze resultaten worden opgeteld en verminderd met de correctiefactor $y_{..}^2/20$. Deze correctiefactor bestaat uit het kwadraat van de som van alle waarnemingen gedeeld door het totale aantal waarnemingen. De correctiefactor wordt ook wel kwadratensom voor het gemiddelde genoemd.

Het resultaat kan in een zogenaamde variantie-analyse-tabel worden samengevat:

Bron van variatie	vr.gr.	K.S.	G.K.	F
correctiefactor	1	$y_{..}^2/20$	(1)	...
wasmiddelen	1	$y_1^2/10 + y_2^2/10 - y_{..}^2/20$	(2)	(2)/(3)
rest	18	$\sum y_{ij}^2 - y_1^2/10 - y_2^2/10$	(3)	-
totaal	20	$\sum y_{ij}^2$	-	-

Toelichting. G.K. = "gemiddelde kwadratensom"; in de G.K.-kolom staan op de regels (1), (2) en (3) de kwadratensommen van de vorige kolom (K.S.) elk gedeeld door het bijbehorende aantal vrijheidsgraden.

Opmerking. Vaak wordt de correctiefactor weggelaten. Op de laatste regel (totaal) staat dan de K.S. ($\sum y_{ij}^2 - y_{..}^2/20$) met 19 vrijheidsgraden.

3.5. Variantie-analyse voor orthogonale proefschemas

Een proefopzet heet orthogonaal als de kleinste kwadratenschatters voor de parameters bij een factor ongecorreleerd zijn met de parameterschatters van een andere factor. Men kan bewijzen, dat proefopzetten waarbij voor elk paar factoren geldt dat ieder niveau van de ene factor even vaak voorkomt met alle niveaus van de tweede factor, orthogonaal zijn. Dit wil zeggen, dat er een codering te vinden is zó, dat de bijbehorende parameterschatters aan bovenstaande eis voldoen.

Het reeds behandelde voorbeeld 3.3.1 (pag. 26 e.v.) vormt hiervan een illustratie. In feite zijn de meeste eenvoudige proefopzetten, waarvan wij verschillende in de volgende hoofdstukken zullen behandelen, orthogonaal. Ook de eerder besproken tweede proefopzet voor het vergelijken van twee wasmiddelen is orthogonaal met twee factoren (wasmiddelen en blokken).

Orthogonaliteit van een proefopzet heeft een aantal gevolgen die het toetsen sterk vereenvoudigen. In de eerste plaats is het niet nodig om, zoals voor het algemene geval in paragraaf 3.4 werd beschreven, twee keer een lineair model aan te passen als we willen toetsen of het hoofdeffect van een factor van nul verschilt. De reductie in de restkwadratensom $KS_{r0} - KS_r$ door het aanpassen van een uitgebreid model waarin de betreffende factor is opgenomen is nl. gelijk aan

$$\frac{1}{k} \sum_{i=1}^p T_i^2 - KS_0 .$$

Hierin is p het aantal niveaus van de factor, T_i is de som van de waarnemingen bij het i -de niveau en k is het aantal waarnemingen per niveau (dus $kp = n =$ het totale aantal waarnemingen). Verder is KS_0 de correctiefactor = $= (\sum \text{alle waarnemingen})^2/n$.

Verder kan de totale kwadratensom geschreven worden als de som van de kwadratensommen behorend bij de verschillende factoren plus de restkwadratensom. In de volgende hoofdstukken wordt dit voor verschillende klassen van proefschemas uitgewerkt.

4. Proefopzetten met verloting binnen blokken

In paragraaf 2.2 werd het principe van de blokvorming besproken. Het doel was om de doeltreffendheid van een experiment te verhogen door vergelijkingen te maken binnen een betrekkelijk homogene groep van experimentele eenheden. Bij het voorbeeld van de wasmiddelen (tweede proefopzet) waren er twee behandelingen die binnen tien blokken werden vergeleken.

In het algemene geval kunnen meerdere behandelingen binnen een blok worden vergeleken. De enige praktische beperking is dat bij een groot aantal behandelingen de blokken groot en dus waarschijnlijk minder homogeen worden. Binnen de blokken worden de behandelingen door loting over de experimentele eenheden verdeeld. Als we het aantal blokken b noemen en het aantal behandelingen p , dan is het model

$$\begin{aligned} \underline{y} = & \beta_0 + \underbrace{\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_{b-1} x_{b-1}}_{(b-1) \text{ blok verschillen}} + \\ & + \underbrace{\beta_b x_b + \beta_{(b+1)} x_{(b+1)} + \dots + \beta_{(b+p-2)} x_{(b+p-2)}}_{(p-1) \text{ behandeling verschillen}} + \underline{e} \end{aligned}$$

met b.v. de volgende codering

$x_1 = 1$ voor een waarneming in blok 2, anders 0

$x_2 = 1$ voor een waarneming in blok 3, anders 0

etc.

$x_b = 1$ voor een waarneming met behandeling 2, anders 0

$x_{(b+1)} = 1$ voor een waarneming met behandeling 3, anders 0

etc.

Voorbeeld 4.1.

Vier chemicaliën A, B, C en D hebben de eigenschap textiel waterafstotend te maken. Men wil de chemicaliën op deze eigenschap vergelijken. Daartoe worden 3 repen textiel afkomstig van verschillende rollen in 4 stukken gesneden en door loting wordt vastgesteld welke behandeling elk stuk zal ondergaan. Het resultaat is als volgt (laag getal = weinig opname van water):

Blokken (rollen)

1	2	3
C 9,9	D 13,4	B 12,7
A 10,1	B 12,9	D 12,9
B 11,4	A 12,2	C 11,4
D 12,1	C 12,3	A 11,9

Een overzichtelijkere samenvatting geeft de volgende tabel:

→ j

		A	B	C	D	Totaal	Gemiddeld
i ↓	Behandeling 1	10,1	11,4	9,9	12,1	43,5	10,875
	Blokken 2	12,2	12,9	12,3	13,4	50,8	12,700
	3	11,9	12,7	11,4	12,9	48,9	12,225
	Totaal	34,2	37,0	33,6	38,4	143,2	
	Gemiddeld	11,400	12,333	11,200	12,800		

$$i = 1, 2, 3; j = 1, 2, 3, 4$$

Het model is

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_4 + \beta_5 x_5 + \underline{e}.$$

β_0 is het gemiddelde voor blok 1 en behandeling A, β_1 en β_2 geven de verschillen tussen de blokken 2 en 1, respectievelijk 3 en 1, β_3 , β_4 en β_5 zijn de gemiddelde verschillen van de behandelingen B, C en D met A.

De matrices (vectoren) y , X , $X'X$ en $X'y$ zien er als volgt uit (let op de gekozen volgorde voor de waarnemingen y):

$$y = \begin{bmatrix} 10.1 \\ 12.2 \\ 11.9 \\ 11.4 \\ 12.9 \\ 12.7 \\ 9.9 \\ 12.3 \\ 11.4 \\ 12.1 \\ 13.4 \\ 12.9 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} 12 & 4 & 4 & 3 & 3 & 3 \\ 4 & 4 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 0 & 4 & 1 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 & 3 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 1 & 0 & 3 & 0 \\ 3 & 1 & 1 & 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}, \quad X'y = \begin{bmatrix} 143,2 \\ 50,8 \\ 48,9 \\ 37,0 \\ 33,6 \\ 38,4 \end{bmatrix}$$

De inverse van $X'X$ blijkt te zijn

$$(X'X)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & \frac{2}{3} \end{bmatrix}$$

We zien dat, zoals in paragraaf 3.5 werd opgemerkt, de schatters \underline{b}_1 en \underline{b}_2 enerzijds en \underline{b}_3 , \underline{b}_4 en \underline{b}_5 anderzijds ongecorrleerd zijn. De inversie van de matrix $X'X$ is tamelijk vervelend, maar bij een schema van deze structuur ook niet

noodzakelijk. De schattingen voor de β 's kunnen nl. wel eenvoudiger worden gevonden. Zo geeft β_1 het gemiddelde verschil weer tussen de blokken 1 en 2. Het ligt daarom voor de hand dat de schatting b_1 wordt gevonden door de waargenomen blokgemiddelden voor de betreffende blokken van elkaar af te trekken:

$$b_1 = \bar{y}_{2.} - \bar{y}_{1.} = 12,700 - 10,875 = 1,825$$

en

$$b_2 = \bar{y}_{3.} - \bar{y}_{1.} = 12,225 - 10,875 = 1,350 .$$

Voor de schattingen van de verschillen tussen de behandelingen geldt hetzelfde:

$$b_3 = \bar{y}_{.2} - \bar{y}_{.1} = 12,33 - 11,400 = 0,933$$

$$b_4 = \bar{y}_{.3} - \bar{y}_{.1} = 11,200 - 11,400 = - 0,200$$

$$b_5 = \bar{y}_{.4} - \bar{y}_{.1} = 12,800 - 11,400 = 1,400 .$$

Om tenslotte b_0 te kunnen berekenen bedenken wij dat b de oplossing is van de vergelijkingen

$$X'Xb = X'y .$$

De laatste van deze vergelijkingen is dus

$$3b_0 + b_1 + b_2 + 3b_5 = 38,4 .$$

Hieruit volgt

$$b_0 = 10,3417 .$$

Om de restvariantie redelijk nauwkeurig te kunnen berekenen moeten nog meer decimalen worden meegenomen:

$$b = \begin{bmatrix} 10,341667 \\ 1,825000 \\ 1,350000 \\ 0,933333 \\ - 0,200000 \\ 1,400000 \end{bmatrix} , \quad \text{of} \quad \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 31,025 \\ 5,475 \\ 4,050 \\ 2,800 \\ - 0,600 \\ 4,200 \end{bmatrix}$$

In ons voorbeeld kunnen we controleren dat alles inderdaad in overeenstemming is met formule $b = (X'X)^{-1} X'y$, door gebruik te maken van de formule $X'Xb = X'y$.

De restkwadratensom wordt dan

$$KS_r = y'y - b'X'y = 1721,7600 - 1721,2250 = 0,535 .$$

Dus

$$\hat{\sigma}_0^2 = \frac{0,535}{12-6} = 0,0892 \quad (v = 6) ; \quad \hat{\sigma}_0 = 0,299 .$$

De varianties en covarianties van $\underline{b}_1, \dots, \underline{b}_5$ (\underline{b}_0 is minder interessant!) kunnen ook worden afgeleid zonder inversie van de $X'X$ -matrix. Zo is \underline{b}_1 het verschil van twee gemiddelden van 4 waarnemingen die alle de variantie σ_0^2 hebben, dus

$$\text{var}(\underline{b}_1) = \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\right)\sigma_0^2 = \frac{1}{2}\sigma_0^2 .$$

Hetzelfde geldt voor \underline{b}_2 . Verder is analoog

$$\text{var}(\underline{b}_3) = \text{var}(\underline{b}_4) = \text{var}(\underline{b}_5) = \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{3}\right)\sigma_0^2 = \frac{2}{3}\sigma_0^2 .$$

De covarianties kunnen op soortgelijke wijze worden afgeleid. Bv.

$$\underline{b}_2 - \underline{b}_1 = \bar{y}_3 - \bar{y}_2 .$$

dus

$$\text{var}(\underline{b}_2 - \underline{b}_1) = \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{4}\right)\sigma_0^2 = \frac{1}{2}\sigma_0^2 .$$

Maar ook geldt

$$\begin{aligned} \text{var}(\underline{b}_2 - \underline{b}_1) &= \text{var}(\underline{b}_2) - 2 \text{cov}(\underline{b}_2, \underline{b}_1) + \text{var}(\underline{b}_1) = \\ &= \frac{1}{2}\sigma_0^2 - 2 \text{cov}(\underline{b}_2, \underline{b}_1) + \frac{1}{2}\sigma_0^2 . \end{aligned}$$

Dus

$$2 \text{cov}(\underline{b}_2, \underline{b}_1) = \frac{1}{2}\sigma_0^2 \Rightarrow \text{cov}(\underline{b}_2, \underline{b}_1) = \frac{1}{4}\sigma_0^2 .$$

Toetsen en betrouwbaarheidsintervallen voor individuele β 's en voor lineaire combinaties staan ons dus nu ter beschikking.

Een interessante hypothese is

$$H_0: \beta_3 = \beta_4 = \beta_5 = 0 \quad (\alpha = 0,05)$$

(Dat wil zeggen: geen verschillen tussen chemicaliën.)

Aanpassing van het gereduceerde model

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \underline{e}$$

leidt tot de restkwadratensom

$$KS_{r0} = 5,735 \quad (9 \text{ vrijheidsgraden}).$$

Dit resultaat kan worden gevonden door de procedure schatten van b en berekenen van $y'y - b'Xy$ te herhalen, maar ook door te bedenken dat KS_{r0} is opgebouwd uit drie kwadratensommen binnen blokken ieder met 3 vrijheidsgraden (ga dit zelf na). De F-toets (vgl. paragraaf 3.4) is dus

$$F = \frac{(5,735 - 0,535)/(9 - 6)}{(0,535)/6} = \frac{1,733}{0,0892} = 19,4 .$$

De kritieke waarde voor $\alpha = 0,05$ en $v_1 = 3$, $v_2 = 6$ is 4,76. De gevonden waarde ligt onder de kritieke waarde voor $\alpha = 0,005$ (12,9). Er is dus voldoende reden om aan te nemen dat de behandelingen verschillen.

De methode van de variantie-analyse geeft dit resultaat veel sneller. De berekening loopt als volgt:

$$\text{Correctiefactor} = \frac{(143,2)^2}{12} = 1708,8533$$

$$\sum y^2 = 1721,7600$$

$$KS_t = 1721,7600 - 1708,8533 = 12,907$$

$$KS_{B\lambda} = \frac{(43,5)^2}{4} + \frac{(50,8)^2}{4} + \frac{(48,9)^2}{4} - \frac{(143,2)^2}{12} = 7,172$$

$$KS_{Beh} = \frac{(34,2)^2}{3} + \frac{(37,0)^2}{3} + \frac{(33,6)^2}{3} + \frac{(38,4)^2}{3} - \frac{(143,2)^2}{12} = 5,200$$

$$KS_r = KS_t - (KS_{B\lambda} + KS_{Beh}) = 0,535 .$$

De Variantie-analyse-tabel is:

Bron van variatie	vr.gr.	KS	GK	F
blokken	2	7,172	3,586	40,2
behandelingen	3	5,200	1,733	19,4
rest	6	0,535	0,0892	
totaal	11	12,907		

Ook de verschillen tussen blokken zijn dus sterk significant ($F_{0,005} (v_1 = 2, v_2 = 6) = 14,5$).

Op pag. 38 werd afgeleid dat

$$\text{var}(\underline{b}_3) = \text{var}(\underline{b}_4) = \text{var}(\underline{b}_5) = \frac{2}{3} \sigma_0^2 .$$

Ook geldt

$$\text{var}(\underline{b}_3 - \underline{b}_4) = \text{var}(\underline{b}_3 - \underline{b}_5) = \text{var}(\underline{b}_4 - \underline{b}_5) = \frac{2}{3} \sigma_0^2 ,$$

omdat we in elk van deze gevallen te maken hebben met het verschil van twee gemiddelden per behandeling, gemiddelden dus van 3 waarnemingen.

We zouden dus met de t-toets voor elk paar behandelingen kunnen toetsen of ze verschillen. De kritieke waarde voor elk van deze verschillen ($\alpha = 0,05$) is

$$2,45 \times \sqrt{\frac{2}{3} \times 0,0892} = 0,598 .$$

Vergelijking met de tabel op pag. 35 leert dat A en C niet significant verschillen en B en D evenmin, maar dat er wel verschillen zijn tussen A en B, A en D, C en B en C en D.

Er moet echter wel met nadruk op worden gewezen dat dit vergelijken van paren behandelingen niet mag worden uitgevoerd in plaats van een variantie-analyse-toets voor de hypothese $H_0: \beta_3 = \beta_4 = \beta_5 = 0$, maar alleen in aansluiting op de variantie-analyse als de globale hypothese dat alle behandelingen gelijk zijn is verworpen. Anders bestaat het gevaar dat te vaak ten onrechte zal worden geconcludeerd dat behandelingen verschillen, vooral als het aantal behandelingen vrij groot is. In dat geval zal namelijk al gauw worden geconcludeerd dat het grootste en het kleinste van een reeks gemiddelden significant van elkaar verschillen.

