Odhad variančných komponentov v modeli rastových kriviek s podmienkou

Júlia Volaufová
Ústav Merania SAV, Bratislava

1. Úvod

Model rastových kriviek je v literatúre najčastejšie uvažovaný v tvare

$$Y = PBZ + \varepsilon, \tag{1}$$

kde Y je matica pozorovaní typu $n \times m$, P, Z sú známe matice, B je matica neznámych parametrov strednej hodnoty typu $q \times k$ a ε je chybová matica, o ktorej predpokladáme:

$$E(\varepsilon) = 0, \qquad E(\text{vec}\, \varepsilon(\text{vec}\, \varepsilon)') = \sum_{i=1}^{p} \vartheta_i V_i \otimes \Sigma,$$

kde vektor $\vartheta = (\vartheta_1, \ldots, \vartheta_p)'$ je vektor neznámych variančných komponentov, matice V_i pre $i = 1, 2, \ldots, p$ a matica Σ sú známe symetrické matice príslušných rozmerov. Symbol "$\otimes$" značí Kroneckerov súčin matíc, resp. vektorov.

Predchádzajúci predpoklad o štruktúre kovariančnej matice sa dá chápať tak, že $\sum_{i=1}^{p} \vartheta_i V_i$ je kovariančnou maticou riadkov matice Y , je spoločná pre všetky riadky a matica Σ vyjadruje stochastickú väzbu medzi jednotlivými riadkami.

V geodézii a geofyzike sa uvažovaný model často vyskytuje v súvislosti s tzv. epochovými a etapovými meraniami, s čím súvisí skutočnosť, že v modeli (1) sú neznáme parametre strednej hodnoty viazané systémom lineárnych podmienok v tvare

$$DBG = F, \tag{2}$$

kde D, G a F sú známe matice príslušných dimenzií.

V súvislosti s testovaním hypotézy o kovariančnej štruktúre riadkov matice Y resp. ε sa ukazuje, že lokálne optimálne testy je možné založiť na optimálnych odhadoch variančných komponentov ϑ odvodených za platnosti nulovej hypotézy. V takomto prípade je možné nulovú hypotézu vyjadriť v tvare

$$R\vartheta = c, \tag{3}$$

kde matica R a vektor c sú dané. V ďalšom odvodíme odhady tzv. MINQUE lineárnej funkcie parametra ϑ tvaru $f'\vartheta$ so známym vektorom f za predpokladu platnosti podmienok (2) a (3).

Transformujme model (1) transformáciou "vec", ktorá vytvorí z matice vektor pozostávajúci zo stĺpcov matice umiestnených pod sebou. Takto dostaneme model, ktorý môžme označiť nasledovne

$$(\text{vec}\, Y, Z' \otimes P\, \text{vec}\, B, \sum_{i=1}^{p} \vartheta_i (V_i \otimes \Sigma)). \tag{4}$$

Pre jednoduchosť budeme používať označenie:

$$\operatorname{vec} Y = y, \quad Z' \otimes P = X, \quad \operatorname{vec} B = \beta, \quad V_i \otimes \Sigma = W_i.$$

Model (1) je teda možné uvažovať v tvare

$$(y, X\beta, \sum_{i=1}^{p} \vartheta_i W_i), \tag{5}$$

čo je vo všeobecnosti lineárny model s variančno-kovariančnými komponentami.

2. MINQUE v modeli bez podmienok

Označme $T(y)$ odhadovaciu štatistiku funkcie $f'\vartheta$. Nasledujúca definícia pripomína základné kvality odhadu $T(y)$.

Definícia 1. *V modeli (5) je štatistika $T(y)$*

1. *nevychýleným odhadom funkcie $f'\vartheta$ ak*

$$E(T(y)) = f'\vartheta \text{ pre všetky } \beta \in R^{qk}, \quad \vartheta \in \Theta \subset R^p$$

2. *invariantným odhadom, ak*

$$T(y) = T(y + X\beta) \text{ pre všetky } \beta \in R^{qk}$$

3. *kvadratickým odhadom, ak*

$$T(y) = y'Ay, \text{ kde } A \text{ je symetrická matica.}$$

Za predpokladu, že rozdelenie pravdepodobnosti vektora vec ε spĺňa jediný predpoklad o existencii konečných štvrtých momentov Rao v r. 1971 (pozri [1]) zaviedol tzv. MINQUE odhad funkcie $f'\vartheta$, pre ktorý platí, že za predpokladu normality minimalizuje varianciu odhadu lokálne v danom bode. Presnejšie MINQUE odhad popisuje nasledujúca definícia.

Definícia 2. *Nech ϑ_0 je zafixovaná hodnota parametra ϑ. MINQUE odhadom odhadnuteľnej funkcie $f'\vartheta$ nazývame kvadratický nevychýlený invariantný odhad $y'Ay$, pre ktorý platí, že euklidovská norma*

$$\|A\|^2_{W(\vartheta_0)} = \operatorname{tr} AW(\vartheta_0)AW(\vartheta_0) = \min,$$

kde $W(\vartheta_0) = \sum_{i=1}^{p} \vartheta_{0i} W_i$.

