UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO

Finančna matematika – 1. stopnja

Vida Maver

Normalni linearni mešani modeli

Delo diplomskega seminarja

Mentor: izred. prof. dr. Jaka Smrekar

Ljubljana, 2018

Kazalo

Slike

Tabele

Normalni linearni mešani modeli

POVZETEK

Normalni linearni mešani modeli so modeli oblike $Y = X\beta + Z\alpha + \epsilon$ in zajemajo tako fiksne učinke β, kot tudi slučajne učinke α. Pomembni predpostavki v teh modelih sta predpostavka normalne porazdeljenosti vektorja slučajnih učinkov $\alpha \sim N(0, \sigma^2 I_n)$ in vektorja slučajnih odstopanj $\epsilon \sim N(0, \tau^2 I_m)$, ki nista nujno enakih razsežnosti ter predpostavka neodvisnosti slučajnih vektorjev α in ϵ. Variančne komponente v modelih, obravnavanih v diplomskem delu, se lahko ocenjuje po običajni in restringirani metodi največjega verjetja, med drugim pa tudi z uporabo metode iterativnega uteženega povprečja najmanjših kvadratov, z metodo analize varianc in z metodo kvadratičnega nepristranskega ocenjevanja minimalnih norm. V normalnih linearnih mešanih modelih se da konstrurati več različnih tipov intervalov zaupanja, med drugim eksaktne intervale zaupanja za variančne komponente in intervale zaupanja za fiksne učinke.

Gaussian Linear Mixed Models

ABSTRACT

Gaussian linear mixed models can be expressed as $Y = X\beta + Z\alpha + \epsilon$, where vector β represents fixed effects and vector α represents random effects. There are two important assumptions in these models. The first is the assumption that both, random effects α and errors ϵ are normally distributed, the former with mean zero and variance σ^2 and the latter with mean zero and variance τ^2. The second important assumption is that random effects and errors are assumed to be independent. Variance components in Gaussian linear mixed models can be estimated with maximum likelihood method or with restricted maximum likelihood method. Variance components can also be estimated with iterative weighted least squares method, analysis of variance, or minimum norm quadratic unbiased estimation. Confidence intervals in Gaussian linear mixed models include exact confidence intervals for variance components and confidence intervals for fixed effects, among others.

Math. Subj. Class. (2010): 62J05, 62J10, 62J99, 62F03, 62F05, 62F10, 62H12, 62H15

Ključne besede: Normalni linearni mešani modeli, fiksni in slučajni učinki, ocenjevanje, ANOVA, metoda največjega verjetja, restringirana metoda največjega verjetja, testi po metodi razmerja verjetij, intervali zaupanja.

Keywords: Gaussian linear mixed models, fixed and random effects, estimation, ANOVA, Maximum Likelihood method, Restricted Maximum Likelihood method, Likelihood-ratio tests, Confidence Intervals.

Zahvala

Najprej se iskreno zahvaljujem svojemu mentorju, izred. prof. dr. Jaki Smrekarju, za pomoč, strokovnost in dragocene nasvete pri nastajanju dela diplomskega seminarja.

Posebna zahvala gre mojim staršem in sestrici, ki so mi vsa leta šolanja stali ob strani, me spodbujali in niso izgubili upanja vame. Rada bi se zahvalila tudi fantu, da mi je ob težkih trenutkih stal ob strani ter za vso moralno podporo.

1. Uvod

Linearni mešani modeli so modeli, kjer je proučevana slučajna spremenljivka linearno odvisna od učinkov. Gre za nadgradnjo splošnih linearnih modelov, saj mešani modeli zajemajo tako fiksne, kot tudi slučajne učinke. V splošnem je linearni mešani model oblike $Y = X\beta + Z\alpha + \epsilon$, kjer je Y proučevani slučajni vektor, X matrika znanih konstant, β vektor neznanih regresijskih koeficientov (fiksni učinki), Z znana matrika, α vektor slučajnih učinkov in ϵ vektor slučajnih odstopanj.

Znanih je več različnih tipov linearnih mešanih modelov. Normalni ali Gaussovi linearni mešani modeli so modeli, v katerih je narejena predpostavka, da sta slučajna vektorja α in ϵ, ki predstavljata slučajne učinke in slučajna odstopanja, normalno porazdeljena, $\alpha \sim N(0, \sigma^2 I_n)$ in $\epsilon \sim N(0, \tau^2 I_m)$. Druga pomembna predpostavka pa je predpostavka o neodvisnosti slučajnih vektorjev α in ϵ.

Prednost uporabe obravnavanih modelov je, da so bolj fleksibilni za modeliranje. Normalni linearni mešani modeli so uporabni na mnogo različnih področjih. V upoštev za modeliranje pridejo, kadar so meritve na testnih subjektih opravljene večkrat skozi neko časovno obdobje. Tipičen primer uporabe je področje zdravstva, kjer je na več posameznikih narejenih več meritev skozi čas. Obravnavani modeli so uporabni tudi na področju izobraževanja (rezultati posameznih študentov na izpitih so lahko med seboj odvisni - predvsem, če so časi meritev precej blizu) in na področju financ (na primer v modelih za vrednotenje delnic, kjer je v različnih obdobjih opravljenih več meritev).

Prvi, ki je začel uporabljati modele slučajnih učinkov, je bil Ronald Fisher. Zanimala ga je korelacija med lastnostmi posameznikov, ki so si med seboj v sorodu. Charles Roy Henderson je v 50-ih letih prejšnjega stoletja prvi predstavil najboljšo linearno nepristansko cenilko (BLUE) za fiksne učinke modela ([7] Wikipedia). Prav tako je Henderson tudi začetnik uporabe ocenjevanja po metodi ANOVA, metodo MINQUE pa je razvil C. R. Rao ([1] Jiang, 2007, str. 25). Teste po metodi razmerja verjetij za linearne mešane modele pa sta kot prva teoretično podrobneje razdelala Hartley in Rao ([1] Jiang, 2007, str. 55).

V prvem poglavju diplomskega seminarja je opisano, od kod prihaja motivacija za uporabo linearnih mešanih modelov. V naslednjem poglavju so opisani linearni mešani modeli v splošnem, nato pa so v treh podrazdelkih podrobneje predstavljeni trije tipi normalnih linearnih mešanih modelov - model ANOVA, longitudinalni in marginalni model. V nadaljevanju je predstavljeno ocenjevanje v normalnih linearnih mešanih modelih - običajna in restringirana metoda največjega verjetja ter iterativno uteženo povprečje najmanjših kvadratov. V poglavju ocenjevanja v obravnavanih modelih sta opisani še metoda ocenjevanja ANOVA in metoda kvadratičnega nepristranskega ocenjevanja minimalnih norm. V predzadnjem poglavju diplomskega seminarja je opisano, kako v normalnih linearnih mešanih modelih izgledajo testi po metodi največjega verjetja. V zadnjem razdelku pa so predstavljeni še intervali zaupanja v teh modelih in sicer eksaktni intervali zaupanja za variančne komponente ter intervali zaupanja za fiksne učinke.

2. Uvod v linearne mešane modele

V začetnem razdelku dela diplomskega seminarja je opisano, od kod prihaja motivacija za uporabo linearnih mešanih modelov, kako jih matematično zapišemo in nekaj izpeljanih lastnosti.

Linearni mešani model je poseben primer splošnega linearnega modela, kjer se predpostavi linearna povezava med pojasnjevalnimi slučajnimi spremenljivkami in ocenjevanimi parametri. Za lažje razumevanje linearnih mešanih modelov se je dobro spomniti modela linearne regresije. Slednjega se opiše kot

$$Y = X\beta + \epsilon,$$

kjer je Y proučevani vektor, X matrika znanih konstant, β vektor neznanih regresijskih parametrov, ϵ pa vektor, ki meri slučajna odstopanja od linearne zveze. Za vzorec velikosti n se meritev i-tega posameznika, $1 \leq i \leq n$, modelira na naslednji način:

$$Y_i = \beta_0 + x_{i_1}\beta_1 + \dots x_{i_p}\beta_p + \epsilon_i,$$

kjer so $\epsilon_i \sim N(0, \tau^2)$ neodvisne in enako porazdeljene slučajne spremenljivke ([1] Jiang, 2007, str. 1).