Er bestaan nog verschillende andere methoden om simultaan uitspraken over paarsgewijze vergelijkingen en algemenere lineaire combinaties te doen. Deze zogenaamde "multiple comparisons" methoden worden hier niet verder besproken.

5. Latijnse vierkanten

5.1. Twee-dimensionale blokvorming

Het principe van de blokvorming om de heterogeniteit van de experimentele eenheden uit te schakelen kan verder worden verfijnd door een principe toe te passen dat twee-dimensionale blokvorming genoemd kan worden.

Men kan zich voorstellen dat een proefveld een systematisch verloop in vruchtbaarheid vertoont in twee richtingen of dat een rol textiel systematische verschillen in treksterkte heeft in de lengte van de rol, maar ook in de dwarsrichting.

Door nu blokken te vormen in beide richtingen kunnen verschillen tussen behandelingen worden gemeten vrij van beide soorten heterogeniteit. Het schema dat op deze wijze ontstaat heet een Latijns vierkant. Een Latijns vierkant met de afmetingen $p \times p$ is een rangschikking van p letters in een $p \times p$ vierkant, zodat elke letter precies één keer in elke rij en precies één keer in elke kolom voorkomt.

Stel dat we dit principe toepassen op de probleemstelling beschreven in voorbeeld 4.1. Vier repen textiel worden nu dwars op de rol in 4 stukken gesneden en we krijgen het volgende schema:

		Kolommen			
		(positie dwars op de rol)			
		1	2	3	4
Rijen (rollen)	1	A	B	C	D
	2	B	C	D	A
	3	C	D	A	B
	4	D	A	B	C

We hebben nu te maken met 3 factoren, elk op 4 niveaus die onderling orthogonaal zijn, volgens de definitie van paragraaf 3.5.

Het schema dat hier is gekozen, namelijk in de eerste rij A B C D en de volgende rijen cyclisch gepermuteerd over één positie, is één van de 576 mogelijke 4×4 Latijnse vierkanten. Dit aantal wordt al vlug heel groot; voor $p = 6$ is het 812 851 200. Uitgaande van een schema kunnen we andere vinden door kolommen, rijen of behandelingen te permuteren. Bij toepassing moet een schema aselekt worden gekozen, bij de analyse van voorbeelden gaan we voor het gemak vaak uit van een standaardvorm, zoals hierboven.

Het model voor ons voorbeeld luidt:

$$\underline{y} = \beta_0 + \underbrace{\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3}_{\text{rijverschillen}} + \underbrace{\beta_4 x_4 + \beta_5 x_5 + \beta_6 x_6}_{\text{kolom verschillen}} + \underbrace{\beta_7 x_7 + \beta_8 x_8 + \beta_9 x_9}_{\text{behandeling verschillen}} + \underline{e} .$$

Belangrijk hierbij is, dat kan worden aangenomen dat de drie groepen effecten voor rijen, kolommen en behandelingen geen interacties hebben. Dit wil bv. zeggen dat als we aannemen dat er verschillen in wateropnamecapaciteit voorkomen in de dwarsrichting van de rol, dat deze verschillen voor alle rollen hetzelfde zijn. De juistheid van deze aanname is met de gebruikte proefopzet niet te toetsen. Zouden we dit willen doen dan moeten er herhalingen worden uitgevoerd.

De belangrijkste hypothese om te toetsen is die dat de behandelingen niet verschillen. In ons voorbeeld dus

$$H_0: \beta_7 = \beta_8 = \beta_9 = 0 .$$

Daarnaast kunnen we ook de hypothese toetsen dat de rijparameters nul zijn (geen verschillen tussen rollen) en de hypothese dat er geen verschillen tussen kolommen zijn. Daarvoor is het nodig dat we telkens de kwadratensommen $KS_{r0} - KS_r$, de afname van de restkwadratensom door aanpassing van de te toetsen parameters, kennen (vgl. pag. 31). Noem y_{ijk} de waarneming in de i -de rij, de j -de kolom en bij behandeling k ($i, j, k = 1, \dots, p$). We merken op dat i, j en k niet vrij van elkaar kunnen variëren, maar dat k vastligt zodra i en j gegeven zijn. De kwadratensommen voor rijen, kolommen en behandelingen geven we respectievelijk met KS_{Rij} , KS_{Kol} en KS_{Beh} aan. Dan kan worden bewezen dat geldt:

$$KS_{Rij} = \frac{\sum_{i=1}^p y_{i..}^2}{p} - KS_0 ,$$

$$KS_{Kol} = \frac{\sum_{j=1}^p y_{.j.}^2}{p} - KS_0$$

$$KS_{Beh} = \frac{\sum_{k=1}^p y_{...k}^2}{p} - KS_0 ,$$

$$\sum_{i,j} (y_{ijk} - \bar{y}_{...})^2 = KS_{Rij} + KS_{Kol} + KS_{Beh} + KS_r ,$$

als weer

$$KS_0 := y_{...}^2 / p^2 .$$

Uitgewerkt voorbeeld.

Stel de waarnemingen zijn in ons geval van $p = 4$ als volgt:

		Kolommen				
		1	2	3	4	Rij totaal
Rijen	1	A 19,5	B 16,8	C 19,8	D 19,2	75,3
	2	B 18,0	C 17,9	D 17,9	A 17,7	71,5
	3	C 18,1	D 21,0	A 17,5	B 17,2	73,8
	4	D 20,1	A 19,2	B 17,0	C 18,5	74,8
Kolom totaal		75,7	74,9	72,2	72,6	295,4
Behandeling totaal		A 73,9	B 69,0	C 74,3	D 78,2	295,4

$$KS_0 = \frac{(295,4)^2}{16} = 5453,8225$$

$$KS_{Rij} = \frac{(75,3)^2}{4} + \frac{(71,5)^2}{4} + \frac{(73,8)^2}{4} + \frac{(74,8)^2}{4} - KS_0 = 2,133$$

$$KS_{Kol} = \frac{(75,7)^2}{4} + \frac{(74,9)^2}{4} + \frac{(72,2)^2}{4} + \frac{(72,6)^2}{4} - KS_0 = 2,203$$

$$KS_{Beh} = \frac{(73,9)^2}{4} + \frac{(69,0)^2}{4} + \frac{(74,3)^2}{4} + \frac{(78,2)^2}{4} - KS_0 = 10,663$$

$$KS_t = \sum y^2 - KS_0 = 22,058$$

$$KS_r = KS_t - (KS_{Rij} + KS_{Kol} + KS_{Beh}) = 7,059$$

Dit resulteert in de volgende variantie-analyse tabel:

Bron van variatie	vr.gr.	KS	GK	F
Rijen	3	2,133	0,711	0,60
Kolommen	3	2,203	0,734	0,62
Behandelingen	3	10,663	3,554	3,02
Rest	6	7,059	1,177	
Totaal	15	22,058		

De kritieke waarde voor $\alpha = 0,05$ voor een F-quotiënt met 3 en 6 vrijheidsgraden is 4,76. Het gevonden resultaat is op dit niveau dus niet significant. De F-waarden voor rijen en kolommen zijn zelfs kleiner dan 1. Dit suggereert dat de blokvorming in dit geval niet veel zin heeft gehad. Er is geen enkele aanwijzing dat de rij- en kolomparameters β_1, β_2 en β_3 respectievelijk β_4, β_5 en β_6 van nul verschillen. We zouden dus een veel eenvoudiger model kunnen nemen:

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_7 x_7 + \beta_8 x_8 + \beta_9 x_9 + \underline{e}$$

We krijgen dan een variantie-analyse waarbij de kwadratensommen voor rijen en kolommen in de restkwadratensom zijn opgenomen:

Bron van variatie	vr.gr.	KS	GK	F
Behandelingen	3	10,663	3,554	3,74
Rest	12	11,395	0,950	
Totaal	15	22,058		

De kritieke waarde ($\alpha = 0,05$) bij 3 en 12 vrijheidsgraden is 3,49, dus nu vinden we wel een significant resultaat.

De conclusie dat de behandelingen toch van invloed zijn moet met enig voorbehoud worden getrokken. Het opnemen van kwadratensommen in de restkwadratensom volgens de één of andere regel (bv. als het F-quotiënt < 1 is of niet significant op één of ander niveau) heeft namelijk een niet exact bekende invloed op de onbetrouwbaarheid van de uiteindelijk toegepaste toets.

5.2. Grieks-Latijnse vierkanten

Het idee van de dubbele blokvorming en de rangschikking van de behandelingen in een Latijns vierkant kan nog een stap verder worden doorgevoerd. Na de blokvorming volgens rijen en kolommen kunnen nog blokken worden gevormd volgens een derde kenmerk, aangegeven met Griekse letters. Ook kunnen de Griekse letters betrekking hebben op de niveaus van een tweede factor die we willen onderzoeken. Voor de analyse is het nodig dat deze nieuwe factor weer orthogonaal is met de andere.

Voorbeeld:

A α	B β	C γ	D δ
B γ	A δ	D α	C β
C δ	D γ	A β	B α
D β	C α	B δ	A γ

Het is gemakkelijk te controleren dat ieder paar niveaus van twee factoren (rijen, kolommen, Latijnse letters, Griekse letters) precies één keer voorkomt. We hebben nu eigenlijk twee orthogonale Latijnse vierkanten gesuperponeerd. We kunnen nog een stap verder gaan en een derde vierkant op deze twee superponeren, zodat we een "Hebreeuws"-Grieks-Latijns of "Chinees"-Grieks-Latijns vierkant krijgen. Meer zijn er ook niet, er zijn maximaal $(p - 1)$ orthogonale $p \times p$ vierkanten. Voor $p = 3, 4, 5, 7, 8, 9, 11$ en 13 zijn er ook inderdaad $(p - 1)$ bekend.

Voor $p = 6$ is bewezen dat er geen Grieks-Latijns vierkant bestaat (dus zelfs geen tweetal orthogonale Latijnse vierkanten). Voor $p = 10$ is eerst in 1959 een paar orthogonale vierkanten gevonden en het is niet bekend of er meer dan 2 bestaan. Voor $p = 12$ is het aantal bekende orthogonale vierkanten onlangs uitgebreid van 2 tot 5.

6. Factoriële proefopzetten.

In voorbeeld 3.3.1 (pag. 26) hebben we reeds kennisgemaakt met een eenvoudig factorieel schema, nl. van twee kwantitatieve factoren op 2 niveaus met 2 herhalingen in blokken. Hetzelfde principe kan worden toegepast op elk willekeurig aantal factoren, elk op een willekeurig aantal niveaus. Wil het schema orthogonaal zijn, dan moet het aantal herhalingen per behandeling hetzelfde zijn. De factoren kunnen kwantitatief zijn (temperatuur, druk, viscositeit) of kwalitatief (4 chemicaliën, 3 types autobanden, 2 laboratoria).

In het lineaire model voor een factoriële proefopzet komen effecten en interacties voor. Het model in voorbeeld 3.3.1 was

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \beta_4 x_3 + \underline{e} .$$

De twee blokken vormen de niveaus van een derde kwalitatieve factor, die verondersteld wordt geen interactie met de beide andere factoren te hebben. Komt een kwantitatieve factor op meer dan twee niveaus voor, dan kan het model kwadratische en eventueel hogere termen voor het betreffende hoofdeffect bevatten. Als er bv. 4 niveaus zijn dan kunnen we de termen x_i , x_i^2 en x_i^3 opnemen. Dit is niet persé noodzakelijk. Als we er van overtuigd zijn dat een effect, als het bestaat, alleen lineair kan zijn of zeer goed lineair kan worden benaderd in het gebied dat wordt onderzocht, dan kunnen de termen x_i^2 en x_i^3 worden weggelaten.

Voor een kwalitatieve factor op p niveaus worden $p - 1$ dummy variabelen

$x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+p-2}$ in het model opgenomen.

Voor interacties tussen 2 of meer factoren geldt hetzelfde als voor kwantitatieve factoren. In de meest uitgebreide vorm worden interactietermen opgenomen waarin alle producten van termen van de betreffende factoren voorkomen. We laten nu een aantal voorbeelden volgen van volledige modellen, waarin dus het maximale aantal termen voorkomt. We duiden de factoren aan met de hoofdletters A, B,

Voorbeeld 6.1.

Twee factoren A en B, de tweede kwantitatief, op 2 resp. 3 niveaus (2×3 schema).

Model:

$$\underline{y} = \beta_0 + \underbrace{\beta_1 x_1}_A + \underbrace{\beta_2 x_2 + \beta_3 x_2^2}_B + \underbrace{\beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_2^2}_{AB} + \underline{e} .$$

hoofdeffecten interactie

Voorbeeld 6.2.

Drie factoren A, B en C, elk op 2 niveaus (2^3 schema).

Model:

$$\begin{aligned} \underline{y} = & \beta_0 + \underbrace{\beta_1 x_1}_A + \underbrace{\beta_2 x_2}_B + \underbrace{\beta_3 x_3}_C \text{ (hoofdeffecten)} \\ & + \underbrace{\beta_4 x_1 x_2}_{AB} + \underbrace{\beta_5 x_1 x_3}_{AC} + \underbrace{\beta_6 x_2 x_3}_{BC} \text{ (2-factor interacties)} \\ & + \underbrace{\beta_7 x_1 x_2 x_3}_{ABC} \text{ (3-factor interactie)} + \underline{e} . \end{aligned}$$

Voorbeeld 6.3.

$3 \times 2 \times 3$ schema, 1e factor kwalitatief, 2e en 3e kwantitatief:

$$\begin{aligned} \underline{y} = & \beta_0 + \underbrace{\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3}_A + \underbrace{\beta_4 x_4 + \beta_5 x_4^2}_C \text{ (hoofdeffecten)} \\ & + \underbrace{\beta_6 x_1 x_3 + \beta_7 x_2 x_3}_{AB} + \\ & + \underbrace{\beta_8 x_1 x_4 + \beta_9 x_1 x_4^2 + \beta_{10} x_2 x_4 + \beta_{11} x_2 x_4^2}_{AC} \\ & + \underbrace{\beta_{12} x_3 x_4 + \beta_{13} x_3 x_4^2}_{BC} \text{ (2-factor interacties)} \\ & + \underbrace{\beta_{14} x_1 x_3 x_4 + \beta_{15} x_1 x_3 x_4^2 + \beta_{16} x_2 x_3 x_4 + \beta_{17} x_2 x_3 x_4^2}_{ABC} \\ & \text{(3-factor interactie)} + \underline{e} . \end{aligned}$$

C

Op verschillende methoden van codering en het effect daarvan op de analyse wordt in een volgend hoofdstuk ingegaan.

Als de codering zodanig is dat kolommen van de X-matrix die horen bij verschillende effecten orthogonaal zijn, dan geldt de volgende globale variantie-analyse. Stel weer dat we de factoren aanduiden met hoofdletters A, B, C, ... en dat

A_i = som van alle waarnemingen met factor A op niveau i,

$(AB)_{ij}$ = som van alle waarnemingen met factor A op niveau i
en factor B op niveau j;

etc.

Voor elk van de hoofdeffecten en de interacties kan weer de hypothese worden gesteld dat alle betreffende parameters = 0 zijn. Bv. in het 3e voorbeeld hierboven komt

$$H_0: \beta_{12} = \beta_{13} = 0$$

overeen met de hypothese dat de BC-interactie gelijk is aan nul. Bij elk van deze hypothesen hoort een vermindering van de restkwadratensom $KS_{r0} - KS_r$. Deze kwadratensommen duiden we aan met KS_A , KS_B , KS_{AB} etc. We definiëren verder

n_A = aantal waarnemingen op elk niveau van A,

n_{AB} = aantal waarnemingen op elke combinatie van niveaus van A en B;
etc.

Omdat het schema orthogonaal is zijn dit allemaal constanten.

