DOI:10.13546/j.cnki.tjyjc.2012.09.008

线性混合模型方差分量的谱分解估计

许王莉，李妍文，余　味
（中国人民大学 统计学院，北京 100872）

摘　要：文章把文献[8]关于含有两个方差分量的线性混合效应模型的谱分解估计推广到一般线性混合效应模型，基本思想是通过把所研究的模型转化为含有两个方差分量的线性混合效应模型。首先研究如何构造含有三个方差分量的线性混合模型的谱分解估计，给出谱分解估计的无偏估计类。然后把所得到的结论推广到一般线性混合效应模型中。

关键词：线性混合效应模型；方差分量；谱分解估计
中图分类号：F224.3　　**文献标识码**：A　　**文章编号**：1002-6487（2012）09-0069-03

近20年来，线性混合效应模型在生物、医学、经济、金融、环境科学等领域得到愈来愈广泛的应用。关于线性混合效应模型方差分量的估计，文献中已经有很多估计方法，如方差分析估计(ANOV A)、极大似然估计(ML)、限制极大似然估计(REML)、最小二乘估计(LS)、最小范数二次无偏估计(MNQUE) 等。各种方差分量估计有各自的优点和缺点. 方差分析估计具有显式表达式，不需根据迭代得到，但不能保证估计的非负性。其中，文献[1]给出方差分量的非负估计；文献[2]、[3]基于方差分析估计提出了修正的估计，并讨论了其优良性。极大似然估计、限制极大似然估计虽是非负估计，然而此估计基于非线性方程组得到迭代结果，计算结果较为复杂。其中，文献[4]、[5]给出方差分量的限制极大似然估计。文献[6]研究了由最小二乘法得到方差分量的非负估计。最小范数二次无偏估计也无法保证估计的非负性，虽有较小的均方误差，但迭代计算有时候依赖于方差分量的初始值。

文献[7]提出方差分量估计的新方法—谱分解估计。文献[7]～[10]研究了线性混合效应模型的谱分解估计,并得出估计的一些优良性质。此方法特点是，同时考虑方差分量和固定效应的估计且有显示解，由于估计具有一些优良的性质，这有利于做进一步的统计推断,如假设检验、区间估计和模型诊断等，因此谱分解估计有较广阔的应用。但是，就作者知道的而言，目前关于谱分解估计的研究都是针对含有两个方差分量的线性混合效应模型。因为直接对含有两个方差分量的模型左乘主幂等矩阵得到的新模型，此模型方差只有一个未知参数，不难根据这一模型得出这一未知参数的最优线性无偏估计。但是对含有两个以上方差分量的模型，无法实施同样的处理方法，主要原因是由于未知参数多于三个。一般的线性混合模型是含有两个方差分量线性混合效应模型的拓展，实际应用比较广泛，本文试图建立此模型的谱分解估计。基本思想是首先把一般线性混合效应模型转化为含有两个方差分量的混合效应模型，然后利用已有的关于两个方差分量的谱分解方法得出方差的估计。本文将谱分解估计方法首先推广到含三个方差分量的线性混合效应模型中，给出了方差分量的谱分解估计。然后将得到的结论推广到到一般线性混合效应模型中。

对含有三个方差分量 σ_1^2, σ_2^2 和 σ^2 的线性混合效应模型，小节2提出含有三个方差分量的谱分解估计，小节3把结果推广到一般线性混合效应模型。

为了记号方便，用 $rk(A)$, A^{-1} 分别表示给定矩阵 A 的秩和逆。记 $P_A = A(A'A)^{-}A'$，$N_A = I - P_A$。

1　三个方差分量的谱分解估计

含三个方差分量的线性混合效应模型矩阵表达式：

$$y = X\beta + U_1\xi_1 + U_2\xi_2 + \varepsilon \quad (1)$$

这里 y 是 $n\times 1$ 观测向量，X 是 $n\times l$ 设计矩阵，

基金项目：国家自然科学基金资助项目(10701079)；教育部人文社会科学研究资助项目(08JC910002)

学位论文集，2007.
[14]Carlos A. Bana e Costa, Mónica D. Oliveira. A multicriteria decision analysis model for faculty evaluation[J]. Omega. Volume 40, Issue 4, August 2012, Pages 424-436.
[15]张革，李岱松. 教学研究型大学教师绩效评价体系研究[J]. 中国高教研究. 2008,(03).
[16]B.M. Althouse, J.D. West, C.T. Bergstrom and T. Bergstrom, Differences in impact factor across fields and over time. Journal of the American Society for Information Science and Technology, 60 (2009), pp. 27-34.