V tem modelu velja predpostavka, da so neznani regresijski parametri $\beta_i, i = 1, \dots, n$ fiksni, vendar pa hitro lahko pride do primerov, kjer je smiselno predpostaviti, da so nekateri od parametrov tudi slučajni. Do takšnih primerov pride, ko so posamezne meritve med seboj korelirane. Tipična primera sta iz področja medicine, kjer se pogosto na posameznikih skozi čas izvaja več meritev, posamezne meritve na vsakem posamezniku pa so med seboj korelirane, in iz področja izobraževanja, kjer so zelo verjetno rezultati testov posameznika medsebojno korelirani ([1] Jiang, 2007, str. 1).

Kot že omenjeno, so linearni mešani modeli koristni za modeliranje korelacij med meritvami na posameznikih. Zaradi lažje predstave je formulacija modela prikazana s pomočjo primera s področja medicine. Denimo, da je z vsakim posameznikom povezan nek slučajni učinek, katerega vrednosti se ne da opazovati. Naj bo Y_{ij} meritev za i-tega posameznika v času t_j in α_i slučajni učinek povezan z i-tim posameznikom, teh naj bo n. Za poenostavitev naj bodo meritve na vseh posameznikih merjene ob istih časovnih trenutkih, $t_1, \dots, t_m$. V tem primeru se lahko linearni mešani model zapiše kot

$$Y_{ij} = \beta_0 + x_{ij,1}\beta_1 + \dots x_{ij,p}\beta_p + \alpha_i + \epsilon_{ij},$$

$i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, m$, kjer je β vektor neznanih regresijskih koeficientov. $\alpha_i \sim N(0, \sigma^2)$, $i = 1, \dots, n$, so neodvisne in enako porazdeljene slučajne spremenljivke, $\epsilon_{ij} \sim N(0, \tau^2)$, $i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, m$ pa prav tako neodvisne in enako porazdeljene slučajne spremenljivke, pri čemer sta slučajni spremenljivki α_i, $i = 1, \dots, n$ in ϵ_{ij}, $i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, m$ neodvisni. Slučajna spremenljivka α_i je odvisna samo od i-tega posameznika, izkaže pa se, da meritve na vsakem posamezniku niso neodvisne in so med seboj korelirane ([1] Jiang, 2007, str. 1). To se vidi iz naslednjega izračuna, kjer za $j \neq k$ velja

$$\begin{gathered}\mathrm{Cov}(Y_{ij}, Y_{ik}) = E((Y_{ij} - E(Y_{ij}))(Y_{ik} - E(Y_{ik}))) = \\ = E((\beta_0 + x_{ij,1}\beta_1 + \ldots x_{ij,p}\beta_p + \alpha_i + \epsilon_{ij} - (\beta_0 + x_{ik,1}\beta_1 + \ldots x_{ik,p}\beta_p))(\epsilon_{ik} + \alpha_i) = \\ = E((\epsilon_{ij} + \alpha_i)(\epsilon_{ik} + \alpha_i)) = E(\alpha_i^2) = \sigma^2 \neq 0.\end{gathered}$$

V izračunu zgoraj se uporabi dejstva, da sta slučajni spremenljivki α_i, $i = 1, \ldots, n$ in ϵ_{ij}, $i = 1, \ldots, n, j = 1, \ldots, m$ neodvisni, $E(\epsilon_{ij}) = E(\alpha_i) = 0$ in $E(c) = c$, za $c =$ konst. Sledi še, da je korelacijski koeficient med katerimakoli različnima meritvama na vsakem posamezniku enak

$$\frac{\sigma^2}{\sigma^2 + \tau^2}.$$

Varianco j-te meritve na i-tem posamezniku izračunamo na sledeč način:

$$\begin{gathered}\mathrm{Var}(Y_{ij}) = E((Y_{ij} - E(Y_{ij}))^2) = E((\epsilon_{ij} + \alpha_i)^2) = E(\epsilon_{ij}^2) + 2E(\epsilon_{ij}\alpha_i) + E(\alpha_i^2) = \\ = \tau^2 + 2E(\epsilon_{ij})E(\alpha_i) + \sigma^2 = \sigma^2 + \tau^2.\end{gathered}$$

V izpeljavi se uporabi dejstva kot v prejšnjem izračunu in aditivnost matematičnega upanja.

Ko vstavimo vse potrebno v enačbo za korelacijski koeficient,

$$\rho(Y_{ij}, Y_{ik}) = \frac{\mathrm{Cov}(Y_{ij}, Y_{ik})}{\sqrt{\mathrm{Var}(Y_{ij})\mathrm{Var}(Y_{ik})}},$$

rezultat sledi. Dodatno, velja tudi, da so meritve med posamezniki med seboj nekorelirane. Za $i \neq l$ je:

$$\mathrm{Cov}(Y_{ij}, Y_{lk}) = E((Y_{ij} - E(Y_{ij}))(Y_{lk} - E(Y_{lk})) = 0 \Rightarrow \rho(Y_{ij}, Y_{lk}) = 0$$

([1] Jiang, 2007, str. 1).

3. Linearni mešani modeli v splošnem

Model opisan v prejšnjem razdelku je bil enostaven primer linearnega mešanega modela. Za nadaljnje delo pa je potreben bogatejši razred modelov, zato so v tem razdelku linearni mešani modeli opisani v bolj splošnem smislu.

V splošnem se linearni mešani model zapiše kot

$$Y = X\beta + Z\alpha + \epsilon, \tag{1}$$

kjer je Y proučevani slučajni vektor, X matrika znanih konstant, β vektor neznanih regresijskih koeficientov, ki predstavlja fiksne učinke, Z znana matrika, α vektor slučajnih učinkov in ϵ vektor slučajnih odstopanj. Osnovni predpostavki v (1) sta:

- α in ϵ sta normalno porazdeljena, ne nujno enako razsežna slučajna vektorja, z ničelnim matematičnim upanjem in končnima variancama, $\alpha \sim N(0, \sigma^2 I_n)$ in $\epsilon \sim N(0, \tau^2 I_m)$,
- α in ϵ sta neodvisna slučajna vektorja.

V primerjavi z linearnim regresijskim modelom je razlika v členu $Z\alpha$, ki lahko zavzame veliko različnih oblik in s tem da bogat razred modelov ([1] Jiang, 2007, str. 2).

4. Normalni linearni mešani modeli

Poznamo več tipov linearnih mešanih modelov in različne načine njihove klasifikacije. Če je narejena predpostavka normalne porazdeljenosti slučajnih učinkov in slučajnih odstopanj, se tem modelom reče Gaussovi oziroma normalni linearni mešani modeli. V tem poglavju so opisani trije tipi normalnih linearnih mešanih modelov - model ANOVA za enosmerni in dvosmerni model slučajnih učinkov, longitudinalni model in marginalni model.

Kot že omenjeno, je v Gaussovih linearnih mešanih modelih narejena predpostavka, da sta slučajna vektorja α, ki predstavlja slučajne učinke in ϵ, ki predstavlja slučajna odstopanja, normalno porazdeljena. Najbolj znani trije tipi normalnih linearnih mešanih modelov so

- Model ANOVA
- Longitudinalni model
- Marginalni model

V nadaljevanju bo vsak od naštetih modelov bolj podrobno opisan.

4.1. **Model ANOVA.** V prvem podpoglavju Gaussovih linearnih mešanih modelov je opisana ideja testov ANOVA, model enosmernih slučajnih učinkov, model dvosmernih slučajnih učinkov ter model ANOVA v splošnem. V splošnem gre v modelih ANOVA (*ang. Analysis of variance*), kot pove že samo ime, za analizo varianc. Takega tipa so bili že zgodnji Gaussovi modeli ([1] Jiang, 2007, str. 4).

4.1.1. *Test ANOVA.* Z ANOVA testom se preverja, če so rezultati slučajnega eksperimenta ali raziskave statistično značilni (torej ali se zavrne ničelna hipoteza in sprejme alternativa). S testiranjem različnih skupin se želi ugotoviti, ali prihaja do statistično značilnih razlik med njimi, na primer, ali je katera izmed treh različnih terapij (pogovor, meditacija, alternativna medicina), pri bolnikih s psihičnimi težavi boljša od drugih dveh ([3]). Najbolj znana sta naslednja dva tipa testov ANOVA:

- Enosmerna ANOVA. Enosmerno ANOVO se uporabi za testiranje, ali so skupine statistično značilno različne. Test primerja matematična upanja neodvisnih skupin, uporabi pa F-porazdelitev (ničelna hipoteza testa je, da sta matematični upanji enaki). Kot primer si lahko zamislimo, da bi radi nutricionisti testirali učinke pitja čaja na izgubo teže. Skupino posameznikov se slučajno razporedi v manjše skupine, kjer v eni pijejo na primer zeleni čaj, v drugi črni čaj, v zadnji skupini pa čaja ne pijejo. Slabost enosmernega ANOVA testa je, da pove, da se vsaj dve skupini statistično značilno razlikujeta, ne pove pa, kateri dve.