Dan geldt

$$KS_A = \frac{1}{n_A} \sum_i A_i^2 - KS_0$$

$$KS_{AB} = \frac{1}{n_{AB}} \sum_{i,j} (AB)_{ij}^2 - KS_A - KS_B - KS_0$$

$$KS_{ABC} = \frac{1}{n_{ABC}} \sum_{i,j,k} (ABC)_{ijk}^2 - KS_{AB} - KS_{AC} - KS_{BC} - KS_A - KS_B - KS_C - KS_0,$$

etc.,

waarin KS_0 weer de correctiefactor is, dus het kwadraat van de som van alle waarnemingen gedeeld door het totale aantal waarnemingen.

De variantie-analyse tabel voor het derde van de boven vermelde voorbeelden ($3 \times 2 \times 3$) is dan

Bron van variatie	vr.gr.	KS	GK
A	2	KS_A	$KS_A/2$
B	1	KS_B	KS_B
C	2	KS_C	$KS_C/2$
AB	2	KS_{AB}	$KS_{AB}/2$
AC	4	KS_{AC}	$KS_{AC}/4$
BC	2	KS_{BC}	$KS_{BC}/2$
ABC	4	KS_{ABC}	$KS_{ABC}/4$
totaal	17	$KS_t = \sum (y_{ijk} - \bar{y})^2$	

Er zijn nu geen vrijheidsgraden voor de restkwadratensom overgebleven. Willen we om te kunnen toetsen toch een schatting van de restvariantie hebben, dan zijn er verschillende mogelijkheden:

- We nemen aan dat de ABC interactie nul is. De kwadratensom KS_{ABC} gaat dan over in KS_t met 4 vrijheidsgraden. Dit wil zeggen dat we aannemen dat interacties minder belangrijk worden naarmate er meer factoren in voorkomen. Bij veel responsiefuncties is dit een redelijke veronderstelling.
- We kunnen per niveau 2 herhalingen uitvoeren en alle $2 \times 18 = 36$ behandelingen verloten over de 36 experimentele eenheden. Aan de variantie-analyse tabel wordt dan één regel toegevoegd, nl. een restkwadratensom met 18 vrijheidsgraden, die als noemer voor de F-toetsen kan worden gebruikt.
- Per niveau kunnen 2 herhalingen worden uitgevoerd, maar de 2 groepen van 18 behandelingen worden over 2 blokken verdeeld. We krijgen dan twee nieuwe regels in de tabel, nl. een kwadratensom voor blokken met 1 vrijheidsgraad en een restkwadratensom met 17 vrijheidsgraden.

Voorbeeld 6.4.

Een 3×3 factorieel experiment werd in 4 blokken uitgevoerd. De resultaten waren:

	A ₁			A ₂			A ₃			Totaal
	B ₁	B ₂	B ₃	B ₁	B ₂	B ₃	B ₁	B ₂	B ₃	
blokken I	26	33	28	14	18	21	28	10	11	189
II	30	28	26	24	31	18	20	16	14	207
III	20	24	17	24	23	13	8	11	13	153
IV	24	27	17	22	12	8	24	19	18	171
Totaal	100	112	88	84	84	60	80	56	56	720

De totalen per behandeling kunnen als volgt worden samengevat:

A \ B	1	2	3	
1	100	84	80	264
2	112	84	56	252
3	88	60	56	204
	300	228	192	720

De berekening van de kwadratensommen gaat aldus:

$$KS_t = 26^2 + 33^2 + \dots + 18^2 - \frac{720^2}{36} = 1628$$

$$KS_A = \frac{300^2}{12} + \frac{228^2}{12} + \frac{192^2}{12} - \frac{720^2}{36} = 504$$

$$KS_B = \frac{264^2}{12} + \frac{252^2}{12} + \frac{204^2}{12} - \frac{720^2}{36} = 168$$

$$KS_{AB} = \frac{100^2}{4} + \frac{84^2}{4} + \dots + \frac{56^2}{4} - KS_A - KS_B - KS_0 = 96$$

$$KS_{B\ell} = \frac{189^2}{9} + \frac{207^2}{9} + \frac{153^2}{9} + \frac{171^2}{9} - KS_0 = 180$$

$$KS_r = KS_t - (KS_A + KS_B + KS_{AB} + KS_{B\ell}) = 680$$

De variantie-analyse tabel is nu:

Bron van variatie	vr.gr.	KS	GK	F
Blokken	3	180	60	
A	2	504	252	8,89
B	2	168	84	2,96
AB	4	96	24	< 1
Rest	24	680	28,33	
Totaal	35	1628		

Kritieke waarden voor een F-quotiënt met 2 en 24 vrijheidsgraden zijn:

α	F
0,05	3,40
0,01	5,61
0,005	6,66 .

Het hoofdeffect A is dus significant, B en AB niet.

7. Codering en orthogonale polynomen

7.1. De invloed van verschillende coderingen op het resultaat

In voorbeeld 3.3.1 (pag. 26) en in verschillende vraagstukken hebben we kennis gemaakt met coderingen die een diagonale $X'X$ matrix tot gevolg hadden. Dit vereenvoudigt de berekening van $(X'X)^{-1}$ aanzienlijk evenals de daarop gebaseerde analyse. Dat de gebruikte codering ook invloed kan hebben op de interpretatie van de modelparameters kan aan de hand van hetzelfde voorbeeld 3.3.1 worden toegelicht.

Wij vonden met de codering $x = -1$ op het ene en $x = +1$ op het andere niveau van elke factor voor de β 's in het model

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \beta_4 x_3 + \underline{e}$$

de schattingen

$$b = \begin{bmatrix} 5,75 \\ 0,50 \\ -0,25 \\ -1,50 \\ 1,00 \end{bmatrix}$$

en de betrouwbaarheidsintervallen ($\alpha = 0,05$)

$$b_i - 0,65 < \beta_i < b_i + 0,65 .$$

Dus b_0 , b_3 en b_4 verschillen significant van 0 (pag. 28). Stel nu dat we van hetzelfde model uitgaan, maar dat de volgende codering wordt gekozen (vgl. pag. 27):

$$x_1^* = \frac{\text{viscositeit} - 5}{5}$$

$$x_2^* = \frac{\text{temperatuur} - 10}{10}$$

$$x_3^* = 0 \text{ voor motor 1}$$

$$x_3^* = 1 \text{ voor motor 2.}$$

De X-matrix wordt nu:

$$X^* = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Hieruit worden afgeleid

$$X^* ' X^* = \begin{bmatrix} 8 & 4 & 4 & 2 & 4 \\ 4 & 4 & 2 & 2 & 2 \\ 4 & 2 & 4 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 4 & 2 & 2 & 1 & 4 \end{bmatrix}, \quad (X^* ' X^*)^{-1} = \frac{1}{8} \begin{bmatrix} 5 & -4 & -4 & 4 & -2 \\ -4 & 8 & 4 & -8 & 0 \\ -4 & 4 & 8 & -8 & 0 \\ 4 & -8 & -8 & 16 & 0 \\ -2 & 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

$$X^* ' y = \begin{bmatrix} 46 \\ 25 \\ 22 \\ 9 \\ 27 \end{bmatrix}, \quad b^* = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 2,5 \\ -6 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$KS_r = y'y - b^* ' X^* ' y = 294 - 293 = 1 .$$

De restkwadratensom is dus hetzelfde als bij de andere codering. Men kan gemakkelijk controleren dat ook de afzonderlijke residuen voor beide modellen overeenstemmen.

Het betrouwbaarheidsinterval ($\alpha = 0,05$) voor β_0^* is:

$$3 - 3,18 \times \sqrt{\frac{1}{3} \times \frac{5}{8}} < \beta_0^* < 3 + 3,18 \times \sqrt{\frac{1}{3} \times \frac{5}{8}}$$

of

$$1,55 < \beta_0^* < 4,45 .$$

Op overeenkomstige wijze vindt men

$$2,16 < \beta_1^* < 5,84$$

$$0,66 < \beta_2^* < 4,34$$

$$-8,60 < \beta_3^* < -3,40$$

$$0,70 < \beta_4^* < 3,30 .$$

Nu zijn dus alle effecten significant! Voor wat betreft β_4 en β_4^* stemmen de conclusies overeen, want $b_4^* = 2b_4$ en de lengte van het betrouwbaarheidsinterval voor β_4^* is ook het dubbele van de lengte in het geval van β_4 . Voor β_3 en β_3^* geldt iets dergelijks, alleen $b_3^* = 4b_3$ en het interval voor β_3^* is ook 4x zo lang.

Maar van de factoren viscositeit en temperatuur zijn behalve de interactie nu ook de hoofdeffecten significant. De conclusie is echter weer hetzelfde zoals blijkt uit de volgende tabelletjes, waarin de significante effecten afgezien van β_0 en β_4 , resp. β_0^* en β_4^* zijn opgenomen:

x_1	x_2	$b_3 x_1 x_2$	x_1^*	x_2^*	$b_1^* x_1^* + b_2^* x_2^* + b_3^* x_1^* x_2^*$
-1	-1	-1,50	0	0	0
-1	1	1,50	0	1	2,5
1	-1	1,50	1	0	4
1	1	-1,50	1	1	0,5

In beide gevallen dus weinig slijtage bij lage viscositeit en lage temperatuur en bij hoge viscositeit en hoge temperatuur.

De geschatte verwachting van y bij een bepaalde combinatie van factorniveaus is onafhankelijk van de codering evenals de variantie van deze schatting.

Neem bijvoorbeeld de volgende niveaus:

viscositeit 7
 temperatuur 15
 motor 1.

1e model: $x_1 = -0,2$, $x_2 = 0$, $x_3 = -1$

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_1 x_2 + b_4 x_3 =$$

$$= 5,75 - 0,50 \times 0,2 + 1,00 \times -1 = 4,65$$

$$\text{var}(\hat{y}) = \text{var}(b_0) + (0,2)^2 \text{var}(b_1) + (1,0)^2 \text{var}(b_4) =$$

$$= \frac{2,04}{8} \sigma_0^2 = 0,255 \sigma_0^2 .$$

2e model: $x_1^* = 0,4$, $x_2^* = 0,5$, $x_3^* = 0$

$$\hat{y} = b_0^* + b_1^* x_1^* + b_2^* x_2^* + b_3^* x_1^* x_2^* + b_4^* x_3^* =$$

$$= 3 + 4 \times 0,4 + 2,5 \times 0,5 - 6 \times 0,2 = 4,65$$

$$\begin{aligned}\text{var}(\hat{y}) &= \text{var}(b_0^*) + (0,4)^2 \text{var}(b_1^*) + (0,5)^2 \text{var}(b_2^*) + (0,2)^2 \text{var}(b_3^*) + \\ &+ 2 \times 0,4 \text{cov}(b_0^*, b_1^*) + 2 \times 0,5 \text{cov}(b_0^*, b_2^*) + 2 \times 0,2 \text{cov}(b_0^*, b_3^*) + \\ &+ 2 \times 0,4 \times 0,5 \text{cov}(b_1^*, b_2^*) + 2 \times 0,4 \times 0,2 \text{cov}(b_1^*, b_3^*) + 2 \times 0,5 \times 0,2 \text{cov}(b_2^*, b_3^*) = \\ &= \frac{1}{8} (5 + 1,28 + 2,00 + 0,64 - 3,20 - 4,00 + 1,60 + 1,60 - 1,28 - 1,60) \sigma_0^2 = \\ &= \frac{2,04}{8} \sigma_0^2 = 0,255 \sigma_0^2 .\end{aligned}$$

Het verband tussen b en b^* kan als volgt worden afgeleid uit de relatie tussen x_i en x_i^* . Er geldt:

$$x_i = 2x_i^* - 1 \quad (i = 1, 2, 3) ,$$

zoals eenvoudig is te controleren. Dit substitueren we in het model

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \beta_4 x_3 + e .$$

Het resultaat is, na enige herleiding:

$$\begin{aligned}y &= (\beta_0 - \beta_1 - \beta_2 + \beta_3 - \beta_4) + (2\beta_1 - 2\beta_3)x_1^* + (2\beta_2 - 2\beta_3)x_2^* + \\ &+ 4\beta_3 x_1^* x_2^* + 2\beta_4 x_3^* + e .\end{aligned}$$

Dus moet gelden:

$$\beta_0^* = \beta_0 - \beta_1 - \beta_2 + \beta_3 - \beta_4$$

$$\beta_1^* = 2\beta_1 - 2\beta_3$$

$$\beta_2^* = 2\beta_2 - 2\beta_3$$

$$\beta_3^* = 4\beta_3$$

$$\beta_4^* = 2\beta_4$$

en er bestaat precies dezelfde relatie tussen de elementen van b^* en die van b , zoals gemakkelijk kan worden geverifieerd.

Dus een toets voor de hypothese $H_0: \beta_1^* = 0$ in het 2e model is hetzelfde als een toets voor $H_0: 2\beta_1 - 2\beta_3 = 0$ in het 1e model.

Tenslotte nog een andere manier om het verband tussen de parameters in de beide modellen te bekijken. In het eerste model geldt

$$\frac{\partial \xi y}{\partial x_1} = \beta_1 + \beta_3 x_2 ,$$

dus

$$\beta_1 = \frac{\partial \xi y}{\partial x_1} , \text{ als } x_2 = 0 \text{ (temperatuur } 15^\circ \text{).}$$

Evenzo vinden we met het tweede model

$$\frac{\partial \xi y}{\partial x_1} = \beta_1^* + \beta_3^* x_2 ,$$

dus

$$\beta_1^* = \frac{\partial \xi y}{\partial x_1^*} = \frac{\partial \xi y}{\partial x_1} \frac{dx_1}{dx_1^*} = 2 \frac{\partial \xi y}{\partial x_1} \text{ als } x_2^* = 0 \text{ (temperatuur } 10^\circ \text{).}$$

dus zowel β_1 als β_1^* geven aan hoe ξy afhangt van de viscositeit maar bij een verschillende temperatuur. Omdat er tussen viscositeit en temperatuur interactie bestaat zijn de beide parameters β_1 en β_1^* (afgezien van de factor 2) niet hetzelfde, want het zijn afgeleiden in verschillende punten.

In het algemeen geven de parameters in een lineair model partiële afgeleiden in het punt $x_i = 0$, resp. $x_i^* = 0$ ($i = 1, \dots, k$). In ons voorbeeld is dat in het eerste model het midden van het experimentele gebied en in het tweede model bevindt het punt $x_1^* = x_2^* = x_3^* = 0$ zich aan de rand van dit gebied.

7.2. Orthogonale contrasten

Het blijkt duidelijk uit de vergelijking van de twee coderingen in paragraaf 7.1 dat het grote voordelen biedt als de kolommen van de X-matrix twee aan twee orthogonaal zijn. $X'X$ is dan diagonaal, de inversie wordt triviaal en de resulterende schatters zijn ongecorrleerd omdat $(X'X)^{-1}$ weer een diagonale matrix is.