Špeciálny tvar modelu (5) sme dostali z modelu (1). Je preto prirodzené využiť špeciálnu štruktúru matíc X a W_i v odvodených odhadoch tak, aby sa využila redukcia dimenzie vo výpočte. Nasledujúca lema podáva tvar MINQUE odhadu odhadnuteľnej funkcie $f'\vartheta$ v modeli (5).

Lema 1. *Lineárna funkcia $f'\vartheta$ je MINQUE-odhadnuteľná v modeli (5) práve vtedy, keď vektor f patrí do stĺpcového priestoru matice H, kde i,j-ty prvok matice H je daný vzťahom*

$$\begin{aligned}\{H\}_{i,j} &= (n - r(P))\,\mathrm{tr}\,(W_0^{-1}V_iW_0^{-1}V_j)\\ &+ r(P)\,\mathrm{tr}\left[(W_0^{-1} - W_0^{-1}Z'(ZW_0^{-1}Z')^{-}ZW_0^{-1})\,V_i\,(W_0^{-1} - W_0^{-1}Z'(ZW_0^{-1}Z')^{-}ZW_0^{-1})\,V_j\right].\end{aligned}$$

MINQUE odhad funkcie $f'\vartheta$ v modeli rastových kriviek (1) je daný vzťahom

$$\widehat{f'\vartheta} = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i\,\mathrm{tr}\,(Y - \widehat{Y}_0)V_0^{+}V_iV_0^{+}(Y' - \widehat{Y}_0')\Sigma^{+}, \tag{6}$$

kde λ rieši systém rovníc $H\lambda = f$, kde matica $\widehat{Y}_0$ je odhadnutá matica Y v bode ϑ_0,

$$\begin{aligned}\widehat{Y}_0 &= \widehat{PBZ}\\ &= P(P'\Sigma^{+}P)^{-}P'\Sigma^{+}YV(\vartheta_0)^{-}Z'(ZV(\vartheta_0)^{-}Z')^{-}Z.\end{aligned}$$

Dôkaz pozri napr. v [6], alebo [4].

3. Systém podmienok na B tvaru $DBG = F$

V ďalších úvahách budeme vychádzať z modelu

$$\begin{pmatrix} \mathrm{vec}\,Y \\ \mathrm{vec}\,F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z' \otimes P \\ G' \otimes D \end{pmatrix} \mathrm{vec}\,B + \mathrm{vec}\,\varepsilon_*, \tag{7}$$

kde platí

$$E(\mathrm{vec}\,\varepsilon_*) = 0 \quad E(\mathrm{vec}\,\varepsilon_*(\mathrm{vec}\,\varepsilon_*)') = \sum_{i=1}^{p} \vartheta_i \begin{pmatrix} V_i \otimes \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

K tom, aby sme adekvátne využili široko rozpracovanú teóriu lineárnych modelov pre odhad variančných komponentov, t. j. parametrov druhého rádu, je predovšetkým potrebné modifikovať Raom zavedenú definíciu MINQUE odhadu. Vychádzame zo skutočnosti, že MINQUE odhad za predpokladu normality rozdelenia vektora y má lokálne minimálnu disperziu v zafixovanom bode ϑ_0.

Definícia 3. *MINQUE odhad funkcie $f'\vartheta$ v modeli (7) je nevychýlený invariantný odhad v tvare*

$$T(Y) = \mathrm{tr}\ Y'AY + \mathrm{tr}\ bY + c,$$

pre ktorý platí , že v prípade normality vektora vec Y, minimalizuje disperziu v bode ϑ_0.

Označíme

$$\underline{W}_i = \begin{pmatrix} V_i \otimes \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \underline{W}_0 = \sum_{i=1}^{p} \vartheta_{0_i} \begin{pmatrix} V_i \otimes \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

v zafixovanom bode ϑ_0.

Veta 1. *V modeli rastových kriviek (1) so systémom podmienok na parametre B tvaru (2) je MINQUE odhad odhadnuteľnej funkcie $f'\vartheta$ daný v tvare:*

$$\widehat{f'\vartheta} = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i \begin{pmatrix} \text{vec } Y \\ \text{vec } F \end{pmatrix}' (M_F \underline{W}_0 M_F)^+ \underline{W}_i (M_F \underline{W}_0 M_F)^+ \begin{pmatrix} \text{vec } Y \\ \text{vec } F \end{pmatrix},$$

kde M_F je projekcia

$$M_F = I - \begin{pmatrix} Z' \otimes P \\ G' \otimes D \end{pmatrix} (ZZ' \otimes P'P + GG' \otimes D'D)^- \begin{pmatrix} Z' \otimes P \\ G' \otimes D \end{pmatrix}'$$

a vektor λ rieši systém kriteriálnych rovníc.

Dôkaz pre všeobecný lineárny model s variančno-kovariančnými komponentami pozri v [3].