- Dvosmerna ANOVA. Dvosmerna ANOVA je razširjena enosmerna ANOVA. Pri enosmerni ANOVI na odvisno slučajno spremenljivko vpliva le ena neodvisna spremenljivka, v dvosmerni ANOVI pa sta neodvisni spremenljivki dve. Dvosmerna ANOVA je primerna, če ima odvisna slučajna spremenljivka, ki nas zanima, kvantitativne vrednosti in če sta prisotni dve kategorični pojasnjevalni spremenljivki. Primer dvosmerne ANOVE je, če nas zanima, ali dohodek in spol osebe vplivata na višino stresa ob razgovoru za službo. V tem primeru se meri višino stresa, spol in dohodek pa sta kategorični spremenljivki. Dohodek lahko, na primer, razdelimo v tri različne skupine - nižji, srednji in visoki dohodek, zato predstavlja kategorično spremenjivko ([3]).

4.1.2. *Enosmerni model slučajnih učinkov.* Kot že omenjeno, je pri enosmerni ANOVI prisotnih več skupin, pri katerih se na primer testira različne tipe zdravljenja. Testira se hipotezo, ali so matematična upanja v vseh testiranih skupinah, na katerih se določeno zdravljenje izvaja, enaka.

Meritve Y_{ij}, $i = 1, \dots n$, $j = 1, \dots, m_i$ (na posameznikih je dopuščeno različno število meritev) modeliramo z enačbo

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \epsilon_{ij}, \tag{2}$$

za vse i in j, kjer je μ neznano matematično upanje. V tem modelu je edini fiksni učinek neznano matematično upanje. Slučajna spremenljivka α_i, $i = 1, \dots, n$, predstavlja slučajne učinke, ki so med seboj neodvisni in porazdeljeni normalno $N(0, \sigma^2)$, ϵ_{ij} pa predstavlja slučajne napake, ki so med seboj neodvisne in porazdeljene normalno kot $N(0, \tau^2)$. Kot že omenjeno, privzamemo tudi predpostavko neodvisnosti slučajnih spremenljivk α_i in ϵ_{ij} za vse i in j ([1] Jiang, 2007, str. 4).

Model se predstavi kot v (1) na sledeč način. Naj bo $Y_i = (Y_{ij})_{1 \le j \le m_i}$ stolpec meritev in podobno $\epsilon_i = (\epsilon_{ij})_{1 \le j \le m_i}$ stolpec slučajnih odstopanj na i-tem posamezniku. Y_i' predstavlja transponiran stolpec, torej vrstico meritev na i-tem posamezniku, zato se stolpec vseh meritev skupaj zapiše kot $Y = (Y_1', \dots, Y_n')'$, oziroma

$$Y = \begin{bmatrix} Y_{11} \\ \vdots \\ Y_{1m_1} \\ Y_{21} \\ \vdots \\ Y_{2m_2} \\ \vdots \\ Y_{n1} \\ \vdots \\ Y_{nm_n} \end{bmatrix}.$$

Podobno je stolpec vseh slučajnih odstopanj oblike $\epsilon = (\epsilon_1', \dots, \epsilon_n')'$. Nadalje, naj bo $\alpha = (\alpha_i)_{1 \le i \le n}$ stolpec slučajnih učinkov in 1_m stolpec m enic. Model se lahko zapiše kot v (1), če velja:

$$\beta = \mu, \ X = 1_m, \ Z = \begin{bmatrix} 1_{m_1} & & & \\ & 1_{m_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1_{m_n} \end{bmatrix},$$

kjer je $\alpha \sim N(0, \sigma^2 I_n)$, $\epsilon \sim N(0, \tau^2 I_m)$ in $m = \sum_{i=1}^{n} m_i$ ([1] Jiang, 2007, str. 5).

Če je $m_i = \tilde{m}$ za vse i, je na vsakem posamezniku narejenih enako število meritev in gre za tako imenovani uravnotežen primer. V tem primeru pa se lahko model enosmernih slučajnih učinkov predstavi v obliki (1) s pomočjo Kroneckerjevih produktov. Kroneckerjev produkt je operacija, ki se izvaja na dveh matrikah poljubne velikosti in vrne bločno matriko ([1] Jiang, 2007, str. 5).

Trditev 4.1 (Kroneckerjev produkt)**.** *Naj bo $A = (a_{ij})_{1\leq i\leq n, 1\leq j\leq m}$ matrika. Potem je za poljubno matriko B, Kroneckerjev produkt $A \otimes B$, definiran kot bločna matrika $(a_{ij}B)_{1\leq i\leq n, 1\leq j\leq m}$.*

Primer: če je $A = I_m$ in $B = 1_n$, je $A \otimes B = \mathrm{diag}(1_n, \ldots, 1_n)$ ([1] Jiang, 2007, str. 233).

V uravnoteženem primeru se model enosmernih slučajnih učinkov prikaže v obliki (1) z $X = 1_n \otimes 1_{\tilde{m}} = 1_{n\tilde{m}}$ in $Z = I_n \otimes 1_{\tilde{m}}$ in vse ostalo kot v neuravnoteženem primeru ([1] Jiang, 2007, str. 5).

4.1.3. *Dvosmerni model slučajnih učinkov.* Za poenostavitve je model dvosmernih slučajnih učinkov prikazan na uravnoteženem primeru, torej $m_i = \tilde{m}$ za vse i. V tem primeru meritve Y_{ij}, $i = 1, \ldots n$, $j = 1, \ldots, \tilde{m}$, modeliramo z enačbo

$$Y_{ij} = \mu + \xi_i + \eta_j + \epsilon_{ij} \tag{3}$$

za vse i, j, kjer je μ kot v enosmernem modelu slučajnih učinkov neznano matematično upanje. Slučajni spremenljivki ξ_i, $i = 1, \ldots, n$ in $\eta_j, j = 1, \ldots, \tilde{m}$ predstavljata slučajne učinke in sta neodvisni ter porazdeljeni $\xi_i \sim N(0, \sigma_1^2)$, $\eta_j \sim N(0, \sigma_2^2)$. Slučajna spremenljivka ϵ_{ij} pa kot prej predstavlja neodvisna slučajna odstopanja in je porazdeljena kot $N(0, \tau^2)$. Ponovno privzamemo predpostavko, da so slučajni učinki in slučajna odstopanja med seboj neodvisni ([1] Jiang, 2007, str. 5).

Model se lahko v obliki (1) predstavi podobno kot v modelu enosmernih slučajnih učinkov na sledeč način:

$Y_i = (Y_{ij})_{1\leq j\leq \tilde{m}}$, $\epsilon_i = (\epsilon_{ij})_{1\leq j\leq \tilde{m}}$, $Y = (Y_1', \ldots, Y_n')'$, $\epsilon = (\epsilon_1', \ldots, \epsilon_n')'$, $\beta = \mu$, $X = 1_m$ in:

$$\alpha = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \xi_i \\ \vdots \\ \xi_n \\ \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_{\tilde{m}} \end{bmatrix}, \ Z = \underbrace{\begin{bmatrix} 1_{\tilde{m}} & & & \mathrm{I}_{\tilde{m}} \\ & 1_{\tilde{m}} & & \mathrm{I}_{\tilde{m}} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & 1_{\tilde{m}} & \mathrm{I}_{\tilde{m}} \end{bmatrix}}_{n+\tilde{m}}, \text{ oziroma } Z = \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ \vdots \\ Z_n \end{bmatrix},$$

$$\text{kjer je } Z_i = \begin{bmatrix} 0 & \ldots & 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \ldots & 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \end{bmatrix},$$

ki je dimenzije $\tilde{m} \times (n + \tilde{m})$. Velja še, da je $\epsilon \sim N(0, \tau^2 I_m)$, kjer je $m = \sum_{i=1}^{n} m_i = n\tilde{m}$ ([1] Jiang, 2007, str. 5).