Als we de kolommen van X aangeven met $x_{*0}, x_{*1}, \dots, x_{*k}$, dan houdt bovenstaande eis dus in dat

$$x_{*i}' x_{*j} = 0 \quad (i = 0, \dots, k; j = 0, \dots, k; i \neq j) .$$

Zoals opgemerkt zijn $X'X$ en $(X'X)^{-1}$ beide diagonaal en er geldt

$$(X'X)_{ii} = x'_{*i}x_{*i} ,$$

$$(X'X)^{-1}_{ii} = \frac{1}{x'_{*i}x_{*i}} .$$

Uit

$$b = (X'X)^{-1} X'y$$

en

$$\text{var}(b) = (X'X)^{-1} \sigma_0^2$$

volgt dan dat

$$b_i = \frac{x'_{*i}y}{x'_{*i}x_{*i}}$$

$$\text{var}(b_i) = \frac{\sigma_0^2}{x'_{*i}x_{*i}} .$$

Toetsen van de hypothese $H_0: \beta_i = 0$ is dus al erg eenvoudig. Om deze hypothese te kunnen toetsen zou het dus niet nodig zijn om de bijbehorende kwadratensom te bepalen. We hebben echter een schatting van σ_0^2 nodig en daarvoor moet de restkwadratensom KS_r worden bepaald. En dit kan meestal het eenvoudigst gebeuren door van de totale kwadratensom KS_t de kwadratensommen af te trekken die horen bij elk van de hypothesen $H_0: \beta_i = 0$ ($i = 0, 1, \dots, k$). En voor deze kwadratensommen is een eenvoudige formule af te leiden. We weten dat

$$KS_r = y'y - b'X'y .$$

In ons geval is

$$b' = \left[\frac{x'_{*0}y}{x'_{*0}x_{*0}} , \frac{x'_{*1}y}{x'_{*1}x_{*1}} , \dots , \frac{x'_{*k}y}{x'_{*k}x_{*k}} \right]$$

en

$$X'y = \begin{bmatrix} x'_{*0}y \\ x'_{*1}y \\ \vdots \\ x'_{*k}y \end{bmatrix} .$$

Dus

$$b'X'y = \sum_{j=0}^k \frac{(x'_{*j}y)^2}{x'_{*j}x_{*j}} .$$

Wordt nu onder de hypothese $H_0: \beta_i = 0$ de kleinste kwadraten aanpassing opnieuw uitgevoerd, dan scheelt dat in de verklaarde kwadratensom $KS_v = b'X'y$ juist de i -de term. Dus

$$KS_r = y'y - \sum_{j=0}^k \frac{(x'_{*j}y)^2}{x'_{*j}x_{*j}}$$

$$KS_{r0} = y'y - \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^k \frac{(x'_{*j}y)^2}{x'_{*j}x_{*j}}$$

en

$$KS_{(i)} = KS_{r0} - KS_r = \frac{(x'_{*i}y)^2}{x'_{*i}x_{*i}} .$$

Omdat x_{*0} altijd een kolomvector is die alleen uit enen bestaat en omdat we eisen dat $x'_{*0}x_{*i} = 0$ geldt voor de kolommen $1, 2, \dots, k$ dat de kolomsommen gelijk moeten zijn aan nul. De elementen $x'_{*i}y$ van de vector $X'y$ zijn dus lineaire combinaties van de waarnemingen met de eigenschap dat de som van de coëfficiënten gelijk is aan nul, $i \neq 0$. Dit heten lineaire contrasten tussen de waarnemingen. Van twee van deze contrasten, $x'_{*i}y$ en $x'_{*j}y$, vormen de coëfficiënten orthogonale vectoren, want $x'_{*i}x_{*j} = 0$, we zeggen dan dat de contrasten orthogonaal zijn.

Men gaat nu meestal van orthogonale contrasten tussen de y 's uit. Dat betekent in feite dat er een overgang heeft plaats gevonden van de oorspronkelijke parameters $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_k$ naar een nieuw stel $\beta_0^*, \beta_1^*, \dots, \beta_k^*$, als in het voorbeeld in paragraaf 7.1, dit wordt in paragraaf 7.4 nader uitgewerkt.

Voorbeeld 7.2.1.

We gaan uit van de gegevens van voorbeeld 4.1 op pagina 34 e.v. We construeren 3 orthogonale lineaire contrasten die overeenkomen met de 4 behandelingen. Een mogelijkheid is (er zijn er vele):

$$y_{.1} - y_{.2}$$

$$y_{.3} - y_{.4}$$

$$y_{.1} + y_{.2} - y_{.3} - y_{.4} .$$

De eerste en de 3 laatste kolommen van de X-matrix zijn dan (bij dezelfde volgorde voor de y-vector):

x_{*0}	x_{*3}	x_{*4}	x_{*5}
1	1	0	1
1	1	0	1
1	1	0	1
1	-1	0	1
1	-1	0	1
1	-1	0	1
1	0	1	-1
1	0	1	-1
1	0	1	-1
1	0	-1	-1
1	0	-1	-1
1	0	-1	-1

$$x'_{*3}y = 34,2 - 37,0 = - 2,8$$

$$x'_{*4}y = 33,6 - 38,4 = - 4,8$$

$$x'_{*5}y = 34,2 + 37,0 - 33,6 - 38,4 = - 0,8$$

$$x'_{*3}x_{*3} = 6, \quad x'_{*4}x_{*4} = 6, \quad x'_{*5}x_{*5} = 12 .$$

De bijbehorende kwadratensommen zijn

$$KS_{(3)} = \frac{(x'_{*3}y)^2}{x'_{*3}x_{*3}} = \frac{(-2,8)^2}{6} = 1,307$$

$$KS_{(4)} = \frac{(x'_{*4}y)^2}{x'_{*4}x_{*4}} = \frac{(-4,8)^2}{6} = 3,840$$

$$KS_{(5)} = \frac{(x'_{*5}y)^2}{x'_{*5}x_{*5}} = \frac{(-0,8)^2}{12} = 0,053 + 5,200$$

Het totaal van de drie kwadratensommen is gelijk aan de eerder gevonden kwadratensom voor behandelingen (pag. 40). Soms hebben bepaalde contrasten praktisch belang, in andere gevallen is het slechts een hulpmiddel om de totale kwadratensom gemakkelijk in componenten met één vrijheidsgraad te splitsen.

7.3. Orthogonale polynomen

Voor een kwantitatieve factor op p niveaus worden orthogonale contrasten voor de hoofdeffect-termen gevonden door de oorspronkelijke variabelen $x_1 = x, x_2 = x^2, \dots, x_{p-1} = x^{p-1}$ te transformeren in nieuwe variabelen u_1, u_2, \dots, u_{p-1} . Voor het geval de niveaus van x equidistant zijn met onderlinge afstand d wordt dit bereikt door toepassing van orthogonale polynomen die de volgende gedaante hebben:

$$u_0 = x_0 = 1$$

$$u_1 = \lambda_1 \frac{x - \bar{x}}{d}$$

$$u_2 = \lambda_2 \left\{ \left(\frac{x - \bar{x}}{d} \right)^2 - \frac{p^2 - 1}{12} \right\}$$

$$u_3 = \lambda_3 \left\{ \left(\frac{x - \bar{x}}{d} \right)^3 - \left(\frac{x - \bar{x}}{d} \right) \frac{3p^2 - 7}{20} \right\}$$

Voor $p = 3, \dots, 15$ worden de eerste drie orthogonale polynomen gegeven in tabel 9.6 van het Statistisch Compendium.

Voorbeeld 7.3.1.

We gaan uit van de gegevens van voorbeeld 3.2.1 op pagina 16 e.v. We hebben hier het geval $p = 7$ en het model is van de 2e graad.

De polynoomwaarden zijn:

$$u_0 = 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1, \quad u_0' u_0 = 7$$

$$u_1 = -3 \quad -2 \quad -1 \quad 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3, \quad u_1' u_1 = 28$$

$$u_2 = 5 \quad 0 \quad -3 \quad -4 \quad -3 \quad 0 \quad 5, \quad u_2' u_2 = 84$$

$$u_0' z = 95,0$$

$$u_1' z = 99,2$$

$$u_2' z = 45,2$$

De kwadratensommen worden nu:

$$KS_0 = \frac{(95,0)^2}{7} = 1289,286$$

$$KS_{(1)} = \frac{(99,2)^2}{28} = 351,451$$

$$KS_{(2)} = \frac{(45,2)^2}{84} = \frac{24,322}{1665,059} +$$

Zoals te verwachten klopt dit met de verklaarde kwadratensom $KS_v = 1665,06$ (onderaan pag. 22), die hier dus volgens 3 orthogonale contrasten is gesplitst.

In plaats van het model

$$\underline{z} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_1^2 + \underline{e}$$

is nu gekomen

$$\underline{z} = \alpha_0 + \alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2 + \underline{e}.$$

De hypothesen $\alpha_0 = 0$ en $\alpha_1 = 0$ behoeven we niet te toetsen gezien de grote kwadratensommen KS_0 en $KS_{(1)}$. De hypothese $H_0: \alpha_2 = 0$ wordt getoetst met (vgl. pag. 23):

$$F = \frac{KS(2)}{KS_r/4} = \frac{24,32}{5,25} = 4,62 .$$

De kritieke waarde ($\alpha = 0,05$) is 7,71, de hypothese kan dus niet worden verworpen. Dus een lineair verband is aanwezig, de kwadratische term is niet significant. Omdat u_1 en u_2 orthogonaal zijn, treden de complicaties die we in paragraaf 3.3 voor β_1 en β_2 aantreffen niet op bij α_1 en α_2 .

7.4. Het verband tussen twee coderingssystemen

Stel we gaan over van een model

$$\underline{y} = X\beta + \underline{e}$$

op een equivalent model

$$\underline{y} = X^*\beta^* + \underline{e} .$$

Dit kan worden bereikt door X en β gelijktijdig te transformeren met behulp van een reguliere matrix A :

$$X^* = XA^{-1}$$

$$\beta^* = A\beta .$$

Dezelfde relatie als tussen β^* en β moet gelden tussen b^* en b . Nu is

$$b = (X'X)^{-1} X'y$$

$$b^* = (X^{*'}X^*)^{-1} X^{*'}y .$$

Dus voor alle y moet gelden

$$(X^{*'}X^*)^{-1} X^{*'}y = A(X'X)^{-1} X'y .$$

Dus

$$(X^{*'}X^*)^{-1} X^{*'} = A(X'X)^{-1} X' .$$

Door beide leden rechts met X te vermenigvuldigen zien we dat

$$A = (X^{*'}X^*)^{-1}(X^{*'}X) .$$

Als de nieuwe codering nu zo is dat (X^*X^*) diagonaal is, dan is A gemakkelijker te berekenen.

Neem als voorbeeld nog eens voorbeeld 3.2.1.

$$X^* = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 5 \\ 1 & -2 & 0 \\ 1 & -1 & -3 \\ 1 & 0 & -4 \\ 1 & 1 & -3 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 3 & 5 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 4 & 16 \\ 1 & 5 & 25 \\ 1 & 6 & 36 \end{bmatrix}$$

$$(X^*X^*) = \begin{bmatrix} 7 & 0 & 0 \\ 0 & 28 & 0 \\ 0 & 0 & 84 \end{bmatrix}, \quad (X^*X^*)^{-1} = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 12 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(X^*X) = \begin{bmatrix} 7 & 21 & 91 \\ 0 & 28 & 168 \\ 0 & 0 & 84 \end{bmatrix}.$$

Dus

$$A = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 12 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 7 & 21 & 91 \\ 0 & 28 & 168 \\ 0 & 0 & 84 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 13 \\ 0 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Controle: $b^* = Ab$

$$b^* = (X^*X^*)^{-1} X^*y = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 12 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 95,0 \\ 99,2 \\ 45,2 \end{bmatrix} = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 1140,0 \\ 297,6 \\ 45,2 \end{bmatrix}$$

$$Ab = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 13 \\ 0 & 1 & 6 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 473,2 \\ 26,4 \\ 45,2 \end{bmatrix} = \frac{1}{84} \begin{bmatrix} 1140,0 \\ 297,6 \\ 45,2 \end{bmatrix}.$$

8. 2ⁿ-proeven

8.1. Algemeen

Faktoriële proeven met n factoren, ieder op 2 niveau's heten 2ⁿ schema's of 2ⁿ proefopzetten.

We beschouwen een experiment met 2 factoren, die we evenals in hoofdstuk 6 aanduiden met de hoofdletters A en B. Er zijn 4 verschillende experimentele kondities of niveau-kombinaties: A laag, B laag; A hoog, B laag; A laag, B hoog; A hoog, B hoog. De Engelse statistikus Yates duidde deze niveau-kombinaties aan met (1), a, b en ab; als A op het lage niveau is ontbreekt de letter a in de notatie.

Het gebruik van de woorden "hoog" en "laag" is arbitrair en voor de analyse van ondergeschikt belang. Bij een kwantitatieve faktor is het duidelijk, welk niveau het hoge is. Bij een kwalitatieve faktor noemen we het ene niveau hoog, het andere laag.

De notatie (1), a, b, ab wordt ook gebruikt om de responsie bij de betreffende niveau-kombinatie aan te geven (voorlopig nemen we aan dat bij iedere niveau-kombinatie één waarneming wordt verricht).

Deze notatie kan eenvoudig worden uitgebreid voor meerdere factoren. De niveau-kombinatie voor 3 factoren A, B en C zijn: (1), a, b, ab, c, ac, bc en abc.

Het gebruikelijke model luidt:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + e .$$

Hierin kiezen we: $x_1 = -1$, als A op het lage niveau is
 $x_1 = 1$, als A op het hoge niveau is
 $x_2 = -1$, als B op het lage niveau is
 $x_2 = 1$, als B op het hoge niveau is.

Als de waarnemingen staan in de volgorde (1), a, b, ab is de matrix X:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} .$$

Verder is

$$X'y = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (1) \\ a \\ b \\ ab \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1) + a + b + ab \\ -(1) + a - b + ab \\ -(1) - a + b + ab \\ (1) - a - b + ab \end{bmatrix}$$

en

$$X'X = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

zodat

$$(X'X)^{-1} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Merk op dat $X'X$ een diagonaalmatrix is, immers de 4 vektoren x_0, x_1, x_2 en x_1x_2 zijn onderling orthogonaal.

De schattingen voor β vinden we uit:

$$b = (X'X)^{-1}X'y = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} (1) + a + b + ab \\ -(1) + a - b + ab \\ -(1) - a + b + ab \\ (1) - a - b + ab \end{bmatrix} .$$

De parameters β_1 t/m β_3 worden in dit verband ook effecten genoemd. Het is verder gebruikelijk om de schattingen van deze effecten aan te duiden met hoofdletters: A voor b_1 , B voor b_2 en AB voor b_3 . Bovendien vervangen we b_0 door I. De hoofdletters hebben dus evenals de kleine letters een dubbele betekenis.

We zien nu dat

$$A = b_1 = \frac{1}{4}(-(1) + a - b + ab) = \frac{(a+ab) - ((1)+b)}{4} .$$

Dus het (hoofd)effect A is het verschil van de som der waarnemingen, waarbij de faktor A op het hoge, en de som der waarnemingen, waarbij de faktor A op het lage niveau is, gedeeld door het aantal niveau-kombinaties.

De kwadratensommen die horen bij de verschillende effecten vinden we uit:

$$KS_{(i)} = \frac{(x'_{*i}y)^2}{x'_{*i}x_{*i}}$$

dus

$$KS_{(0)} = KS_I = \frac{((1)+a+b+ab)^2}{4},$$

$$KS_{(1)} = KS_A = \frac{(-(1)+a-b+ab)^2}{4},$$

$$KS_{(3)} = KS_{AB} = \frac{((1)-a-b+ab)^2}{4}.$$

Verder geldt $GK_{(i)} = KS_{(i)}$ voor iedere i , want iedere faktor heeft 2 niveau's en bij ieder effect hoort derhalve 1 vrijheidsgraad. Merk op, dat KS_I de korrektieterm is.

Omdat de elementen van de matrix X alleen -1 en $+1$ zijn laten we de enen weg. Als we bovendien boven de kolommen aangeven bij welk effect iedere kolom hoort krijgen we het volgende schema voor een 2^2 -proefopzet.

	I	A	B	AB
(1)	+	-	-	+
a	+	+	-	-
b	+	-	+	-
ab	+	+	+	+

We lezen hieruit af, hoe we de waarnemingen samen moeten nemen om de schatting van een effect te berekenen. Het effect A bijv. schatten we door de waarnemingen (1) en (b) voorzien van min-teken op te tellen bij a en ab, waarna het resultaat nog gedeeld moet worden door 2^2 .

Een andere manier om direkt op te kunnen schrijven hoe een effect berekend wordt is die van de symbolische vermenigvuldiging. Als in het algemeen Ψ een effect is in een 2^n schema dan geldt:

$$\Psi = \frac{1}{2^n} (a \pm 1)(b \pm 1)(c \pm 1) \dots$$

waarbij we -1 schrijven als de bijbehorende hoofdletter voorkomt in de letterkombinatie van het effect. We vinden dus voor het effect A in een 2^2 -proef:

$$A = \frac{1}{4}(a-1)(b+1) = \frac{1}{4}(ab-b+a-1).$$

Het is gebruikelijk om in het symbolisch produkt 1 te schrijven i.p.v. (1). We merken nog op dat we uit 4 waarnemingen behalve I nog 3 effecten schatten (4 parameters). Dit betekent dat we de totale kwadratensom $y'y$ splitsen in 4 stukken met ieder 1 vrijheidsgraad. We houden dus geen restkwadratensom over en kunnen dus ook σ_0^2 niet schatten. Als we σ_0^2 niet weten moeten we per niveau-kombinatie meerdere waarnemingen doen, zodat σ_0^2 geschat kan worden uit de verschillen binnen de niveau-kombinaties.