（责任编辑/浩　天）

$rk(X)=p\leqslant l$ 。β 是 $l\times 1$ 未知的固定效应向量, U_1, U_2 分别为已知的 $n\times m$, $n\times q$ 设计矩阵, ξ_1, ξ_2 分别为 $m\times 1$, $q\times 1$ 随机效应向量, ε 为 $n\times 1$ 的随机误差向量。假定 $\xi_1\sim N_m(0,\sigma_1^2 I_m)$, $\xi_2\sim N_q(0,\sigma_2^2 I_q)$, $\varepsilon\sim N_n(0,\sigma^2 I_n)$ 。并且 ξ_1, ξ_2, ε 相互独立。

文章的基本思想是通过将含有三个方差分量线性混合效应模型转化为两个方差分量的线性混合效应模型, 借鉴文献[11]关于两方差分量谱分解估计的思想, 给出对于方差分量 σ_1^2, σ_2^2 的谱分解估计。以下先给出方差分量 σ_1^2 的谱分解估计及其性质。

1.1 方差分量 σ_1^2 的谱分解估计

对矩阵 U_2, 存在矩阵 W_2 满足条件 $W_2W_2'=I_{n-q}$, $W_2U_2=0$.用矩阵 W_2 左乘模型(1)得:

$$y^*=X^*\beta+U_1^*\xi_1+\varepsilon^* \tag{2}$$

这里 $y^*=W_2y$, $X^*=W_2X$, $U_1^*=W_2U_1$, $\varepsilon^*=W_2\varepsilon$, $\varepsilon^*\sim N(0,\sigma^2 I_{n-q})$, 且 ξ_1 和 ε^* 独立。

令 $V_1=U_1^*U_1^{*'}$, $s_1=rk(V_1)$, V_1 的谱分解表示为 $V_1=\sum_{i=1}^{k_1}\lambda_i M_i$,这里 $\lambda_1>\lambda_2>\ldots>\lambda_{k_1}$ 为 V_1 的所有不同的非零特征根, M_i 为对应的主幂等矩阵.记 $M_0=I-\sum_{i=1}^{k_1}M_i$, 则 $rk(M_0)=n-s_1$ (假定 $n-s_1>0$)。

记 $\lambda_0=0$, $a_i=\sigma^2+\lambda_i\sigma_1^2, i=1,2,\cdots,k_1$,用 $M_i(i=0,1,2,\cdots,k_1)$ 左乘模型(2), 可得:

$$y_i^*=X_i^*\beta+\varepsilon_i^*, \varepsilon_i^*\sim N(0,a_iM_i), i=0,1,\cdots,k_1, \tag{3}$$

这里 $y_i^*=M_iy^*$, $X_i^*=M_iX^*$, $\varepsilon_i^*=M_iU_1^*\xi_1+M_i\varepsilon^*$ 服从分布 $N(0,a_iM_i)$ 。根据最小二乘理论, 不难得到 a_i 的最优线性无偏估计 [8] $\hat{a}_i=\gamma_i^{-1}y^{*'}(M_i-P_{M_iX^*})y^*$, 其中 $\gamma_i=rk(M_i)-rk(M_iX^*)$. 则方差 σ_1^2, σ^2 的谱分解估计分别为:

$$\hat{\sigma}_{ij}^2=\frac{\lambda_i\hat{a}_j-\lambda_j\hat{a}_i}{\lambda_i-\lambda_j}, \hat{\sigma}_{1ij}^2=\frac{\hat{a}_i-\hat{a}_j}{\lambda_i-\lambda_j},\ \ i\neq j$$

根据文献[8], [11]不难证明上述 $\hat{\sigma}_{ij}^2$, $\hat{\sigma}_{1ij}^2$ 为无偏估计。显然如果 $k_1>1$, σ^2, σ_1^2 的估计并不具有 唯一表达式, 无偏估计类为:

$$L_1=\{\hat{\sigma}^2=\sum_{i\neq j}c_{ij}\hat{\sigma}_{ij}^2, \sum_{i\neq j}c_{ij}=1\}$$

$$L_2=\{\hat{\sigma}_1^2=\sum_{i\neq j}d_{ij}\hat{\sigma}_{1ij}^2, \sum_{i\neq j}d_{ij}=1\}$$