4.1.4. *Splošni model ANOVA.* Splošni ANOVA model je definiran kot model v (1), kjer je

$$Z\alpha = Z_1\alpha_1 + \ldots + Z_s\alpha_s, \tag{4}$$

pri čemer so $Z_1, \ldots, Z_s$ znane matrike, $\alpha_1, \ldots, \alpha_s$ pa vektorji slučajnih učinkov. Za vsak k, $1 \leq k \leq s$, je vektor α_k oblike $\begin{bmatrix} \alpha_{k1} \\ \vdots \\ \alpha_{kQ} \end{bmatrix}$, porazdeljen normalno $N(0, \sigma_k^2 \mathrm{I}_Q)$, kjer Q predstavlja razsežnost tega vektorja. Velja, da so komponente vektorja α_k neodvisne in porazdeljene kot $N(0, \sigma_k^2)$. Prav tako velja predpostavka, da so komponente vektorja ϵ neodvisne in enako porazdeljene $N(0, \tau^2)$ ter da so slučajni vektorji $\alpha_1, \ldots, \alpha_s$ in ϵ neodvisni. Običajen nabor variančnih komponent v ANOVA modelih je $\tau^2, \sigma_1^2, \ldots, \sigma_s^2$, čemur se reče originalna oblika. Alternativno pa se lahko variančne komponente zapiše v Harley-Rao obliki, kjer je zapis variančnih komponent oblike $\lambda = \tau^2, \gamma_1 = \sigma_1^2/\tau^2, \ldots, \sigma_s^2/\tau^2$ ([1] Jiang, 2007, str. 5).

4.2. **Longitudinalni model.** V drugem podrazdelku je opisan drugi tip Gaussovih linearnih mešanih modelov in sicer longitudinalni model. Najprej je opisano, kako se ga zapiše v splošnem in kako v matrični obliki ter na koncu razdelka še primer krivulje rasti.

Longitudinalne modele se uporablja na podatkih, ki vsebujejo meritve za skupino posameznikov, kjer je na vsakem osebku meritev izvedena v več časovnih trenutkih. Analiziranje s pomočjo longitudinalnih modelov je uporabno na več področjih. V gospodarstvu so na primer primerni za analizo značilnosti podjetij, plač, v zdravstvu za testiranje značilnosti skupine bolnikov, ki se jih spremlja skozi čas, veliko pa so uporabljeni tudi na področju psihologije ([2] Tang, 2011, str. 1).

Kot pove že samo ime, se longitudinalni model največkrat uporablja v analizah longitudinalnih podatkov. Značilnost tega modela je, da se lahko meritve razdeli v neodvisne skupine z enim slučajnim učinkom (ali vektorjem slučajnih učinkov), v praksi pa te skupine ustrezajo različnim posameznikom, vključenim v longitudinalno študijo. Lahko se pojavijo tudi razlike med meritvami znotraj ene enote in takrat ima vektor slučajnih odstopanj ϵ_i komponente $\zeta_{ij} + \epsilon_{ij}$, $j = 1, \ldots, \tilde{m}$, kjer je ζ_{ij} odvisna od posameznika in pojasni morebitne korelacije med meritvami znotraj ene enote, ϵ_{ij} pa predstavlja slučajno napako merilca ali meritve ([1] Jiang, 2007, str. 6).

V splošnem je longitudinalni model naslednje oblike:

$$Y_i = X_i\beta + Z_i\alpha_i + \epsilon_i, \; i = 1, \ldots, n, \tag{5}$$

kjer je Y_i vektor meritev na i-tem posamezniku, X_i in Z_i pa znani matriki. Število stolpcev matrike Z_i predstavlja razsežnost slučajnega vektorja α_i, število vrstic pa je enako številu meritev na posamezniku i. Parameter β je vektor neznanih regresijskih koeficientov (predstavlja fiksne učinke), α_i vektor slučajnih učinkov in ϵ_i vektor slučajnih odstopanj. Ponovno predpostavimo, da sta α_i in ϵ_i, $i = 1, \ldots, n$ neodvisna in porazdeljena $\alpha_i \sim N(0, G_i)$, $\epsilon_i \sim N(0, R_i)$, kjer je $G_i = \mathrm{Var}(\alpha_i)$ in $R_i = \mathrm{Var}(\epsilon_i)$. Če razlik med meritvami znotraj ene enote ni, je variančno-kovariančna matrika

$\mathrm{Var}(\epsilon_i) = R_i$ diagonalna ([1] Jiang, 2007, str. 6).

Zapis longitudinalnega modela v matrični obliki:

$$\begin{bmatrix} Y_{i1} \\ \vdots \\ Y_{im_i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_{i1,1} & \cdots & x_{i1,p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{im_i,1} & \cdots & x_{im_i,p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \vdots \\ \beta_p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} z_{i1,1} & \cdots & z_{i1,Q} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ z_{im_i,1} & \cdots & z_{im_i,Q} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{i1} \\ \vdots \\ \alpha_{iQ} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_{i1} \\ \vdots \\ \epsilon_{im_i} \end{bmatrix}$$

([2] Tang, 2011, str. 6).

V splošnem je θ vektor matrik $R_i \in \mathbb{R}^{m_i \times m_i}$ in $G_i \in \mathbb{R}^{Q \times Q}$. Naj bo q število prostostnih stopenj vektorja θ. V posebnem primeru, če je $R_i = \tau_i^2 \mathrm{I}_{m_i}$ in $G_i = \sigma_i^2 I_Q$, je $q = 2n$. Če pa je $R_i = \tau^2 \mathrm{I}_{m_i}, \forall i \in \{1, \ldots, n\}$, je $q = n + 1$. Longitudinalni model je poseben primer splošnega linearnega mešanega modela kot v (1), z $Y = (Y_1', \cdots, Y_n')'$, kjer je $Y_i = (Y_{ij})_{1 \le j \le m_i}$, $X = (X_i)_{1 \le i \le n}$, $Z = \mathrm{diag}(Z_1, \ldots, Z_n)$, $\alpha = (\alpha_i)_{1 \le i \le n}$ in $\epsilon = (\epsilon_1', \ldots, \epsilon_n')'$, kjer je $\epsilon_i = (\epsilon_{ij})_{1 \le j \le \tilde{m}}$. Pripomnimo, da zapis $X = (X_i)_{1 \le i \le n}$ pomeni, da so matrike $X_1, \ldots, X_n$ naložene ena vrh druge ([1] Jiang, 2007, str. 7).

Primer (2) je enostaven primer longitudinalnega modela, kjer ζ_{ij} ne nastopa. V tem primeru predpostavimo, da razlik med meritvami znotraj ene enote ni. Bolj kompleksen model je model krivulje rasti, predstavljen v nadaljevanju.

4.2.1. *Model krivulje rasti.* Zaradi poenostavitve naj bodo meritve na posameznikih izvedene v časovnih trenutkih $t_1, \ldots, t_{\tilde{m}}$ za vsakega od n posameznikov, torej gre za uravnotežen primer ($m_i = \tilde{m}$, $\forall i$). Naj bo Y_{ij} meritev na i-tem posamezniku, pridobljena v času t_j, ki zadošča enačbi

$$Y_{ij} = \xi_i + \eta_i x_{ij} + \zeta_{ij} + \epsilon_{ij}.$$

Tu ξ_i predstavlja slučajni odsek na ordinatni osi, η_i slučajni naklonski koeficient, x_{ij} pa je znana konstanta. V tem modelu velja, da sta za vsak i slučajni spremenljivki ξ_i in η_i normalno porazdeljeni, z upanjema μ_1 in μ_2 ter variancama σ_1^2 in σ_2^2, $\xi_i \sim N(\mu_1, \sigma_1^2)$, $\eta_i \sim N(\mu_2, \sigma_2^2), \forall i \in \{1, \ldots, n\}$. Vektor ϵ_i kot v splošnem longitudinalnem modelu (5), ima v tem modelu komponente $\zeta_{ij} + \epsilon_{ij}$, $j = 1, \ldots, \tilde{m}$. Kot že omenjeno v uvodnem delu tega podrazdelka, je ζ_{ij} odvisna od posameznika in pojasni korelacije med meritvami znotraj ene enote, ϵ_{ij} pa predstavlja slučajno napako merilca ali meritve ([1] Jiang, 2007, str. 6).

Zapis modela krivulje rasti v obliki (5):

$$\beta = \begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix}, \ \begin{bmatrix} \xi_i \\ \eta_i \end{bmatrix} \sim N(\begin{bmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_2^2 \end{bmatrix}), \ \alpha_i = \begin{bmatrix} \xi_i - \mu_1 \\ \eta_i - \mu_2 \end{bmatrix}, \ Z_i = \begin{bmatrix} 1 & x_{i1} \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_{i\tilde{m}} \end{bmatrix} = X_i.$$

4.3. **Marginalni model.** V tem podrazdelku je opisan še zadnji izmed navedenih tipov Gaussovih linearnih mešanih modelov - marginalni model. Alternativno se lahko Gaussov linearni mešani model predstavi z njegovo marginalno porazdelitvijo.