We zullen een en ander toelichten aan een eenvoudig voorbeeld.

Stel we hebben een 2^2 proef met $(1) = 2$; $a = 12$; $b = 8$; $ab = 20$.

Dan is

$$\begin{aligned} I &= (2 + 12 + 8 + 20)/4 = 42/4 = 10\frac{1}{2} \\ A &= (-2 + 12 - 8 + 20)/4 = 22/4 = 5\frac{1}{2} \\ B &= (-2 - 12 + 8 + 20)/4 = 14/4 = 3\frac{1}{2} \\ AB &= (2 - 12 - 8 + 20)/4 = 2/4 = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

met

$$\begin{aligned} KS_I &= (42)^2/4 = 441 \\ KS_A &= (22)^2/4 = 121 \\ KS_B &= (14)^2/4 = 49 \\ KS_{AB} &= (2)^2/4 = 1. \end{aligned}$$

Verder is

$$y'y = 2^2 + 12^2 + 8^2 + 20^2 = 612.$$

Inderdaad is

$$KS_I + KS_A + KS_B + KS_{AB} = y'y.$$

We beschouwen nu het geval dat we per niveau-kombinatie 2 waarnemingen hebben:

$$(1) = 1,3; a = 14,10; b = 9,7; ab = 23,17.$$

We passen nu dezelfde formules toe op de som der waarnemingen per niveau-kombinatie, waarbij we nu delen door $2 \cdot 2^2 = 8$.

Dan is

$$\begin{aligned} I &= (4 + 24 + 16 + 40)/8 = 84/8 = 10\frac{1}{2} \\ A &= (-4 + 24 - 16 + 40)/8 = 44/8 = 5\frac{1}{2} \\ B &= (-4 - 24 + 16 + 40)/8 = 28/8 = 3\frac{1}{2} \\ AB &= (4 - 24 - 16 + 40)/8 = 4/8 = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

met

$$\begin{aligned}KS_I &= (84)^2/8 = 882 \\KS_A &= (44)^2/8 = 242 \\KS_B &= (28)^2/8 = 98 \\KS_{AB} &= (4)^2/8 = 2 .\end{aligned}$$

Voor de kwadratensom voor de effecten KS_{eff} geldt:

$$KS_{eff} = KS_A + KS_B + KS_{AB} = 342.$$

Verder is

$$KS_t = y'y - KS_I = 1254 - 882 = 372$$

dus

$$KS_r = KS_t - KS_{eff} = 372 - 342 = 30 ,$$

zodat

$$\hat{\sigma}_0^2 = \frac{30}{4} = 7\frac{1}{2} \text{ met } v = 4 .$$

Bij toetsen blijken A en B significant te zijn ($F_4^1 (\alpha = 0,05) = 7.71$).

8.2. Het Yates-algorithme

We hebben gezien, hoe we de effecten van een 2^n -experiment kunnen berekenen met behulp van de symbolische produktregel als we de niveau's coderen met -1 en +1. We geven nog een voorbeeld van de interactie ABD in een 2^4 -experiment:

$$\begin{aligned}ABD &= \frac{1}{2^4} (a-1)(b-1)(c+1)(d-1) \\ &= \frac{1}{16} (-(1)+a+b-ab-c+ac+bc-abc+d-ad-bd+abd+cd-acd-bcd+abcd).\end{aligned}$$

Op grond nu van deze produktregel ontwikkelde Yates een algorithme voor het berekenen van de effecten in een 2^n -proefopzet. We zullen dit algorithme eerst uitvoeren voor het 2^2 -schema van de vorige paragraaf (zonder herhalingen).

	S_0	S_1	S_2	$S_2/4$		$KS = S_2^2/4$
(1)	2	$a + (1) = 14$	$ab + b + a + (1) = 42$	$10\frac{1}{2}$	I	441
a	12	$ab + b = 28$	$ab - b + a - (1) = 22$	$5\frac{1}{2}$	A	121
b	8	$a - (1) = 10$	$ab + b - a - (1) = 14$	$3\frac{1}{2}$	B	49
ab	20	$ab - b = 12$	$ab - b - a + (1) = 2$	$\frac{1}{2}$	AB	1

In bovenstaande tabel staan in de kolom S_0 de waarnemingen in de zogenaamde standaardvolgorde. De standaardvolgorde voor een 2^3 -proef krijgen we door dezelfde letterkombinaties aangevuld met de letter c toe te voegen. We krijgen dan (1), a, b, ab, c, ac, bc, abc. Voor een 2^4 -proef moeten we deze 8 letterkombinaties aangevuld met de letter d toevoegen, enz. Deze standaardvolgorde is van essentieel belang voor het algoritme.

De bovenste helft van kolom S_i ($i = 1, 2$) bevat de sommen van opeenvolgende paren van kolom S_{i-1} . In de onderste helft van kolom S_i staan de verschillen van opeenvolgende paren van kolom S_{i-1} , waarbij het bovenste getal wordt afgetrokken van het onderste. De kolom $S_2/4$ bevat de effecten en wel in standaardvolgorde; de kolom $S_2^2/4$ bevat de bijbehorende kwadratensommen.

In het algemene geval (n factoren) is $i = 0, \dots, n$.

We vinden de effecten en kwadratensommen uit $S_n/2^n$ resp. $S_n^2/2^n$ in standaardvolgorde. Kolom S_n is de $X'y$ -vektor uit de oorspronkelijke notatie.

Ter illustratie beschouwen we een getallenvoorbeeld van een 2^3 -proef met 3 herhalingen in blokken, waarbij de waarnemingen binnen een blok in verlote volgorde zijn uitgevoerd.

	y_{ij}			$y_{i.}$ S_0	S_1	S_2	S_3	$S_3/3 \cdot 2^3$		$KS = S_3^2/24$
	H_1	H_2	H_3							
(1)	8	10	18	36	87	228	480	20,00	I	(9600,00)
a	16	16	19	51	141	252	42	1,75	A	73,50
b	24	28	20	72	114	12	78	3,25	B	253,50
ab	28	18	23	69	138	30	-12	-0,50	AB	6,00
c	19	16	16	51	15	54	24	1,00	C	24,00
ac	16	25	22	63	-3	24	18	0,75	AC	13,50
bc	27	16	17	60	12	-18	-30	-1,25	BC	37,50
abc	30	23	25	78	18	6	24	1,00	ABC	24,00
	168	152	160						$KS_{eff} =$	432,00

De totale kwadratensom is

$$KS_t = y'y - KS_I = 10324 - 9600 = 724.$$

De kwadratensom voor herhalingen (= blokken) is

$$KS_H = \frac{(168)^2 + (152)^2 + (160)^2}{8} - 9600 = 9616 - 9600 = 16.$$

De variantieanalyse tabel wordt dan

Bron	vr.gr.	KS	GK	F
herhalingen	2	16	8	< 1
7 effecten	7	432	61,7	3,13
rest	14	276	19,7	
totaal	23	724		

De 7 effecten samen zijn significant ($\alpha = 0,05$) want de kritieke waarde is $F_{14}^7 = 2,76$. De effecten kunnen ook afzonderlijk worden getoetst. $F_{14}^1 (\alpha = 0,05) = 4,60$ dus alleen effect B met

$$F = \frac{253,50}{19,7} = 12,9$$

is significant.

Bij een 2^4 -proef moet men minstens $2 \times 2^4 = 32$ waarnemingen doen om σ_0^2 uit herhalingen te kunnen schatten. Omdat men in de regel aanneemt dat interacties van 3 en meer factoren te verwaarlozen zijn is het ook mogelijk σ_0^2 te schatten door de kwadratensommen, die horen bij deze interacties samen te voegen. Bij een 2^4 -proef (zonder herhalingen) wordt dan een schatting van σ_0^2 met 5 vrijheidsgraden verkregen uit de interacties ABC, ABD, ACD, BCD en ABCD.

8.3. Blokvorming

In het getallenvoorbeeld van de vorige paragraaf werd blokvorming toegepast bij een 2^3 -proef en wel zo dat in ieder blok alle niveaokombinaties voorkomen. We gaan ons nu bezig houden met de situatie dat de niveaokombinaties verdeeld worden in een aantal (even grote) blokken.

Als we een 2^2 -proefschema in 2 blokken willen verdelen dan kunnen we dat op 3 manieren doen:

1. (1), a en b, ab
2. (1), b en a, ab
3. (1), ab en a, b.

Het blokeffekt (B1) is in het eerste geval

$$B1 = \frac{1}{4}(b + ab - (1) - a) = B.$$

Het blokeffect B1 valt dus samen met het effect B:

B1 en B zijn verstrengeld (confounded). Dit betekent dat we bij significantie niet weten of het gevonden effect moet worden toegeschreven aan verschillen tussen blokken of aan de faktor B.

Bij de tweede manier is B1 verstrengeld met A, in de laatste situatie met AB. De eerste 2 manieren van blokvorming zijn niet verstandig want men kan dan één van beide hoofdeffekten niet meer schatten. De derde manier is verstandig als men weet, dat de interactie tussen de factoren A en B te verwaarlozen is. Bij blokvorming willen we zo weinig mogelijk informatie over effecten en interacties verloren laten gaan. Bij verdeling in 2 blokken zorgen we er daarom altijd voor dat het blokeffect verstrengeld is met de hoogste-orde-interactie. Een 2^3 -schema verdelen we dus zo in 2 blokken dat B1 verstrengeld is met ABC. Het ene blok bestaat dan uit de niveaokombinaties die voor ABC het plus-teken hebben (a, b, c en abc), het andere blok uit de niveaokombinaties met min-teken voor ABC ((1), ab, ac en bc). Merk op dat de andere effecten orthogonaal zijn met ABC en dus ook met B1, zodat ze niet worden beïnvloed door de blokvorming.

Bij een indeling in 4 blokken heeft het blokeffect 3 vrijheidsgraden en is daarom verstrengeld met 3 effecten. De indeling in 4 blokken ligt vast met het geven van 2 verstrengelde effecten.

We beschouwen een verdeling in 4 blokken van een 2^4 -proef, waarbij bijv. ABC en BCD verstrengeld zijn met B1. De blokken kunnen we dan vinden door de 16 niveaokombinaties eerst te splitsen in 8 combinaties die voor ABC het plus-teken hebben en 8 combinaties die voor ABC het min-teken hebben. We kunnen deze combinaties vinden met behulp van een schema als van pag. 66 of met symbolische vermenigvuldiging:

$$\begin{aligned} ABC &= (a-1)(b-1)(c-1)(d+1) \\ &= (ab-a-b+1)(cd+c-d-1) \\ &= (ab+1)(cd+c) + (a+b)(d+1) - (ab+1)(d+1) - (a+b)(cd+c) \\ &= (a+b+c+ad+bd+cd+abc+abcd) - ((1)+d+ab+ac+bc+abd+acd+bcd). \end{aligned}$$

Elk van deze groepen bevat 4 combinaties met plus-teken voor BCD en 4 combinaties met min-teken voor BCD (immers ABC en BCD zijn onderling orthogonaal). Zo ontstaan dan uit de eerste groep (+ voor ABC) de blokken (b, c, ad, abcd) en (a, bd, cd, abc); uit de andere groep (d, ab, ac, bcd) en ((1), bc, abd, acd).

Samenvattend:

Blok	ABC	BCD	
1	+	+	b, c, ad, abcd
2	+	-	a, bd, cd, abc
3	-	+	d, ab, ac, bcd
4	-	-	(1), bc, abd, acd.

De verschillen tussen de 4 blokken korresponderen met 3 vrijheidsgraden.

Daarbij horen 3 orthogonale contrasten:

blok 1 + blok 2 - blok 3 - blok 4, verstrengeld met ABC
 blok 1 - blok 2 + blok 3 - blok 4, verstrengeld met BCD en
 blok 1 - blok 2 - blok 3 + blok 4.

Dit laatste contrast valt samen met effect AD, zoals bij uitschrijven blijkt:

$$\begin{aligned}
 AD &= (a-1)(b+1)(c+1)(d-1) \\
 &= (ad-a-d+1)(bc+b+c+1) \\
 &= (ad+1)(bc+b+c+1) - (a+d)(bc+b+c+1) \\
 &= abcd + abd + acd + ad + bc + b + c + (1) + \\
 &\quad - (abc+ab+ac+a+acd+bd+cd+d) \\
 &= (b+c+ad+abcd) - (a+bd+cd+abc) - (d+ab+ac+acd) + \\
 &\quad + ((1)+bc+abd+acd) \\
 &= \text{blok 1} - \text{blok 2} - \text{blok 3} + \text{blok 4}.
 \end{aligned}$$

Dit kunnen we ook vinden met een symbolische vermenigvuldiging, waarbij kwadratische termen wegvallen:

$$ABC * BCD = AB^2C^2D = AD.$$

Behalve ABC en BCD is dus ook AD met B1 verstrengeld.

We completeren nu de opstelling hierboven:

Blok	ABC	BCD	AD	
1	+	+	+	b, c, ad, abcd
2	+	-	-	a, bd, cd, abc
3	-	+	-	d, ab, ac, bcd
4	-	-	+	(1), bc, abd, acd.

De symbolische vermenigvuldiging geldt uiteraard ook voor de plus- en mintekens in de kolommen der verstrengelde effecten.

Het blok dat (1) bevat wordt hoofdblok genoemd. Het hoofdblok heeft mintekens in de ("oneven") kolommen ABC en BCD en een plus-teken in de ("even") kolom AD (waarom?). Dit leidt tot de volgende belangrijke betrekking.

Iedere lettercombinatie van het hoofdblok heeft met iedere lettercombinatie uit de verzameling van verstrengelde contrasten een even aantal letters gemeen.

Dit betekent dat we het hoofdblok snel kunnen vinden als de verstrengelde contrasten bekend zijn:

		ABC	BCD	AD
→	(1)	0	0	0
	a	1	0	1
	b	1	1	0
	ab	2	1	1
	c	1	1	0
	ac	2	1	1
→	bc	2	2	0
	abc	3	2	1
	d	0	1	1
	ad	1	1	2
	bd	1	2	1
→	abd	2	2	2
	cd	1	2	1
→	acd	2	2	2
	bcd	2	3	1
	abcd	3	3	2

(Omgekeerd kunnen de verstrengelde contrasten worden gevonden als het hoofdblok gegeven is.)

Vermenigvuldigen we nu elk der elementen van het hoofdblok met een niet tot het hoofdblok behorende lettercombinatie, bijv. a, dan ontstaat een viertal niveaokombinaties dat met ABC één letter meer of minder, dus een oneven aantal letters gemeen heeft, dat verder met BCD een even aantal letters gemeen heeft en dat tenslotte met AD ook weer één letter meer of minder, dus een oneven aantal letter gemeen heeft. De serie tekens - - + voor het hoofdblok (blok 4) leidt tot + - - voor het nieuwe viertal niveaokombinaties. Dit viertal vormt dus juist één der overige blokken en wel blok 2.

Door vermenigvuldiging met een letterkombinatie die noch in het hoofdblok noch in blok 2 voorkomt vinden we dan blok 1 of blok 3.

Ook bij vorming van meerdere blokken laten we liefst zo weinig mogelijk informatie over de effecten verloren gaan. Dit betekent niet dat we altijd de hoogste-orde-interactie moeten laten samenvallen met het hoofdblokeffect. Als we in een 2^4 -schema bijv. ABCD en BCD kiezen als verstrengelde contrasten dan is daarmee ook A met B1 verstrengeld en we kunnen A niet meer schatten. Keuze van ABC, BCD en AD is daarom verstandiger.

8.4. Fraktionele 2^n -proeven

Als het aantal factoren in een 2^n -proef toeneemt wordt het aantal waarnemingen al gauw te groot, omdat de voor een experiment beschikbare hoeveelheid tijd en geld beperkt zijn. Een 2^8 -proef omvat 256 waarnemingen. Er zijn slechts 8 vrijheidsgraden voor de hoofdeffekten en 28 voor de 2-faktor interacties. De overige 219 vrijheidsgraden zijn voor de interacties van 3 en meer factoren en derhalve (meestal) voor σ_0^2 en dit is meer dan nodig is voor een bruikbare schatting.