Poznámka 1. *Označme*

$$(M_F \underline{W}_0 M_F)^+ \underline{W}_i (M_F \underline{W}_0 M_F)^+ \begin{pmatrix} \text{vec } Y \\ \text{vec } F \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \\ A_2' & A_4 \end{pmatrix}.$$

Potom MINQUE odhad má tvar

$$\widehat{f'\vartheta} = (\text{vec } Y)' A_1 \text{ vec } Y + 2(\text{vec } Y)' A_2 \text{ vec } F + (\text{vec } F)' A_4 \text{ vec } F.$$

Je teda vidieť, že v odhade vystupujú okrem rýdzo kvadratického člena aj lineárny a absolútny člen, ktorý je závislý na matici F.

4. Podmienky $DBG = F$ a $R\vartheta = c$

Tak ako v predchádzajúcom oddieli budeme postupovať tak, že využijeme poznatky z lineárnej teórie. Označme:

$$\begin{aligned} T_* &= \sum_{i=1}^{p} \vartheta_{0i} \begin{pmatrix} V_i \otimes \Sigma & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} Z' \otimes P \\ G' \otimes D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z' \otimes P \\ G' \otimes D \end{pmatrix}' \\ &= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{p} \vartheta_{0i} V_i \otimes \Sigma + Z'Z \otimes PP' & Z'G \otimes PD' \\ ZZ' \otimes P'D & G'G \otimes DD' \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$X = (Z' \otimes P ; G' \otimes D)'$$

ďalej

$$M_* = I - T_*^{+1/2'} X (X' T_*^+ X)^- X' T_*^{+1/2}$$

Východiskom nech je transformovaný vektor

$$Z_* = M_* T_*^{+1/2'} \begin{pmatrix} \text{vec } Y \\ \text{vec } F \end{pmatrix}$$

Na základe vektorov vec Y, vec F, $Z_* \otimes Z_*$ a c zostrojíme lineárny model v parametri ϑ, pričom ale je potrebné zafixovať parameter ϑ_0 v kovariančnej matici vektora $Z_* \otimes Z_*$. Dostávame teda model

$$\begin{pmatrix} \text{vec } Y \\ \text{vec } F \\ Z_* \otimes Z_* \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z' \otimes P & 0 \\ G' \otimes D & 0 \\ 0 & Q_* \\ 0 & R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \vartheta \end{pmatrix} + \varepsilon_{**} \qquad (8)$$

kde matica $Q_\bullet$ vystupuje vo výraze pre

$$E(Z_\bullet \otimes Z_\bullet) = Q_\bullet \vartheta.$$

Priamym dôsledkom lineárnej teórie je nasledujúca veta.

Veta 2. *MINQUE odhadnuteľnej funkcie $f'\vartheta$ je v modeli (1) za podmienok $DBG = F$ a $R\vartheta = c$ daný ako $\widetilde{f'\vartheta} = f'\tilde{\vartheta}$, kde $\tilde{\vartheta}$ je riešením systému:*

$$\begin{aligned} Q_\bullet' Q_\bullet \vartheta + R'\nu &= q_\bullet \\ R\nu &= c \end{aligned}$$

kde ν je vektor Lagrangeových multiplikátorov, a vektor $q_\bullet$ má komponenty

$$q_{\bullet i} = \begin{pmatrix} \mathrm{vec}\, Y \\ \mathrm{vec}\, F \end{pmatrix}' (M_F W_0 M_F)^+ W_i (M_F W_0 M_F)^+ \begin{pmatrix} \mathrm{vec}\, Y \\ \mathrm{vec}\, F \end{pmatrix},$$

$$\{Q_\bullet' Q_\bullet\}_{i,j} = \mathrm{tr}\, (M_F W_0 M_F)^+ W_i (M_F W_0 M_F)^+ W_j.$$

References

[1] C.R. Rao. Estimation of variance and covariance components — MINQUE theory. *Journal of Multivariate Analysis*, 1:257–275, 1971.

[2] L.R. Verdooren. Least squares estimators and non-negative estimators of variance components. *Commun. Statist.-Theory Meth.*, 17(4):1027–1051, 1988.

[3] J. Volaufová. A brief survey on the linear methods in variance-covariance components model. In Werner Müller, editor, *Proceedings MODA-3,*, St. Petersburg, Russia, May 1992. Physica Verlag Vienna. Accepted for publication.

[4] J. Volaufová. MINQUE of variance components in replicated and multivariate linear model with linear restrictions. *QÜESTIIÓ*, Accepted for publication.

[5] J. Volaufová and V. Witkovský. Estimation of variance components in mixed linear models. *Applications of Mathematics*, 37(2):139–148, 1992.

[6] I. Žežula. *Odhady kovariančných komponentov v mnohorozmernom regresnom modeli.* Kandidátska dizertačná práca, VŠ veterinárska, Košice, MÚ SAV, Bratislava, June 1990.

[7] V. Witkovský. Testovanie lineárnej hypotézy v zmiešanom lineárnom modeli. Minimová práca, Ústav merania SAV, Bratislava, November 1991.

[8] V. Witkovský and M. Bognárová. Porovnanie dvoch testov kovariančnej štruktúry v multivariátnom modeli. In *ROBUST'92*, Herbertov, September 1992. JČSMaF.

[9] K. Zvára. *Regresní analýza. (Regression Analysis).* Academia, Prague, first edition, 1989. In czech.