Upoštevajoč (1) in predpostavko normalnosti, je porazdelitev Y oblike

$$Y \sim N(X\beta, V), \text{ kjer je } V = R + ZGZ'. \tag{6}$$

Linearni mešani model se lahko brez uporabe (1) definira z (6):

- Splošni model ANOVA se lahko v obliki (6) zapiše z $V = \tau^2 I_m + \sum_{k=1}^{s} \sigma_k^2 Z_k Z_k'$, kjer je m velikost vzorca (t.j. dimenzija Y), τ^2 pa predstavljajo variance ϵ_i. Tu je predpostavljena originalna oblika modela ANOVA, kar pomeni, da so variance τ^2 enake za vsako enoto in znotraj enot (torej enake za vsak čas in vsakega posameznika).

- V longitudinalnem modelu velja $Y_i \sim N(X_i\beta, V_i)$, tu je $V_i = R_i + Z_i G_i Z_i'$, $\forall i \in \{1, \ldots, n\}$, kjer so $Y_1, \ldots, Y_n$ neodvisni slučajni vektorji.

  V_i se izpelje na naslednji način:

$$\mathrm{Var}(Y_i) = \mathrm{Var}(Z_i\alpha_i + \epsilon_i) \overset{\text{neodvisnost } Z_i\alpha_i \text{ in } \epsilon_i}{=} \mathrm{Var}(Z_i\alpha_i) + \mathrm{Var}(\epsilon_i) = Z_i G_i Z_i' + R_i.$$

  Model se lahko izrazi v obliki (6) z $R = \mathrm{diag}(R_1, \ldots, R_n)$, $G = \mathrm{diag}(G_1, \ldots, G_n)$ ter X in Z definirani kot v (5): $X = (X_1', \ldots, X_n')'$, $Z = \mathrm{diag}(Z_1, \ldots, Z_n)$. Pogojno na slučajni učinek α_i ima Y_i normalno porazdelitev z upanjem $X_i\beta + Z_i\alpha_i$ in variančno-kovariančno matriko R_i ([1] Jiang, 2007, str. 7).

5. Ocenjevanje v normalnih linearnih mešanih modelih

V tem poglavju diplomskega dela je podrobneje razdelanih več metod namenjenih ocenjevanju parametrov v normalnih linearnih mešanih modelih. Standardni metodi za ocenjevanje v normalnih mešanih modelih sta metoda največjega verjetja (MNV) in tako imenovana restringirana metoda največjega verjetja (RMNV). Pri obeh metodah ločimo dva načina in sicer točkovno ocenjevanje (za majhen vzorec) in ocenjevanje z asimptotično kovariančno matriko (za velik vzorec). Najprej je opisana metoda največjega verjetja, nato pa še restringirana metoda največjega verjetja. Obe sta opisani za primer točkovnega ocenjevanja. V nadaljevanju je opisana še metoda iterativnega uteženega povprečja najmanjših kvadratov, katero se lahko uporablja tudi v modelih, ki niso Gaussovi. Poznamo tudi druge metode pridobivanja cenilk, med temi sta ANOVA ocenjevanje (pridobivanje cenilk s pomočjo analize varianc) in kvadratično nepristransko ocenjevanje minimalnih norm (MINQUE), ki pa sta opisani v končnem delu poglavja o ocenjevanju v normalnih linearnih mešanih modelih. V tem poglavju kot zadnje sledi še podrazdelek s primerom v programu R, kjer je na modelu z vključenimi slučajnimi učinki prikazana običajna in restringirana metoda največjega verjetja, metoda I-MINQUE, interval zaupanja za variančne komponente in uporaba funkcije `anova` za testiranje statistične značilnosti fiksnih učinkov.

5.1. **Metoda največjega verjetja - MNV.** V tem podpoglavju je opisana metoda največjega verjetja za točkovno ocenjevanje, ki se uporablja za majhne vzorce. Pojasnjeno in izpeljano je, kako po tej metodi pridobimo cenilke za variančne komponente. Na koncu podrazdelka je opisan še problem cenilk, dobljenih po tej metodi. Metoda največjega verjetja je bila poznana že mnogo let nazaj, vendar pa dolgo časa sploh ni bila uporabljena v analizi mešanih modelov, ker gre za metodo, ki je računalniško precej intenzivna ([1] Jiang, 2007, str. 9).

5.1.1. *Točkovno ocenjevanje.* V normalnih mešanih modelih je porazdelitev Y dana kot v marginalnem modelu (6) z zvezno porazdelitveno gostoto

$$f_Y(y) = \frac{1}{(2\pi)^{m/2}|V|^{1/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(y - X\beta)'V^{-1}(y - X\beta)\right\},$$

kjer je m dimenzija Y. Ker se vsote lažje odvaja, uporabimo logaritmirano funkcijo verjetja

$$l(\beta, \theta) = c - \frac{1}{2}\log(|V|) - \frac{1}{2}(Y - X\beta)'V^{-1}(Y - X\beta), \tag{7}$$

kjer je c konstanta, $\theta = (R_1, \ldots, R_n, G_1 \ldots, G_n)$ pa predstavlja vektor vseh variančnih komponent vključenih v V.

Za pridobitev cenilk je potrebno enačbo (7) parcialno odvajati po β ter po vseh komponentah $\theta_r, r = 1, \ldots, q$. Pripadajoča parcialna odvoda sta

$$\frac{\partial l}{\partial \beta} = X'V^{-1}Y - X'V^{-1}X\beta \tag{8}$$

$$\frac{\partial l}{\partial \theta_r} = \frac{1}{2}\left\{(Y - X\beta)'V^{-1}\frac{\partial V}{\partial \theta_r}V^{-1}(Y - X\beta) - \text{sled}\left(V^{-1}\frac{\partial V}{\partial \theta_r}\right)\right\}, r = 1, \ldots, q, \tag{9}$$

kjer je θ_r r-ta komponenta vektorja θ, ki je dimenzije q (Jiang, 2007, str. 10).

Izpeljava (8). Oglejmo si del enačbe (7), ki je odvisen od parametra β. Velja:

$$\begin{gathered}
-\frac{1}{2}(Y - X\beta)'V^{-1}(Y - X\beta) = -\frac{1}{2}\langle V^{-1}(Y - X\beta), (Y - X\beta)\rangle \\
\langle V^{-1}Y, -X\beta\rangle = -X'V^{-1}Y\beta \\
\langle -V^{-1}X\beta, Y\rangle = \langle Y, -(V^{-1}X)'\beta\rangle = -X'V^{-1}Y\beta \\
\langle -V^{-1}X\beta, -X\beta\rangle = \beta'X'V^{-1}X\beta
\end{gathered}$$

Sledi:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \beta}(-\frac{1}{2}\langle V^{-1}(Y - X\beta), (Y - X\beta)\rangle) &= -\frac{1}{2}(-X'V^{-1}Y - X'V^{-1}Y + 2X'V^{-1}X\beta) = \\
&= X'V^{-1}(Y - X\beta) = X'V^{-1}Y - X'V^{-1}X\beta.
\end{aligned}$$

□

Izpeljava (9). Za izpeljavo so potrebne naslednje trditve:

Trditev 5.1 (Odvajanje matrike)**.** *Če so elementi matrike A funkcije vektorja θ (z realnimi vrednostmi), potem so elementi matrike $\partial A/\partial \theta$ odvodi istoležečih elementov v matriki A. Zgled za matriko velikosti 2×2:*

$$\text{Če } A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \text{ potem } \frac{\partial A}{\partial \theta} = \begin{pmatrix} \partial a_{11}/\partial \theta & \partial a_{12}/\partial \theta \\ \partial a_{21}/\partial \theta & \partial a_{22}/\partial \theta \end{pmatrix}$$

([1]Jiang, 2007, str. 233).

Trditev 5.2 (Odvajanje inverza matrike). *Če je matrika A, katere elementi so odvisni od vektorja θ, nesingularna, potem za vsako komponento θ_i vektorja θ velja*

$$\frac{\partial A^{-1}}{\partial \theta_i} = -A^{-1}\left(\frac{\partial A}{\partial \theta_i}\right)A^{-1}$$

([1] Jiang, 2007, str. 234).