1.2 方差分量 σ_2^2 的估计

类似于方差 σ_1^2 的估计方法, 对矩阵 U_1, 存在 W_1, 满足条件 $W_1W_1'=I_{n-m}$, $W_1U_1=0$ 。用矩阵 W_1 左乘模型(1), 可得:

$$y^{**}=X^{**}\beta+U_2^{**}\xi_2+\varepsilon^{**} \tag{4}$$

这里 $y^{**}=W_1y$, $X^{**}=W_1X$, $U_2^{**}=W_1U_2$, $\varepsilon^{**}=W_1\varepsilon\sim N(0,\sigma^2 I_{n-m})$ 。

令 $V_2=U_2^{**}U_2^{**'}$, $s_2=rk(V_2)$, V_2 的谱分解为 $V_2=\sum_{i=1}^{k_2}\eta_iQ_i$,这里 $\eta_1>\eta_2>\ldots>\eta_{k_2}$ 为 V_2 的所有不同的非零特征根, Q_i 为对应的主幂等矩阵。令 $Q_0=I-\sum_{i=1}^{k_2}Q_i$ 。则 $rk(Q_0)=n-s_2$, 本文总假定 $n-s_2>0$ 。记 $b_i=\sigma^2+\eta_i\sigma_2^2$, $i=0,1,2,\cdots,k_2$, 这里约定 $\eta_0=0$ 。

用 $Q_i(i=0,1,2,\cdots,k_2)$ 分别左乘模型(4), 则得到 k_2+1 个新模型,它们分别为:

$$y_i^{**}=X_i^{**}\beta+\varepsilon_i^{**}, \varepsilon_i^{**}\sim N(0,b_iQ_i), i=0,1,\cdots,k_2 \tag{5}$$

其中 $y_i^{**}=Q_iy^{**}$, $X_i^{**}=Q_iX^{**}$, $\varepsilon_i^{**}=Q_iU_2^{**}\xi_2+Q_i\varepsilon^{**}$ 。对于任意的 $i(i=0,1,2,\cdots,k_2)$,利用最小二乘理论, 可得模型(5)中 $b_i(i=0,1,2,\cdots,k_2)$ 的最优线性无偏估计为 $\hat{b}_i=\upsilon_i^{-1}y^{**'}(Q_i-P_{Q_iX^{**}})y^{**}$, 这里 $\upsilon_i=rk(Q_i)-rk(Q_iX^{**})$ 。则方差 σ_1^2, σ^2 的谱分解估计分别为

$$\hat{\sigma}_{ij}^2=\frac{\eta_i\hat{b}_j-\eta_j\hat{b}_i}{\eta_i-\eta_j}, \hat{\sigma}_{2ij}^2=\frac{\hat{b}_i-\hat{b}_j}{\eta_i-\eta_j},\ \ i\neq j$$

根据文献[8], [11]不难证明上述 $\hat{\sigma}_{ij}^2, \hat{\sigma}_{2ij}^2$ 为无偏估计。显然如果 $k_2>1$, σ^2, σ_2^2 的估计并不具有 唯一表达式, 无偏估计类为:

$$L_3=\{\hat{\sigma}^2=\sum_{i\neq j}f_{ij}\hat{\sigma}_{ij}^2, \sum_{i\neq j}f_{ij}=1\}$$

$$L_4=\{\hat{\sigma}_2^2=\sum_{i\neq j}g_{ij}\hat{\sigma}_{1ij}^2, \sum_{i\neq j}g_{ij}=1\}$$