Daarom wordt vaak maar een gedeelte van een 2^n -proef uitgevoerd. We verdelen daartoe een 2^n -proef weer in (even grote) blokken en beperken ons tot de waarnemingen van één blok. Uiteraard levert het fraktionele experiment minder informatie over de effecten dan het volledige.

We zullen de konsekwenties onderzoeken aan de hand van een simpel voorbeeld.

We beschouwen daartoe een 2^3 -proef verdeeld in 2 blokken:

blok 1 : (1), ab, ac, bc (hoofdblok)

blok 2 : a, b, c, abc.

De combinaties van blok 1 hebben voor ABC het min-teken, die van blok 2 het plus-teken. Als we alleen de waarnemingen van blok 2 uitvoeren kunnen we ABC niet meer schatten. We geven dit symbolisch weer met

$$I = ABC.$$

Beperken we ons tot blok 1 dan geldt

$$I = -ABC$$

omdat dan de waarnemingen worden uitgevoerd die voor ABC het min-teken hebben. Het effect ABC bepaalt hier welke niveaueombinaties tot het experiment behoren en wordt daarom definiërend contrast genoemd.

Als we één blok waarnemen hebben we 3 vrijheidsgraden om de effecten A, B, C, AB, AC en BC te bepalen. Dit betekent dat de effecten paarsgewijze moeten samenvallen: voor ieder effect zijn er 2 niveaokombinaties met plus-teken en 2 kombineeris met min-teken.

Uit onderstaand schema van een 2^3 -proef kunnen we afleiden hoe de effecten verstrengeld zijn.

	I	A	B	AB	C	AC	BC	ABC
(1)	+	-	-	+	-	+	+	-
→ a	+	+	-	-	-	-	+	+
→ b	+	-	+	-	-	+	-	+
ab	+	+	+	+	-	-	-	-
→ c	+	-	-	+	+	-	-	+
ac	+	+	-	-	+	+	-	-
bc	+	-	+	-	+	-	+	-
→ abc	+	+	+	+	+	+	+	+

Nemen we blok 2 voor het experiment dan is uiteraard I verstrengeld met ABC, want de 4 niveaokombinaties van blok 2 hebben zowel voor I als ABC alle het plus-teken.

We beschouwen het gedeelte van bovenstaand schema dat betrekking heeft op blok 2 dus:

	I	A	B	AB	C	AC	BC	ABC
a	+	+	-	-	-	-	+	+
b	+	-	+	-	-	+	-	+
c	+	-	-	+	+	-	-	+
abc	+	+	+	+	+	+	+	+

We zien dat de kolommen van A en BC gelijk zijn. Dit betekent dat A en BC verstrengeld zijn: ze worden samen geschat door $a-b-c+abc$. Verder is B met AC en C met AB verstrengeld.

Deze verstrengeling kunnen we veel vlugger vinden door symbolische vermenigvuldiging, waarbij we uitgaan van

$$I = ABC.$$

Immers dan geldt bijv.

$$AI = A^2BC$$

dus

$$A = BC.$$

Bij een 2^3 -proef heeft uitvoeren van het halve experiment alleen zin als de interacties te verwaarlozen zijn. (Ga na, dat we de proef dan op kunnen vatten als een 2×2 Latijns vierkant.) Dit is een onderstelling, die vaak niet verantwoord is. Fraktionele proeven worden dan ook voornamelijk uitgevoerd bij grotere aantallen factoren, zoals reeds eerder is opgemerkt. Het is vooral in dergelijke situaties een heel werk om uit te zoeken, hoe men de definiërende contrasten moet kiezen om zoveel mogelijk informatie over hoofdeffekten en 2-faktor-interacties te behouden.

In het boek van Cochran en Cox en in de publikatie nr 48 in de Applied Mathematics Series van het National Bureau of Standards: Fractional Fractional Designs for Factors at two Levels zijn tabellen gegeven van fraktionele 2^n -proeven gekombineerd met blokvorming.

Een voorbeeld uit deze laatste verzameling (die proeven tot 16 factoren bevat) is een 2^7 -proef, waarvan $\frac{1}{4}$ fraktie wordt uitgevoerd in 4 blokken van 8 waarnemingen (plan 4.7.8). De definiërende contrasten zijn

$$ABCE, ABDFG \text{ en } CDEFG.$$

Dit is afgezien van het teken: dat hangt af van de fraktie, die men kiest. De contrasten, die verstrengeld worden met blokken zijn: ACD, BEF, ABCDEF. De 32 waarnemingen bestaat dan uit de volgende 4 blokken:

1 (hoofdblok)	2 = 1 * acd	3 = 1 * bef	4 = 1 * abcdef
(1) 1	acd 14	bef 19	abcdef 32
abce 8	bde 11	acf 22	df 25
abdf 28	bcf 23	ade 10	ce 5
cdef 29	aef 18	bcd 15	ab 4
acg 6	dg 9	abcefg 24	bdefg 27
beg 3	abcdeg 16	fg 17	acdfg 30
bcdfg 31	abfg 20	cdeg 13	aeg 2
adefg 26	cefg 21	abdg 12	bcg 7

De 32 waarnemingen vormen samen het hoofdblok, dat verkregen wordt met behulp van de definiërende contrasten: merk op, dat elke niveaueen combinatie een even aantal letters gemeen heeft met elk der contrasten ABCE, ABDFG en CDEFG.

Deze 32 waarnemingen zijn op hun beurt weer in 4 blokken verdeeld. Blok 1 (hoofdblok) vindt men uit de contrasten ACD, BEF en ABCDEF, die elk een even aantal letters gemeen hebben met de niveaokombinaties van blok 1. De analyse geschiedt volgens de methode van Yates. We hebben op systematische wijze een keuze gedaan van 2^5 -niveaokombinaties uit het volledige 2^7 -experiment. Dit betekent dat het $\frac{1}{2} \times 2^7$ -experiment (we schrijven ook 2^{7-2} of algemeen 2^{n-k}) kan worden opgevat als een volledig 2^5 -experiment in een geschikt vijftal factoren. Geschikt nu is elk vijftal factoren dat niet één van de definiërende contrasten omvat: gēén van de niveaokombinaties behorende bij het vijftal factoren mag bestaan uit dezelfde letters als de definiërende contrasten. Kiezen we in het onderhavige voorbeeld de factoren A, B, C, D en E dan is dit geen juiste keuze: één der niveaokombinaties is abce, terwijl ABCE één der definiërende contrasten is.

Met een geschikt vijftal wordt bereikt dat tot elk der 2^5 groepen van 4 verstrengelde effecten precies één der 2^5 effecten behoort, die door het gekozen vijftal worden voortgebracht.

We kiezen een geschikt vijftal factoren, bijv. A, B, C, D en F en we gaan voor de Yates-analyse de 32 niveaokombinaties voor dit vijftal in de standaardvolgorde zetten; de letters e en g in de niveaucombinaties worden eenvoudig genegeerd.

Na uitvoering van het Yates-algoritme staat op de eerste regel I, dat verstrengeld is met ABCE, -ABDFG en -CDEFG (ga de tekens na!). Op de tweede regel komt A, dat verstrengeld is met BCE, -BDFG en -ACDEFG.

Als we aannemen dat de interacties van 3 en meer factoren te verwaarlozen zijn staat op de tweede regel een schatting voor het hoofdeffect A. Het blijkt dat ook de andere hoofdeffecten te bepalen zijn. Van de 2-faktor-interacties zijn AB met CE, AC met BE en AE met BC verstrengeld. Bovendien is DF verstrengeld met ABCDEF en dus met blokken. In totaal zijn er $\binom{7}{2} = 21$ 2-faktor-interacties. Hiervoor blijven dus $21 - 4 = 17$ vrijheidsgraden over.

De variantie-analyse is dan als volgt opgebouwd:

Bron van variatie	vrijheidsgraden
Blokken	3
Hoofdeffekten	7
2-faktor-interakties	17 (waarvan 3 paren)
Hogere interakties	4
<hr/>	
Totaal	31

Het aantal vrijheidsgraden 4 voor de restvariantie (als hogere inter-akties te verwaarlozen zijn) is vrij klein.

Het onderscheidingsvermogen zal dus niet erg groot zijn.

Dit betekent, dat de hoofdeffekten en 2-faktorinterakties tamelijk groot moeten zijn om ontdekt te worden.

Verder moeten de factoren zo met de letters worden geïdentificeerd, dat van de interakties, die niet kunnen worden gemeten veilig kan worden aangenomen, dat ze niet bestaan.

9. Roteerbare proefopzetten

9.1. Een aanvulling op een 2^n experiment

Het algemene model voor een 2^3 proef is

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \beta_4 x_1 x_2 + \beta_5 x_1 x_3 + \beta_6 x_2 x_3 + \beta_7 x_1 x_2 x_3 + \underline{e} .$$

Er komen geen termen x_1^2 , x_2^2 en x_3^2 in voor en er kan ook niet worden getoetst of deze termen terecht zijn weggelaten. Dit wordt wel mogelijk wanneer één of meer proeven worden gedaan in het midden van het experimentele gebied. Wanneer x_1 , x_2 en x_3 zijn gecodeerd als -1, +1, dan worden dus een aantal extra waarnemingen verricht in het punt (0,0,0).

Dit principe kan bij elke 2^n proef worden toegepast, ook voor fractionele schema's.

Het eenvoudigste geval is dat van een 2^2 proef met één waarneming in het midden. We hebben dan 5 waarnemingen, waarmee 5 orthogonale contrasten kunnen worden gevormd. Vier daarvan kennen we al uit het 2^2 geval, nl. het totaal, het A effect, het B effect en de AB interactie. Het vijfde correspondeert met een vergelijking tussen de waarnemingen in de hoekpunten en die in het midden:

$$y_1 + y_2 + y_3 + y_4 - 4y_5 .$$

Stel dat het model zou moeten zijn:

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \beta_4 x_1^2 + \beta_5 x_2^2 + \underline{e} .$$

De verwachting van het laatste contrast is dan:

$$\xi(y_1 + y_2 + y_3 + y_4 - 4y_5) = 4\beta_4 + 4\beta_5 .$$

We kunnen dus $(\beta_4 + \beta_5)$ schatten of de hypothese toetsen dat $\beta_4 + \beta_5 = 0$. Een andere schrijfwijze voor het model is

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \beta_4^* x_4 + \underline{e} .$$

De X- matrix is dan:

$$X = \begin{matrix} & \begin{matrix} x_0 & x_1 & x_2 & x_1 x_2 & x_4 \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -4 \end{pmatrix} & . \end{matrix}$$

Zoals in paragraaf 7.2 werd afgeleid is

$$b_4^* = \frac{x_{*4}' y}{x_{*4}' x_{*4}} = \frac{y_1 + y_2 + y_3 + y_4 - 4y_5}{20} ,$$

Dus blijktbaar is $\beta_4^* = \frac{1}{5} (\beta_4 + \beta_5)$. Verder is

$$\text{var}(b_4^*) = \frac{\sigma_0^2}{x_{*4}^1 x_{*4}^2} = \frac{1}{20} \sigma_0^2 .$$

De hypothese $H: \beta_4^* = 0$ kan dus met een t-toets, of als deel van de variantie-analyse met een F-toets, worden getoetst. Nodig hiervoor is dat een schatting van σ_0^2 beschikbaar is uit herhalingen of uit voorgaande experimenten.

9.2. Proefopzetten van de tweede orde

Met de methode van paragraaf 9.1 kan eventueel slechts worden geconcludeerd dat één of meer termen x_i^2 ten onrechte uit het model zijn weggelaten, zonder dat deze termen afzonderlijk goed kunnen worden bepaald.

Als men van meet af aan uitgaat van een kwadratisch model, d.w.z. een model dat lineaire termen x_i , kwadratische termen x_i^2 en producttermen $x_i x_j$ bevat, dan zijn andere proefopzetten nodig.

Door Box en Hunter zijn proefopzetten ontwikkeld die voldoen aan de eigenschap dat de variantie van de geschatte verwachting van \underline{y} , $\text{var}(\hat{\underline{y}})$, bij benadering constant is in het onderzochte gebied. Als men dus zoekt naar een optimum in de responsie dan gebeurt dat overal in het experimentele gebied even intensief. Dit zijn de zogenaamde roteerbare proefopzetten (rotatable designs).

Roteerbare proefopzetten bevatten altijd een aantal waarnemingen in het midden van het gebied. De andere punten vormen de hoekpunten van één of meer regelmatige figuren. Vaak vormt een deel van de punten een 2^k factorieel schema. Een aantal schema's zijn te vinden in hoofdstuk 8A van Cochran en Cox.

Voorbeeld 9.2.1.

Roteerbare proefopzet voor 2 variabelen.

De 8 waarnemingen zijn in de volgende tabel weergegeven.

$x_2 \backslash x_1$	-2	-1	0	1	2
$-\sqrt{3}$		y_2		y_3	
-1					
0	y_1		y_7, y_8		y_4
1					
$\sqrt{3}$		y_6		y_5	

Het model is:

$$\underline{y} = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_1 x_2 + \beta_4 x_1^2 + \beta_5 x_2^2 + \underline{e}.$$

De X-matrix is dan:

$$X = \begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & -1 & -\sqrt{3} & \sqrt{3} & 1 & 3 \\ 1 & 1 & -\sqrt{3} & -\sqrt{3} & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 0 & 0 & 4 & 0 \\ 1 & 1 & \sqrt{3} & \sqrt{3} & 1 & 3 \\ 1 & -1 & \sqrt{3} & -\sqrt{3} & 1 & 3 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$X'X = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 & 12 & 12 \\ 0 & 12 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 12 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 12 & 0 & 0 \\ 12 & 0 & 0 & 0 & 36 & 12 \\ 12 & 0 & 0 & 0 & 12 & 36 \end{bmatrix}.$$

De contrasten die β_1 , β_2 en β_3 schatten zijn orthogonaal t.o.v. alle andere. Dit geeft meteen

$$b_1 = \frac{1}{12} (-2y_1 - y_2 + y_3 + 2y_4 + y_5 - y_6)$$

$$b_2 = \frac{\sqrt{3}}{12} (-y_2 - y_3 + y_5 + y_6)$$

$$b_3 = \frac{\sqrt{3}}{12} (y_2 - y_3 + y_5 - y_6)$$

Voor de resterende 3 contrasten vinden we

$$X'X = \begin{bmatrix} 8 & 12 & 12 \\ 12 & 36 & 12 \\ 12 & 12 & 36 \end{bmatrix}, \quad (X'X)^{-1} = \frac{1}{48} \begin{bmatrix} 24 & -6 & -6 \\ -6 & 3 & 1 \\ -6 & 1 & 3 \end{bmatrix},$$

$$X'y = \begin{bmatrix} y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8 \\ 4y_1 + y_2 + y_3 + 4y_4 + y_5 + y_6 \\ 3y_2 + 3y_3 + 3y_5 + 3y_6 \end{bmatrix}.$$

Hieruit volgt

$$b_0 = \frac{1}{2} (y_7 + y_8)$$

$$b_4 = \frac{1}{8} (y_1 + y_4 - y_7 - y_8)$$

$$b_5 = \frac{1}{24} (-y_1 + 2y_2 + 2y_3 - y_4 + 2y_5 + 2y_6 - 3y_7 - 3y_8) .$$

10. Verschillende modellen voor orthogonale proeven met kwalitatieve factoren

In dit hoofdstuk worden factoriële proeven besproken met kwalitatieve factoren. De niveaus van een kwalitatieve factor kunnen op verschillende manieren tot stand komen. Ze kunnen bv. corresponderen met twee wasmiddelen, vier merken autobanden of drie verschillende meststoffen. In zo'n geval is de proef opgezet om (ondere andere) eventuele verschillen tussen deze wasmiddelen, autobanden of meststoffen op te sporen. Zou de proef worden herhaald omdat de uitkomsten nog niet duidelijk zijn, dan worden dezelfde niveaus gekozen. In zo'n geval spreekt men van vaste niveaus. De niveaus kunnen echter ook worden gevormd door vijf verschillende partijen grondstoffen, drie verschillende monsters uit een zak veevoer, vier arbeiders in een fabriek, enz. Men is nu niet in de niveaus geïnteresseerd die in deze ene proef zijn gekozen maar de vraag is nu of er in het algemeen verschillen tussen partijen grondstoffen, tussen monsters uit één zak, respectievelijk tussen arbeiders bestaan en zo ja hoe groot de bijdrage van deze factor in de variantie van het eindresultaat is. Kenmerkend voor deze situatie is dat bij een eventuele herhaling van de proef andere niveaus gekozen zullen worden voor eenzelfde factor. Nu hebben we te maken met stochastische niveaus, immers we kunnen de niveaus opvatten als trekkingen uit een populatie.