Trditev 5.3 (Odvajanje logaritma determinante matrike). *Če je matrika A kot zgoraj še (simetrična) pozitivno definitna, potem za vsako komponento θ_i vektorja θ velja*

$$\frac{\partial}{\partial \theta_i}\log(|A|) = \text{sled}\left(A^{-1}\frac{\partial A}{\partial \theta_i}\right)$$

([1] Jiang, 2007, str. 234).

S pomočjo navedenih trditev takoj sledi izpeljava (9):

$$\frac{\partial l}{\partial \theta_r} = -\frac{1}{2}\text{sled}(V^{-1}\frac{\partial V}{\partial \theta_r}) + \frac{1}{2}(Y - X\beta)'V^{-1}\frac{\partial V}{\partial \theta_r}V^{-1}(Y - X\beta)$$

$$\frac{\partial l}{\partial \theta_r} = \frac{1}{2}\left\{(Y - X\beta)'V^{-1}\frac{\partial V}{\partial \theta_r}V^{-1}(Y - X\beta) - \text{sled}\left(V^{-1}\frac{\partial V}{\partial \theta_r}\right)\right\}, r = 1, \dots, q.$$

□

Cenilka največjega verjetja, če obstaja, je stacionarna točka funkcije l, torej rešitev enačbe:

$$\frac{\partial l}{\partial \beta} = 0, \ \frac{\partial l}{\partial \theta} = 0$$

([1] Jiang, 2007, str. 10).

Izkaže se, da ni nujno, da je rešitev enačb (8) in (9) zares iskana cenilka. Cenilka dobljena po metodi največjega verjetja (CMNV), je po definiciji točka, v kateri logaritmirana funkcija verjetja zavzame globalni maksimum. Stacionarna točka pa je lahko globalni maksimum (kar ustreza), lokalni maksimum, lokalni minimum ali pa sedlo. Za rešitev te težave obstajajo določene metode, ki v diplomskem delu niso omenjene, vendar pa vse primerne metode vodijo k vsaj lokalnemu maksimumu ([1] Jiang, 2007, str. 40).

Nadaljevanje pridobivanja cenilk za β in V:

Naj bo p dimenzija vektorja β in naj ima zaradi enostavnosti matrika X poln rang, t.j. $\text{rang}(X) = p$. Naj bo $(\hat{\beta}, \hat{\theta})$ cenilka, dobljena po metodi največjega verjetja. S preoblikovanjem izraza $\frac{\partial l}{\partial \beta} = 0$ za $\hat{\beta}$ in $\hat{V} = V(\hat{\theta})$ sledi

$$\hat{\beta} = (X'\hat{V}^{-1}X)^{-1}X'\hat{V}^{-1}Y. \tag{10}$$

Iz (8) in (9) sledi, da v točki $\theta = \hat{\theta}$ velja

$$Y'P\frac{\partial V}{\partial \theta_r}PY = \text{sled}\left(V^{-1}\frac{\partial V}{\partial \theta_r}\right), r = 1, \dots, q, \tag{11}$$

kjer je

$$P = V^{-1} - V^{-1}X(X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}. \tag{12}$$

Postopek iskanja cenilk po metodi največjega verjetja je tak, da najprej rešimo enačbo (11) in dobljeno rešitev $\hat{\theta}$ vstavimo v (10) ([1] Jiang, 2007, str. 10).

V primeru modela ANOVA z originalno formo variančnih komponent je $V = \tau^2 I_m + \sum_{k=1}^{s} \sigma_k^2 Z_k Z_k'$ (m tako kot do sedaj predstavlja velikost vzorca), iz česar sledi

$$\partial V / \partial \tau^2 = I_m, \ \partial V / \partial \sigma_k^2 = Z_k Z_k', \ 1 \leq k \leq s$$

([1] Jiang, 2007, str. 11).

Na tem mestu je omembe vredna opomba, da pri ocenjevanju variančnih komponent metoda največjega verjetja upošteva fiksne učinke modela kot znane vrednosti in ne upošteva izgube prostostnih stopenj, do katerih pride zaradi ocenjevanja fiksnih učinkov modela. Posledično lahko predvsem v primeru majhnih vzorcev vrne pristranske cenilke ([2] Tang, 2011, str. 8).

5.1.2. *Primer Neyman-Scott.* Primer Neyman-Scott je opisan za ponazoritev, da cenilke, dobljene po metodi največjega verjetja niso nujno dosledne. Neyman in Scott sta leta 1948 pokazala, da v primeru, ko število parametrov narašča z velikostjo vzorca, cenilka po metodi največjega verjetja ni nujno dosledna.

Naj bosta na vsakem izmed n posameznikov narejeni dve meritvi. Vsak posameznik ima svoje (neznano) povprečje μ_i, $\forall i$. Naj bodo meritve neodvisne in normalno porazdeljene z varianco σ^2, ki bi jo radi ocenili. Model se lahko zapiše v obliki

$$Y_{ij} = \mu_i + \epsilon_{ij}, \text{ kjer je } \epsilon_{ij} \sim N(0, \sigma^2), \ 1 \leq i \leq n, \ j = 1, 2.$$

Ta model je podoben modelu (1) z $Z = 0$. Izkaže se, da je cenilka po metodi največjega verjetja parametra σ^2 nedosledna ([1] Jiang, 2007, str. 12).

5.2. **Restringirana metoda največjega verjetja - RMNV.** Zaradi zgoraj omenjenih težav pri uporabi metodi največjega verjetja so statistiki razvili restringirano metodo največjega verjetja, opisano v tem razdelku. Ne le, da so cenilke, dobljene po restringirani metodi največjega verjetja, invariantne za fiksne učinke modela, ampak le-teh ta metoda niti ne ocenjuje ([2] Tang, 2011, str. 8).

Z metodo največjega verjetja je potrebno oceniti vse vključene parametre, nekateri pa niso vedno predmet zanimanja (kot v primeru Neyman-Scott ni zanimivo ocenjevanje fiksnih učinkov), ampak je v ospredju pridobivanje cenilk za variančne komponente. Restringirana metoda največjega verjetja omogoča pridobivanje cenilk zgolj za parametre, ki so predmet zanimanja, ne ozirajoč se na nezanimive parametre. Za lažjo predstavo restringirane metode največjega verjetja je v nadaljevanju primer Neyman-Scott podrobneje razdelan.

5.2.1. *Nadaljevanje primera Neyman-Scott.* V tem primeru je število parametrov $n + 1$, kjer želimo oceniti parameter σ^2, parametri $\mu_1, \ldots, \mu_n$ pa nas ne zanimajo. Očitno je število parametrov proporcionalno velikosti vzorca, ki je enaka $2n$. Z restringirano metodo največjega verjetja se namesto uporabe originalnih podatkov naredi transformacijo $Z_i = Y_{i1} - Y_{i2}$. Sledi, da so $Z_1, \ldots, Z_n$ neodvisne in porazdeljene $N(0, 2\sigma^2)$. S tako transformacijo podatkov se fiksne učinke izloči, ker le-ti v porazdelitev slučajnih spremenljivk Z_i, $1 \leq i \leq n$, niso vključeni. Nato se za pridobivanje cenilk za variančne komponente uporabi transformirane podatke. Izkaže se, da je cenilka po metodi največjega verjetja za σ^2 na novih oziroma transformiranih podatkih $Z_1, \ldots, Z_n$, ki se ji reče cenilka po restringirani metodi največjega verjetja (CRMNV), dosledna. Po transformaciji podatkov ostane le še en parameter in sicer σ^2 ([1] Jiang, 2007, str. 13).

5.2.2. *RMNV v splošnem - točkovno ocenjevanje.* V tem podrazdelku je restringirana metoda največjega verjetja v splošnem smislu za točkovno ocenjevanje podrobneje opisana.