2 一般线性混合效应模型的谱分解估计

对于具有一般形式的线性混合效应模型:

$$y=X\beta+U_1\xi_1+U_2\xi_2+\cdots+U_k\xi_k+\varepsilon \tag{6}$$

这里 y 是 $n\times 1$ 观测向量, X 是 $n\times l$ 设计矩阵, $rk(X)=p\leqslant l$ 。β 是 $l\times 1$ 未知的固定效应向量, $U_1, U_2, \cdots, U_k$ 分别为已知的 $n\times m_1, n\times m_2, \cdots, n\times m_k$ 设计矩阵, $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_k$ 分别为 $m_1\times 1, m_2\times 1, \cdots, m_k\times 1$ 随机效应向量, ε 为 $n\times 1$ 的随机误差向量。假定 $\xi_1\sim N_{m_1}(0,\sigma_1^2 I_{m_1})$, $\xi_2\sim N_{m_2}(0,\sigma_2^2 I_{m_2}), \cdots, \xi_k\sim N_{m_k}(0,\sigma_k^2 I_{m_k})$, $\varepsilon\sim N_n(0,\sigma^2 I_n)$ 。并且 $\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_k, \varepsilon$ 相互独立。

接下来说明如何给出 $\sigma_1^2, \cdots, \sigma_k^2$ 的谱分解估计.由于上一节比较详细的说明了含有三个方差分量的谱分解估计, 这一节就针对一般线性混合模型仅介绍方差谱分解估计的主要思想. 类似于对含三方差分量的线性混合模型的分析, 下面给出 σ_i^2 的谱分解估计。记 $U_i^*=(U_1,\cdots,U_{i-1},U_{i+1},\cdots,U_k)$, $rk(U_i^*)=u_i$, 对 U_i^*, 存在 K_i, 满足条件 $K_iK_i'=I_{n-u_i}$, $K_iU_i^*=0$. 用矩阵 K_i 左乘模型 (6)得:

$$K_iy=K_iX\beta+K_iU_i\xi_i+K_i\varepsilon \tag{7}$$

通过这样的转化, 将一般线性混合模型转化为含两方差分量的线性混合模型. 从而类似于小节1的估计方法, 得出一般线性混合效应模型方差的谱分解估计, 这里不再赘述。

3 讨论

文章得到的谱分解估计类 L_1, L_2, L_3, L_4，并不能保证估计的非负性. 因此在使得估计均方误差较小的情况下, 我们可以研究在不同情况下谱分解估计的非负性, 研究什么情况下谱分解估计方差最小, 研究谱分解估计与方差分析估计在什么条件下等价。事实上, 文献[8], [11]是关于含有两个方差分量线性混合效应模型的谱分解估计以及性质的研究, 文献中给出上述所说的谱分解估计的性质, 对于文章中研究的一般线性混合效应模型的谱分解估计类, 不难得到类似的结论, 这里就不再累述。

参考文献:

[1]范永辉,王松桂.两向分类随机效应模型中方差分量的非负估计[J].工程数学学报,2007,(24).

[2]许王莉.线性混合效应模型中方差分量的估计[J].应用概率统计,2009,(25).

[3]许王莉.双向分类随机效应模型中方差分量的估计[J].工程数学学报,2009,(26).

[4]Calvin J.A.,Dykstra R. L.Maximum Likelihood Estimation of A Set of Covariance Matrices Under Lower order Restriction with Applications to Balanced Multivariate Variance Components Models[J]. Ann. Statist, 1991, (19).

[5]Calvin J.A.Real Estimation in Unbalanced Multivariate Variance Components Models Using an EM Algorithm[J].Biometrics,1993,(49).

[6]Calvin J.A.,Dykstra R. L.Least Squares Estimation of Covariance Matrices in Balanced Multivariate Variance Components Model[J].J. Amer. Statist. Assoc.,1991,(86).

[7]王松桂,尹素菊,线性混合模型参数的一种新估计 [J].中国科学(A辑),2002,(32).

[8]史建红,王松桂,方差分量的非负估计[J].工程数学学报,2004,(21).

[9]Shi J.H., Wang S.G.The Spectral Decomposition of Covariance Matrices for the Variance Components[J].Journal of Multivariate Analysis, 2006, (97).

[10]Shi J.H., Wang S.G.Some Properties of Spectral Decomposition Estimate of Variance Components[J].Journal of Applied Probability and Statistics,2004,(20).

[11]史建红,王松桂.方差分量的广义谱分解估计[J].高校应用数学学报(A辑),2005,(2).

[12]范永辉,王松桂.两向分类随机效应模型中方差分量的非负估计[J].工程数学学报,2004,(24).

(责任编辑/浩　天)