10.1. Een nieuwe modelformulering voor factoren met vaste niveaus

Een proef met twee factoren A en B op resp. a en b niveaus wordt uitgevoerd met n herhalingen. Het model schrijven we als volgt:

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + e_{ijk} \quad , \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, a \\ j = 1, \dots, b \\ k = 1, \dots, n \end{array}$$

Het aantal parameters bij het hoofdeffect A kan slechts $(a - 1)$ bedragen. Vandaar dat aan de parameters α_i ($i = 1, \dots, a$) nog een betrekking wordt opgelegd, nl.

$$\sum_i \alpha_i = 0 .$$

Evenzo wordt geëist dat

$$\sum_j \beta_j = \sum_i (\alpha\beta)_{ij} = \sum_j (\alpha\beta)_{ij} = 0 .$$

We zouden dus in het model bv. α_a , β_b , $(\alpha\beta)_{aj}$ ($j = 1, \dots, b$) en $(\alpha\beta)_{ib}$ ($i = 1, \dots, a$) weg kunnen laten.

De dummy variabelen x en de matrix X die in het algemene lineaire model voorkomen laten we hier niet expliciet zien.

We vermelden zonder bewijs dat de schattingen van de parameters op de volgende wijze worden gevonden:

$$\begin{aligned} m &= \hat{\mu} = \bar{y}_{...} \\ a_i &= \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...} \\ b_j &= \bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...} \\ (ab)_{ij} &= \bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y}_{...} . \end{aligned}$$

Het is gemakkelijk te verifiëren dat deze schatters zuiver zijn en dat ze voldoen aan de relaties die aan de corresponderende parameters zijn opgelegd. Er geldt nu

$$\begin{aligned} y_{ijk} &= \bar{y}_{...} + (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...}) + (\bar{y}_{.j.} - \bar{y}_{...}) + \\ &\quad + (\bar{y}_{ij.} - \bar{y}_{i..} - \bar{y}_{.j.} + \bar{y}_{...}) + (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.}) = \\ &= m + a_i + b_j + (ab)_{ij} + (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.}) . \end{aligned}$$

Omdat

$$\sum_i a_i = \sum_j b_j = \sum_i (ab)_{ij} = \sum_j (ab)_{ij} = \sum_k (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.}) = 0$$

is

$$\sum y_{ijk}^2 = nabm^2 + nb \sum_i a_i^2 + na \sum_j b_j^2 + n \sum_{i,j} (ab)_{ij}^2 +$$

$$+ \sum_{i,j,k} (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.})^2,$$

of

$$\sum y_{ijk}^2 - nabm^2 = nb \sum_i a_i^2 + na \sum_j b_j^2 + n \sum_{i,j} (ab)_{ij}^2 + \sum_{i,j,k} (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.})^2.$$

We hebben nu dezelfde splitsing in kwadratensommen verkregen die we eerder bij de variantie-analyse tegenkwamen, nl.:

$$KS_t = KS_A + KS_B + KS_{AB} + KS_r.$$

We gaan vervolgens de verwachtingen afleiden van deze kwadratensommen uitgedrukt in de nieuwe modelparameters.

$$\underline{KS}_A = nb \sum a_i^2 = nb \sum_i (\bar{y}_{i..} - \bar{y}....)^2 = nb \sum_i (\alpha_i + \bar{e}_{i..} - \bar{e}....)^2.$$

Dus

$$\mathcal{E} \underline{KS}_A = nb \mathcal{E} \sum_i (\alpha_i + \bar{e}_{i..} - \bar{e}....)^2 = nb \sum_i \alpha_i^2 + nb (a-1) \frac{\sigma_0^2}{nb}.$$

Immers $\bar{e}_{i..}$ is het gemiddelde van bn termen e_{ijk} en heeft dus een variantie σ_0^2/bn . Verder is de uit Wiskunde 31-49 bekende regel

$$\mathcal{E} \sum_{i=1}^n (\underline{x}_i - \bar{x})^2 = (n-1)\sigma^2$$

toegepast. Het dubbele produkt valt tenslotte weg omdat $\mathcal{E}(\bar{e}_{i..} - \bar{e}....) = 0$. Het aantal vrijheidsgraden van \underline{KS}_A bedraagt $(a-1)$, dus

$$GK_A = \frac{1}{a-1} \underline{KS}_A$$

en

$$\mathcal{E} \underline{GK}_A = nb \frac{\sum_i \alpha_i^2}{a-1} + \sigma_0^2.$$

Op soortgelijke wijze kan worden afgeleid dat

$$\mathcal{E} \underline{GK}_B = na \frac{\sum_i \beta_i^2}{b-1} + \sigma_0^2$$

en

$$\xi_{\underline{GK}_{AB}} = n \frac{\sum_{i,j} (\alpha\beta)_{ij}^2}{(a-1)(b-1)} + \sigma_0^2.$$

Tenslotte de restkwadratensom. Voor elke i en j geldt

$$\xi \sum_k (y_{ijk} - \bar{y}_{ij.})^2 = (n-1)\sigma_0^2.$$

Dus

$$\xi_{\underline{KS}_r} = ab(n-1)\sigma_0^2$$

en

$$\xi_{\underline{GK}_r} = \sigma_0^2.$$

Als we nu definiëren (hoewel het geen echte varianties zijn):

$$\sigma_A^2 := \frac{1}{a-1} \sum_i \alpha_i^2$$

$$\sigma_B^2 := \frac{1}{b-1} \sum_j \beta_j^2$$

$$\sigma_{AB}^2 := \frac{1}{(a-1)(b-1)} \sum_{i,j} (\alpha\beta)_{ij}^2,$$

dan kan de volgende tabel worden opgesteld

Bron van variatie	vr.gr.	KS	GK	$\xi(\underline{GK})$
A	a - 1	KS _A	GK _A	nbσ _A ² + σ ₀ ²
B	b - 1	KS _B	GK _B	naσ _B ² + σ ₀ ²
AB	(a - 1)(b - 1)	KS _{AB}	GK _{AB}	nσ _{AB} ² + σ ₀ ²
rest	ab(n - 1)	KS _r	GK _r	σ ₀ ²
totaal	abn - 1	KS _t		

De hypothese H: $\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_a = 0$, of $\sigma_A^2 = 0$ wordt getoetst met $F = \underline{GK}_A / \underline{GK}_r$.

Evenzo worden de hypothesen H: $\sigma_B^2 = 0$ en H: $\sigma_{AB}^2 = 0$ getoetst met resp. $F = \underline{GK}_B / \underline{GK}_r$ en $F = \underline{GK}_{AB} / \underline{GK}_r$.

Voorbeeld 10.1.1.

A \ B	1	2	3	4	5	totalen
1	17,20	19,67	19,09	18,21	17,57	188,45
	19,62	21,19	18,87	19,03	18,00	
2	24,24	32,95	26,50	26,65	23,72	268,08
	23,56	33,39	27,83	25,47	23,77	
3	19,52	22,99	22,44	12,38	19,80	194,60
	19,44	23,07	21,49	12,09	21,38	
4	15,29	21,79	16,15	14,98	23,46	181,64
	13,91	21,37	17,37	15,34	21,98	
totalen	152,78	196,42	169,74	144,15	169,68	832,77

Bron van variatie	vr. gr.	KS	GK	E(GK)	F
A	3	486,61	162,20	$10\sigma_A^2 + \sigma_0^2$	290
B	4	200,45	50,11	$8\sigma_B^2 + \sigma_0^2$	89,5
AB	12	182,59	15,22	$2\sigma_{AB}^2 + \sigma_0^2$	27,2
rest	20	11,14	0,56	σ_0^2	
totaal	39	880,78			

Uit de ξ (GK) kolom is het mogelijk σ_A^2 , σ_B^2 en σ_{AB}^2 te schatten, bv.

$$\hat{\sigma}_A^2 = \frac{1}{10} (162,20 - 0,56) = 16,16 .$$

10.2. Factoren met stochastische niveaus

We beschouwen opnieuw de situatie van paragraaf 10.1, dus 2 factoren met herhalingen. Nu echter nemen we aan dat de niveaus van beide factoren stochastisch zijn. Het model is dan

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + e_{ijk} .$$

$$\xi_{\alpha_i} = \xi_{\beta_j} = \xi_{(\alpha\beta)_{ij}} = \xi_{e_{ijk}} = 0 .$$

$$\text{var}(\alpha_i) = \sigma_A^2 , \text{var}(\beta_j) = \sigma_B^2 , \text{var}(\alpha\beta)_{ij} = \sigma_{AB}^2 , \text{var}(e_{ijk}) = \sigma_0^2 .$$

Tenslotte veronderstellen we dat alle in het model voorkomende stochastische variabelen onafhankelijk van elkaar zijn.

We kunnen nu dezelfde splitsing in kwadratensommen uitvoeren als in het model met vaste niveaus. De verwachtingen van de gemiddelde kwadratensommen gaan er nu echter anders uitzien. Nu is

$$\begin{aligned} \mathcal{E} \underline{KS}_A &= \mathcal{E} nb \sum_i (\bar{y}_{i..} - \bar{y}_{...})^2 = \\ &= nb \mathcal{E} \sum_i \{ (\alpha_i - \bar{\alpha} + (\alpha\beta)_{i.} - (\alpha\beta)_{..} + \bar{e}_{i..} - \bar{e}_{...})^2 = \\ &= nb \{ (a-1)\sigma_A^2 + \frac{a-1}{b} \sigma_{AB}^2 + \frac{a-1}{nb} \sigma_0^2 \} . \end{aligned}$$

Dus

$$\mathcal{E} \underline{GK}_A = nb\sigma_A^2 + n\sigma_{AB}^2 + \sigma_0^2 .$$

In de variantie-analysetablel wordt de kolom $\mathcal{E}(\underline{GK})$ dus anders:

Bron van variatie	vr.gr.	KS	GK	$\mathcal{E}(\underline{GK})$
A	a - 1	KS_A	GK_A	$nb\sigma_A^2 + n\sigma_{AB}^2 + \sigma_0^2$
B	b - 1	KS_B	GK_B	$na\sigma_B^2 + n\sigma_{AB}^2 + \sigma_0^2$
AB	(a - 1)(b - 1)	KS_{AB}	GK_{AB}	$n\sigma_{AB}^2 + \sigma_0^2$
rest	ab(n - 1)	KS_r	GK_r	σ_0^2
totaal	abn - 1	KS_t		

Als we nu de hypothese $H: \sigma_A^2 = 0$ willen toetsen dan zijn onder deze hypothese $\mathcal{E}(\underline{GK}_A)$ en $\mathcal{E}(\underline{GK}_r)$ niet langer aan elkaar gelijk. Hieruit blijkt dat de juiste F-toets niet meer $F = GK_A/GK_r$ kan zijn. De tabel suggereert tegelijkertijd welke toets hiervoor in de plaats komt, nl.

$$F = \frac{GK_A}{GK_{AB}} .$$

Er kan inderdaad worden bewezen dat deze toetsingsgrootheid, onder de hypothese $H: \sigma_A^2 = 0$, een F-verdeling met (a - 1) en (a - 1)(b - 1) vrijheidsgraden bezit.

In het voorbeeld 10.1.1 is de F-waarde voor de hypothese $H: \sigma_B^2 = 0$

$$F = \frac{50,11}{15,22} = 3,29 .$$

De kritieke waarde ($\alpha = 0,05$) bij 4 en 12 vrijheidsgraden is 3,26. Dus nog juist significant.

10.3. Gemengde modellen

Het kan voorkomen dat één factor vaste niveaus heeft en de andere stochastische niveaus. Zo kan in voorbeeld 10.1.1 de factor A corresponderen met 4 analysemethoden om het eiwitgehalte van veevoer te bepalen terwijl de 5 niveaus van B met 5 zakken overeenkomen die aselekt uit een grote partij zijn getrokken. In het model wordt dus α_i niet en β_j wel stochastisch, met

$$\sum_i \alpha_i = 0 \quad \text{en} \quad \sum_j \beta_j = 0 .$$

Voor wat de interactieterm betreft zijn er twee mogelijkheden. De interactie zal in ieder geval een stochastisch karakter hebben, maar er kunnen verschillende aannamen over de verdeling, in het bijzonder over de variantie-covariantiematrix, worden gedaan. We zullen twee modellen achtereenvolgens bespreken.

Model 1

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + e_{ijk}$$

$$\sum_i \alpha_i = 0 , \quad \sum_j \beta_j = 0 , \quad \sum_{ij} (\alpha\beta)_{ij} = 0 , \quad \sum_{ijk} e_{ijk} = 0$$

$$\text{var}(\beta_j) = \sigma_B^2 , \quad \text{var}(\alpha\beta)_{ij} = \sigma_{AB}^2 , \quad \text{var}(e_{ijk}) = \sigma_0^2 .$$

Alle stochastische variabelen zijn onafhankelijk.

De variantie-analysetabel, met inbegrip van de kolom $\xi(\underline{GK})$, ziet er nu precies zo uit als in het volledig stochastische model van paragraaf 10.2.

Model 2

$$Y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + (\alpha\beta)_{ij} + e_{ijk}$$

$$\sum_i \alpha_i = 0 , \quad \sum_j \beta_j = 0 , \quad \sum_{ij} (\alpha\beta)_{ij} = 0 , \quad \sum_i (\alpha\beta)_{ij} = 0 , \quad \sum_{ijk} e_{ijk} = 0$$

$$\text{var}(\beta_j) = \sigma_B^2 , \quad \text{var}(\alpha\beta)_{ij} = \frac{a-1}{a} \sigma_{AB}^2 , \quad \text{var}(e_{ijk}) = \sigma_0^2 .$$

Behalve de $(\alpha\beta)_{ij}$, die bij eenzelfde index j afhankelijk zijn vanwege de eis $\sum_i (\alpha\beta)_{ij} = 0$, zijn weer alle stochastische variabelen onafhankelijk van elkaar.

De variantie-analysetabel wordt nu:

Bron van variatie	vr.gr.	KS	GK	$\Sigma(\text{GK})$
A	a - 1	KS _A	GK _A	$nb\sigma_A^2 + n\sigma_{AB}^2 + \sigma_0^2$
B	b - 1	KS _B	GK _B	$na\sigma_B^2 + \sigma_0^2$
AB	(a - 1)(b - 1)	KS _{AB}	GK _{AB}	$n\sigma_{AB}^2 + \sigma_0^2$
rest	ab(n - 1)	KS _r	GK _r	σ_0^2
totaal	abn - 1	KS _t		

Uit de laatste kolom blijkt dat het hoofdeffect A moet worden getoetst tegen de interactie en het hoofdeffect B en de interactie tegen de restkwadraten-som.

Model 2 wordt het meest toegepast, pas vrij recent wordt ook aandacht aan model 1 besteed. We zullen ons in het volgende tot model 2 beperken, hoewel de regels voor het berekenen van $\Sigma(\text{GK})$ ingewikkelder zijn.