Naj bo $Y \sim N(X\beta, V)$, kjer je $V = R + ZGZ'$, kot v podrazdelku (4.3). Brez škode za splošnost naj bo izpolnjena predpostavka, da ima matrika $X \in \mathbb{R}^{m\times p}$ poln rang, $\text{rang}(X) = p$. Naj bo A taka matrika dimenzije $m \times (m-p)$, za katero velja $\text{rang}(A) = m - p$ in $A'X = 0$. Za potrebe izpeljave naj bo $Z = A'Y$. Velja:

$$E(A'Y) = A'XB = 0,\ Var(A'Y) = A'VA \Rightarrow Z \sim N(0, A'VA).$$

Sledi, da je zvezna porazdelitvena gostota slučajne spremenljivke Z dana kot

$$f_{Z,R}(z) = \frac{1}{(2\pi)^{(m-p)/2}|A'VA|^{1/2}}\exp\left\{-\frac{1}{2}z'(A'VA)^{-1}z\right\},$$

kjer indeks R označuje, da gre za restringirano metodo. Logaritmirana funkcija verjetja, ki se imenuje restringirana logaritmirana funkcja verjetja, pa je

$$l_R(\theta) = c - \frac{1}{2}\log(|A'VA|) - \frac{1}{2}Z'(A'VA)^{-1}Z, \tag{13}$$

kjer je c konstanta. Z odvajanjem te pa dobimo, izraženo z Y:

$$\frac{\partial l_R}{\partial\theta_i} = \frac{1}{2}\left\{Y'P\frac{\partial V}{\partial\theta_i}PY - \text{sled}\left(P\frac{\partial V}{\partial\theta_i}\right)\right\},\ i = 1, \ldots, q, \tag{14}$$

kjer je

$$P = A(A'VA)^{-1}A'. \tag{15}$$

Izpeljava (14).

$$\begin{aligned}\frac{\partial l_R}{\partial\theta_i} &= -\frac{1}{2}Z'(-(A'VA)^{-1}\frac{\partial A'VA}{\partial\theta_i}(A'VA)^{-1})Z - \frac{1}{2}\text{sled}((A'VA)^{-1}\frac{\partial A'VA}{\partial\theta_i}) = \\ &= \frac{1}{2}(Y'A(A'VA)^{-1}A'\frac{\partial V}{\partial\theta_i}A(A'VA)^{-1}A'Y - \text{sled}((A'VA)^{-1}A'\frac{\partial V}{\partial\theta_i}A) = \\ &= \frac{1}{2}\big(Y'P\frac{\partial V}{\partial\theta_i}PY - \text{sled}(P\frac{\partial V}{\partial\theta_i})\big).\end{aligned}$$

□

Cenilka po restringirani metodi največjega verjetja je definirana kot točka, v kateri funkcija (13) zavzame maksimum, in se jo podobno kot pri metodi največjega verjetja dobi kot rešitev enačbe $\partial l_R/\partial\theta = 0$ ([1] Jiang, 2007, str. 13).

V (13) je restringirana logaritmirana funkcija verjetja zgolj funkcija parametra θ. Z drugimi besedami, restringirana metoda največjega verjetja je metoda, s katero se pridobi cenilko parametra θ, cenilke parametra β pa ne, saj se β izloči že pred ocenjevanjem. Cenilko za β se po restringirani metodi največjega verjetja poišče tako, da se izračuna cenilko po restringirani metodi največjega verjetja za parameter

θ, nato pa se dobi cenilko za β iz enačbe (10) z $V = V(\hat{\theta})$, kjer je $\hat{\theta}$ cenilka dobljena po restringirani metodi največjega verjetja. Cenilka za parameter β, dobljena po tej metodi, se imenuje cenilka β dobljena po restringirani metodi največjega verjetja (CRMNV) ([1] Jiang, 2007, str. 14).

Opomba 5.4. Čeprav je cenilka, dobljena po restringirani metodi največjega verjetja, definirana preko transformacije z matriko A, CRMNV ni odvisna od matrike A (enačbi (14) in (15) nista odvisni od A). To dejstvo je pomembno, saj izbira matrike A ni enolična, če bi bila cenilka odvisna od izbire transformacije, pa ne bi bilo dobro. Naj bo alternativna transformacijska matrika $B = AT$, kjer je T poljubna nesingularna matrika razsežnosti $(m-p) \times (m-p)$. V tem primeru se CRMNV za σ^2 ne spremeni ([1] Jiang, 2007, str. 14).

Dokaz (5.4). Naj bo $A = [A^1, \ldots, A^{m-p}]$ in $B = [B^1, \ldots, B^{m-p}]$ druga matrika takšne oblike. V tem zapisu A^i in B^i predstavljata stolpce. Velja $B = AT$, kjer je T obrnljiva matrika dimenzije $(m-p) \times (m-p)$. Naj bo $P_A = A(A'VA)^{-1}A'$. Tedaj velja

$$P_B = B(B'VB)^{-1}B' = AT(T'(A'VA)T)^{-1}T'A' = A(A'VA)^{-1}A'.$$

■

5.2.3. *Nadaljevanje primera Neyman-Scott.* V nadaljevanju je prikazano, kako izgleda transformacijska matrika v primeru Neyman-Scott. V primeru transformacije $Z_i = Y_{i1} - Y_{i2},\ i = 1, \ldots, n$, je pripadajoča matrika A, ki je velikosti $m \times n$ (kjer je $m = 2n$), naslednje oblike:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -1 \end{bmatrix}'$$

Alternativna transformacijska matrika bi bila matrika $B = AT$, kjer je T katerakoli $n \times n$ nesingularna matrika ([1] Jiang, 2007, str. 14).

5.3. **Iterativno uteženo povprečje najmanjših kvadratov.** V tem podpoglavju je opisano iterativno uteženo povprečje najmanjših kvadratov, metoda, ki se jo lahko uporablja tudi v linearnih mešanih modelih, ki niso Gaussovi. Uporablja se jo predvsem v longitudinalnih modelih, torej za analizo longitudinalnih podatkov, kjer je običajna metoda ocenjevanja fiksnih učinkov tako imenovano uteženo povprečje najmanjših kvadratov (*ang. weighted least squares,* WLS) ([1] Jiang, 2007, str. 20).

Naj bo Y vektor meritev in X matrika znanih konstant. Naj bo $\mathrm{E}(Y) = X\beta$, kjer β kot do sedaj predstavlja vektor neznanih regresijskih koeficientov. Cenilko za β se po uteženi metodi najmanjših kvadratov dobi z minimizacijo izraza

$$(Y - X\beta)'W(Y - X\beta), \tag{16}$$

kjer je W znana simetrična matrika uteži ([1] Jiang, 2007, str. 20).

5.3.1. *Cenilka BLUE.* V tem podrazdelku je opisana najboljša linearna nepristranska cenilka.

Brez škode za splošnost naj bo rang matrike X poln in naj velja $\text{rang}X = p$. Potem je za vsako nesingularno (simetrično) matriko W minimum izraza (16) enak

$$\hat{\beta}_W = (X'WX)^{-1}X'WY. \tag{17}$$

Cenilko za β po običajni metodi najmanjših kvadratov (*ang. ordinary least squares,* OLS) se dobi kot poseben primer, za $W = I$:

$$\hat{\beta}_I = (X'X)^{-1}X'Y. \tag{18}$$

Izkaže se, da je v smislu čim manjše variance optimalna izbira za matriko W matrika $W = V^{-1}$, kjer je $V = \text{Var}(Y)$. Tako dobljena cenilka za parameter β je najboljša, saj je z njeno uporabo dosežena najmanjša možna variabilnost med vsemi drugimi alternativami. V tem primeru se dobljeni cenilki za β reče najboljša linearna nepristranska cenilka ali BLUE (*ang. best linear unbiased estimator*):

$$\hat{\beta}_{\text{BLUE}} = (X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}Y \tag{19}$$

([1] Jiang, 2007, str. 21).

5.3.2. *Izračun BLUE na uravnoteženem primeru.* V enačbi za β_{BLUE} nastopa tudi V, ki pa tipično ni znana. Zaradi poenostavitve je v nadaljevanju prikazan postopek izračuna cenilke BLUE zgolj na uravnoteženem primeru.

Naj bo Y_{ij}, $j = 1, \ldots, \tilde{m}$, vektor meritev na i-tem posamezniku, kjer je $\tilde{m}$ fiksno število. V uravnoteženem primeru so na vseh posameznikih meritve pridobljene ob določenih časovnih trenutkih $t_1, \ldots, t_{\tilde{m}}$. Za i-tega posameznika se lahko vektor meritev zapiše kot $Y_i = (Y_{ij})_{1 \leq j \leq \tilde{m}}$, $i = 1, \ldots, n$. Naj bodo $Y_1, \ldots, Y_n$ med seboj neodvisni in naj za njih velja $\text{E}(Y_i) = X_i\beta$ in $\text{Var}(Y_i) = V_0$. Tu je X_i matrika znanih konstant in $V_0 = (v_{qr})_{1 \leq q,\ r \leq \tilde{m}}$ neznana variančno kovariančna matrika. Iz tega sledi, da je $V = \text{diag}(V_0, \ldots, V_0)$. Ker je število meritev $\tilde{m}$ na vsakem posamezniku fiksno, je mogoče poiskati dosledno cenilko za V. Če bi bil parameter β znan, bi bila dosledna cenilka za V kar

$$\hat{V} = \text{diag}(\hat{V}_0, \ldots, \hat{V}_0),$$

kjer je

$$\hat{V}_0 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(Y_i - X_i\beta)(Y_i - X_i\beta)'. \tag{20}$$

Če bi bila V znana, bi lahko za izračun najboljše linearne nepristranske cenilke za β uporabili (19), če pa bi poznali β, bi z (20) dobili dosledno cenilko za V ([1] Jiang, 2007, str. 21).