10.4. Geneste factoren

Veronderstel dat in voorbeeld 10.1.1 A opnieuw 4 analysemethoden voorstelt. In plaats van 5 zakken worden er nu echter 20 zakken aselekt getrokken uit een grote partij, zodat voor elke methode 5 duplo-monsters uit een ander vijftal zakken worden getrokken. De factor B heeft nu niet meer 5 niveaus die bij elk van de niveaus van A voorkomen. Men zegt nu dat B ondergeschikt is aan A of dat B genest is binnen A. We noteren dit met B:A. In de eerst besproken situatie spreekt men van nevengeschikte factoren. Een geneste factor zal vrijwel altijd een stochastisch karakter hebben. Het model wordt nu

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_{j:i} + e_{ijk} ,$$

$$\sum_i \alpha_i = \sum_j \beta_{j:i} = \sum_{ijk} e_{ijk} = 0$$

$$\text{var}(\beta_{j:i}) = \sigma_{B:A}^2 , \quad \text{var}(e_{ijk}) = \sigma_0^2 .$$

Alle stochastische variabelen zijn onafhankelijk.

De splitsing in kwadratensommen kan formeel nog steeds op dezelfde manier gebeuren, maar KS_B heeft nu op zich geen betekenis meer. We definiëren nu

$$KS_{B:A} := KS_B + KS_{AB} .$$

Voor de vrijheidsgraden geldt

$$v_{B:A} = v_B + v_{AB} = (b - 1) + (a - 1)(b - 1) = a(b - 1) .$$

De variantie-analysetabel is:

Bron van variatie	vr.gr.	KS	GK	$\xi(\underline{GK})$
A	a - 1	KS_A	GK_A	$nb\sigma_A^2 + n\sigma_{B:A}^2 + \sigma_0^2$
B:A	a(b - 1)	$KS_{B:A}$	$GK_{B:A}$	$n\sigma_{B:A}^2 + \sigma_0^2$
rest	ab(n - 1)	KS_r	GK_r	σ_0^2
totaal	abn - 1	KS_t		

We toetsen het hoofdeffect A dus tegen B:A en B:A tegen de rest.

Opmerking. Herhalingen zoals ze in voorbeeld 10.1.1 voorkomen vormen een factor die genest is binnen alle andere factoren. We zouden er dus voor kunnen schrijven: C:AB met aantal niveaus $c = n$. Voor de restkwadratensom geldt dan

$$KS_r = KS_{C:AB} = KS_C + KS_{AC} + KS_{BC} + KS_{ABC} .$$

$$v_r = (c - 1) + (a - 1)(c - 1) + (b - 1)(c - 1) + (a - 1)(b - 1)(c - 1) = ab(c - 1) = ab(n - 1) .$$

10.5. Rekenregels voor gemengde modellen.

We besluiten met het geven van algemene rekenregels voor gemengde modellen waarin zowel nevenschikte als ondergeschikte factoren voorkomen. Ter vereenvoudiging van de formules geven we deze voor drie factoren, maar de regels zijn algemeen geldig.

We gaan uit van een aantal factoren waarbij is aangegeven hoe ze in de proefopzet genest voorkomen. Bv. A, B:A, C:A. De eerste fase bestaat nu uit het vinden van de mogelijke effecten (hoofdeffecten en interacties), elk met een kwadratensom en een variantiecomponent. We beginnen met een lijst van effecten en interacties door achtereenvolgens alle factoren, combinaties van twee factoren, combinaties van 3 factoren e.d. op te schrijven. In het bovengenoemde voorbeeld wordt dit:

A
B:A
C:A
AB:A
AC:A
BC:AA
ABC:AA

Dus eventuele letters na de dubbele punt worden apart vermenigvuldigd en weer achter de dubbele punt geplaatst. Vervolgens worden herhaalde letters achter de dubbele punt door één letter vervangen. Daarna worden die interacties verwijderd waarbij dezelfde letter voor en na de dubbele punt komt. Er blijven dan over:

A, B:A, C:A, BC:A .

We hebben dus de volgende regel:

Regel 1

Iedere interactie is van de vorm ABC...:XYZ..., waarbij XYZ het produkt is van alle letters rechts van de dubbele punt en ABC het produkt van de overige letters.

Herhaalde letters worden door één letter vervangen.

Interacties waarbij dezelfde letter aan weerszijden van de dubbele punt voorkomt bestaan niet.

Bij elke interactie hoort een variantiecomponent en een kwadratensom.

Dit geeft voor diverse modellen met drie factoren het volgende resultaat.

Modellen	Variantiecomponenten en kwadratensommen
A, B, C	A, B, C, AB, AC, BC, ABC
A, B, C:A	A, B, C:A, AB, BC:A
A, B:A, C:A	A, B:A, C:A, BC:A
A, B, C:AB	A, B, C:AB, AB
A, B:A, C:AB	A, B:A, C:AB

Regel 2

Het aantal vrijheidsgraden van een kwadratensom is het produkt van de aantallen niveaus van de factoren rechts van de dubbele punt en de aantallen

niveaus verminderd met één voor de factoren links van de dubbele punt en voor alle factoren in combinaties waarin geen dubbele punt voorkomt.

Voorbeelden:

KS	vrijheidsgraden
A	$a - 1$
AB	$(a - 1)(b - 1)$
C:A	$a(c - 1)$
C:AB	$ab(c - 1)$
BC:A	$a(b - 1)(c - 1)$

Als controlemiddel hebben we nu de som van de vrijheidsgraden die moet kloppen met het totale aantal waarnemingen minus één.

Voorbeeld: Model A, B:A, C:A

Effect	vrijheidsgraden
A	$(a - 1)$
B:A	$a(b - 1)$
C:A	$a(c - 1)$
BC:A	$a(b - 1)(c - 1)$
Totaal	$abc - 1$

We voeren nu symbolen in voor de bruto-kwadratensommen

$$\begin{aligned}
 S_{ABC} &= \sum_{i,j,k} y_{ijk}^2, & S_A &= \sum_i y_{i..}^2 / bc \\
 S_{AB} &= \sum_{i,j} y_{ij.}^2 / c, & S_B &= \sum_j y_{.j.}^2 / ac \\
 S_{AC} &= \sum_{i,k} y_{i.k}^2 / b, & S_C &= \sum_k y_{..k}^2 / ab \\
 S_{BC} &= \sum_{j,k} y_{.jk}^2 / a, & S_0 &= y_{...}^2 / abc.
 \end{aligned}$$

Regel 3

De kwadratensom voor een interactie wordt gevonden door de volgens regel 2 gevonden formule voor de vrijheidsgraden uit te werken en daarna a te vervangen door S_{AB} , b door S_B enz. en 1 door S_0 .

Voorbeelden:

KS	vrijheidsgraden	KS
A	$a - 1$	$S_A - S_0$
AB	$ab - a - b + 1$	$S_{AB} - S_A - S_B + S_0$
C:A	$ac - a$	$S_{AC} - S_A$
C:AB	$abc - ab$	$S_{ABC} - S_{AB}$
BC:A	$abc - ab - ac + a$	$S_{ABC} - S_{AB} - S_{AC} + S_A$

Alvorens de regels te geven voor het bepalen van de verwachtingen van de gemiddelde kwadratensommen geven we eerst een voorbeeld.

Model A, B, C:A.

GK	Variantiecomponenten					
	σ^2_A	σ^2_B	$\sigma^2_{C:A}$	σ^2_{AB}	$\sigma^2_{BC:A}$	σ^2_0
A	bc	0	bc*	b*c	b*c*	1
B	0	ac	0	a*c	c*	1
C:A	0	0	b	0	b*	1
AB	0	0	0	c	c*	1
BC:A	0	0	0	0	1	1

Dus bijvoorbeeld

$$E(\underline{GK}_A) = bc\sigma^2_A + bc^*\sigma^2_{C:A} + b^*c\sigma^2_{AB} + b^*c^*\sigma^2_{BC:A} + \sigma^2_0.$$

Regel 4

De factor voor een variantiecomponent is

= 0, wanneer de G.K. een letter bevat die niet bij de variantiecomponent voorkomt;

= 1, voor σ^2_0 en voor de combinatie van GK en σ^2 die beide alle letters bevatten.

De overige termen bestaan uit het product van ongesterde kleine letters voor die factoren die niet bij σ^2 voorkomen en gesterde kleine letters voor die factoren die bij σ^2 wél voorkomen (maar niet achter een dubbele punt) en bij de GK niet.

Regel 5

Bij een proef met n zuivere herhalingen binnen de factorcombinaties worden alle termen behalve die in de kolom van σ_0^2 met n vermenigvuldigd. Verder komt er in dat geval op de laatste regel een restkwadratensom met als verwachting alleen σ_0^2 .

Regel 6

Voor factoren met vaste niveaus zijn de gesterde letters = 0 en voor factoren met stochastische niveaus zijn ze gelijk aan 1.

Voor het model A, B, C:A tenslotte de uitwerking in 4 gevallen.

GK	σ_A^2	σ_B^2	$\sigma_{C:A}^2$	σ_{AB}^2	$\sigma_{BC:A}^2$	σ_0^2	
A	bc	0	b	c	1	1	$a^* = 1$
B	0	ac	0	c	1	1	$b^* = 1$
C:A	0	0	b	0	1	1	$c^* = 1$
AB	0	0	0	c	1	1	<u>A</u> , <u>B</u> , <u>C</u>
BC:A	0	0	0	0	1	1	
A	bc	0	b	0	0	1	$a^* = 1$
B	0	ac	0	c	1	1	$b^* = 0$
C:A	0	0	b	0	0	1	$c^* = 1$
AB	0	0	0	c	1	1	<u>A</u> , <u>B</u> , <u>C</u>
BC:A	0	0	0	0	1	1	
A	bc	0	b	c	1	1	$a^* = 0$
B	0	ac	0	0	1	1	$b^* = 1$
C:A	0	0	b	0	1	1	$c^* = 1$
AB	0	0	0	c	1	1	<u>A</u> , <u>B</u> , <u>C</u>
BC:A	0	0	0	0	1	1	
A	bc	0	b	0	0	1	$a^* = 0$
B	0	ac	0	0	1	1	$b^* = 0$
C:A	0	0	b	0	0	1	$c^* = 1$
AB	0	0	0	c	1	1	<u>A</u> , <u>B</u> , <u>C</u>
BC:A	0	0	0	0	1	1	

Alternatieve uitwerking van voorbeeld 3.2.1, pag.16 e.v.

$$y = 50 - 2x + 0,04x^2 + \underline{e} \quad , \quad \underline{e} \sim N(0,4) .$$

Codering: $x_0 = 1$, $x_1 = (x - 35)/5$, $x_2 = x_1^2$, $z = y - 20$.

$$\underline{z} = 9 + 4x_1 + x_2 + \underline{e} .$$

De waarnemingen zijn:

x_1	-3	-2	-1	0	1	2	3
z	5,8	8,1	4,6	12,4	16,8	21,3	26,0

$$X = \begin{pmatrix} 1 & -3 & 9 \\ 1 & -2 & 4 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \end{pmatrix} \quad X'X = \begin{pmatrix} 7 & 0 & 28 \\ 0 & 28 & 0 \\ 28 & 0 & 196 \end{pmatrix} = 7 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \\ 0 & 4 & 0 \\ 4 & 0 & 28 \end{pmatrix}$$

$$(X'X)^{-1} = \frac{1}{84} \begin{pmatrix} 28 & 0 & -4 \\ 0 & 3 & 0 \\ -4 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$X'z = \begin{pmatrix} 95,0 \\ 99,2 \\ 425,2 \end{pmatrix} \quad b = (X'X)^{-1}X'z = \frac{1}{84} \begin{pmatrix} 959,2 \\ 297,6 \\ 45,2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11,42 \\ 3,54 \\ 0,538 \end{pmatrix} .$$

De geschatte relatie is dus

$$z = 11,42 + 3,54x_1 + 0,538x_1^2 .$$

De overeenstemming met de ware vergelijking is tamelijk slecht. Dit wordt veroorzaakt door de vrij grote negatieve waarde van e_7 , nl. $-4,0$. Als we $\sigma_0 = 2$ bekend veronderstellen, kunnen we, op grond van de geschatte waarden, betrouwbaarheidsintervallen voor de β 's opstellen.

$$\beta_0 = 11,42 \pm 1,96\sqrt{\frac{28}{84}} \quad . \quad 2 = 11,42 \pm 2,26 \quad (\beta_0 = 9) \quad .$$

$$\beta_1 = 3,54 \pm 1,96\sqrt{\frac{3}{84}} \quad . \quad 2 = 3,54 \pm 0,74 \quad (\beta_1 = 4) \quad .$$

$$\beta_2 = 0,538 \pm 1,96\sqrt{\frac{1}{84}} \quad . \quad 2 = 0,538 \pm 0,428 \quad (\beta_2 = 1) \quad .$$

Alleen het interval voor β_1 bevat dus de ware waarde.

Uit $(X'X)^{-1}$ kunnen we ook de correlatie tussen de schatters \underline{b}_0 en \underline{b}_2 afleiden. Deze is

$$\rho(\underline{b}_0, \underline{b}_2) = \frac{-4}{\sqrt{28}} = -0,76 \quad .$$

Hiermee in overeenstemming is het feit dat β_0 te hoog en β_2 te laag wordt geschat.

Pag. 22

De restkwadratensom wordt als volgt berekend:

$$z'z = \sum z_i^2 = 1686,10 \quad ,$$

$$b'X'z = \frac{1}{84}(959,2 \times 95,0 + 297,6 \times 99,2 + 45,2 \times 425,2) = 1665,06 \quad .$$

(Voor het verkrijgen van een nauwkeurigere uitkomst is de factor $\frac{1}{84}$ apart gehouden.)

Dus

$$KS_r = 1686,10 - 1665,06 = 21,04 \quad .$$

Het aantal vrijheidsgraden is $n - (k+1) = 7 - 3 = 4$, dus de schatting van $\hat{\sigma}_0^2$ is

$$\hat{\sigma}_0^2 = \frac{21,04}{4} = 5,26 \quad ; \quad \hat{\sigma}_0 = 2,29 \quad .$$

Pag.24

Hieruit volgt:

$$\hat{\sigma}^2(\underline{b}_0) = \frac{1}{84} \times 28 \times 5,26 = 1,75 \quad , \quad \hat{\sigma}(\underline{b}_0) = 1,32 \quad ,$$

$$\hat{\sigma}^2(\underline{b}_1) = \frac{1}{84} \times 3 \times 5,26 = 0,188 \quad , \quad \hat{\sigma}(\underline{b}_1) = 0,433 \quad ,$$

$$\hat{\sigma}^2(\underline{b}_2) = \frac{1}{84} \times 5,26 = 0,0626 \quad , \quad \hat{\sigma}(\underline{b}_2) = 0,250 \quad .$$

Het betrouwbaarheidsinterval met 95% betrouwbaarheid voor β_0 is ($t_4(0,05) = 2,78$):

$$11,42 - 2,78 \times 1,32 < \beta_0 < 11,42 + 2,78 \times 1,32$$

of

$$7,75 < \beta_0 < 15,09 \quad (\text{ware waarde: } \beta_0 = 9) \quad .$$

Evenzo:

$$2,34 < \beta_1 < 4,74 \quad (\text{ware waarde: } \beta_1 = 4) \quad ,$$

$$-0,16 < \beta_2 < 1,23 \quad (\text{ware waarde: } \beta_2 = 1) \quad .$$

Alle drie de betrouwbaarheidsintervallen bevatten dus de ware waarde, maar ze zijn tamelijk ruim. Om nauwere betrouwbaarheidsintervallen te krijgen moeten meerdere waarnemingen worden uitgevoerd, of waarnemingen bij x-waarden die verder uit elkaar liggen.

Pag.26

Als illustratie nemen we voorbeeld 3.2.1.

Het aangepaste model is:

$$\hat{z} = \underline{b}_0 + \underline{b}_1 x_1 + \underline{b}_2 x_1^2 .$$

Wat is de variantie van \hat{z} in het punt $x_1 = 1$?

We beschouwen dus

$$z = 1 \cdot \beta_0 + 1 \cdot \beta_1 + 1 \cdot \beta_2 .$$

De schatter \hat{z} heeft als variantie:

$$\begin{aligned} [1 \quad 1 \quad 1] (X'X)^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \sigma_0^2 &= \\ [1 \quad 1 \quad 1] \frac{1}{84} \begin{pmatrix} 28 & 0 & -4 \\ -4 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \sigma_0^2 &= \frac{24}{84} \sigma_0^2 = \frac{2}{7} \sigma_0^2 . \end{aligned}$$