Metodi, kjer ni treba poznati ne β, ne V, pa se reče iterativno uteženo povprečje najmanjših kvadratov (*ang. iterative weighted least squares,* I-WLS). Postopek omenjene metode je sledeč:

- Najprej se izračuna cenilka za β po običajni metodi najmanjših kvadratov s pomočjo (18).

- Nato se izračuna $\hat{V}$ po (20), kjer je β zamenjan z $\hat{\beta}_I$ izračunanim en korak prej.
- V zadnjem koraku pa se na desni strani (19) matriko V zamenja z njeno cenilko $\hat{V}$, izračunano na prejšnjem koraku.

Na tak način se dobi cenilka za β po prvi iteraciji, nato pa se postopek ponavlja. Pod predpostavko normalnosti se izkaže, da če I-WLS konvergira, bo cenilka v limiti enaka cenilki, dobljeni po metodi največjega verjetja ([1] Jiang, 2007, str. 22).

5.4. **ANOVA ocenjevanje.** Običajna in restringirana metoda največjega verjetja, ki sta bili opisani v prejšnjih podrazdelkih poglavja o ocenjevanju v normalnih linearnih mešanih modelih, sta bili v preteklosti, ko tehnologija še ni bila tako napredna, računalniško precej zahtevni za uporabo. Zato so bile razvite druge metode, med njimi ocenjevanje ANOVA, katere začetnik je C. R. Henderson, in metoda MINQUE, katero je predstavil C. R. Rao ([1] Jiang, 2007, str. 25). V zadnjem delu poglavja o ocenjevanju v obravnavanih modelih sta ti dve metodi podrobneje opisani, začenši z ocenjevanjem po metodi ANOVA.

Osnovna ideja ocenjevanja ANOVA (*ang. analysis of variance estimation*) izhaja iz metode momentov. Naj bo v linearni mešani model vključenih q variančnih komponent in naj bo $\hat{Q}$ q-dimenzionalni vektor, čigar komponente so kvadratne funkcije podatkov. Cenilke za variančne komponente po metodi ANOVA so dobljene kot rešitve sistema enačb

$$E(\hat{Q}) = Q$$

([1] Jiang, 2007, str. 25). V neuravnoteženem primeru je iskanje primernega vektorja precej zapleteno, zato je v diplomskem delu opisano le, kako se k reševanju postopa v uravnoteženem primeru.

5.4.1. *Nadaljevanje primera za enosmerni model slučajnih učinkov (2).* Naj zaradi enostavnosti za primer (2) iz razdelka o modelih ANOVA velja $m_i = k$, $1 \leq i \leq n$, torej na vsakem posamezniku enako število meritev. Naj α_i predstavljajo slučajne učinke zdravljenja. V uravnoteženem primeru se komponente vektorja $\hat{Q}$ določi s pomočjo sledeče tabele ANOVA:

SS	df	MS	f
SSA	$n-1$	MSA $= \frac{SSA}{n-1}$	$\frac{MSA}{MSE}$
SSE	$n(k-1)$	MSE $= \frac{SSE}{n(k-1)}$	
SS_{total}	$nk-1$		

Tabela 1. Tabela ANOVA

([1] Jiang, 2007, str. 26).

Ker sta v primeru enosmernega modela slučajnih učinkov variančni komponenti dve, σ^2 in τ^2, sta pripadajoči komponenti vektorja $\hat{Q}$ kar funkciji izrazov SSA in SSE. Izkaže se, da velja

- $\mathrm{E(SSA)} = (n-1)k\sigma^2 + (n-1)\tau^2$
- $\mathrm{E(SSE)} = n(k-1)\tau^2$.

Ker je za pridobivanje cenilk po metodi ANOVA potrebno rešiti sistem enačb $E(\hat{Q}) = Q$ sledi, da sta pripadajoči enačbi za ocenjevanje po metodi ANOVA

$$\begin{cases} (n-1)k\sigma^2 + (n-1)\tau^2 & = \text{SSA}, \\ n(k-1)\tau^2 & = \text{SSE}. \end{cases}$$

Izkaže se, da sta cenilki, dobljeni po tej metodi

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{MSA - MSE}{k} \text{ in } \hat{\tau}^2 = MSE \text{ oziroma } \hat{Q} = (\hat{\sigma}^2, \hat{\tau}^2)$$

([1] Jiang, 2007, str. 26).

Za lažje razumevanje zgoraj podane tabele (1), sledi kratek opis njenih elementov:

- V stolpcu df je število prostostnih stopenj porazdelitve χ^2.
- $\text{SSA} = k\sum_{i=1}^{n}(\bar{Y}_{i.} - \bar{Y}_{..})^2$. SSA predstavlja totalno povprečje za uravnotežen primer (*ang. Sum of Squared errors of All treatment (sample) means vs grand mean*).
- $\text{SSE} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(Y_{ij} - \bar{Y}_{i.})^2$. SSE je vsota kvadratov razlik med posameznimi meritvami na vsakem posamezniku in povprečjem meritev na vsakem posamezniku (*ang. Sum of Squared Errors of all observations vs respective sample means*) ([1] Jiang, 2007, str. 232).
- $\text{SS}_{\text{total}} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{k}(Y_{ij} - \bar{Y}_{..})^2 = \text{SSA} + \text{SSE}$. SS_{total} pa je vsota kvadratov razlik med posameznimi meritvami na vsakem posamezniku in skupnim povprečjem vseh meritev (*ang. Sum of Squared errors Total for all observations vs grand mean*).
- $f = \frac{MSA}{MSE}$ predstavlja vrednost slučajne spremenljivke F, ki ima pod ničelno hipotezo H_0 Fischerjevo porazdelitev, $F \sim F_{n-1,n(k-1)}$, kjer sta ničelna hipoteza in alternativna hipoteza naslednje oblike:
  $\text{H}_0 : \mu_1 = \mu_2 = \ldots = \mu_n$
  H_A : Vsaj ena od enakosti iz ničelne hipoteze ne drži.
  Ničelno hipotezo se zavrne, če vrednost f presega kritično vrednost Fischerjeve porazdelitve $f_\alpha(n-1, n(k-1))$ ([4] Cotter, str. 2).

Velja pripomniti, da so v uravnoteženem primeru cenilke variančnih komponent $\theta = (\tau^2, \sigma_i^2, 1 \le i \le s)$, dobljene po metodi ANOVA, enake cenilkam dobljenim z restringirano metodo največjega verjetja. To velja tudi v primeru, ko predpostavka normalnosti ni izpolnjena ([1] Jiang, 2007, str. 26).

5.5. **MINQUE - kvadratično nepristransko ocenjevanje minimalnih norm.** V zadnjem podrazdelku poglavja o ocenjevanju v normalnih linearnih mešanih modelih je opisano kvadratično nepristransko ocenjevanje minimalnih norm ali MINQUE (*ang. Minimum Norm Quadratic Unbiased Estimation*). Po tej metodi se cenilke dobi podobno kot po metodi ocenjevanja ANOVA, opisani v prejšnjem podrazdelku. Potrebno je rešiti sistem enačb $E(\hat{Q}) = Q$, kjer je $\hat{Q}$ vektor kvadratnih form. Vprašanje na tem mestu je, kako dobiti primeren $\hat{Q}$.

Naj bo $\theta = (\sigma_i^2)_{0 \le i \le s}$, kjer je $\sigma_0^2 = \tau^2$. Za ponazoritev metode naj bo $\eta = b'\theta$ linearna funkcija parametra θ, $b = (b_i)_{0 \le i \le s}$. Dodatno, naj bo cenilka za η kvadratna forma v Y: $\hat{\eta} = Y'AY$ in $Y \sim N(X\beta, V)$. Z določitvijo matrike A posledično določimo tudi $\hat{Q}$ ([1] Jiang, 2007, str. 28).

Za nadaljevanje potrebujemo trditev (5.5) in lemo (5.6).

Trditev 5.5. *Naj bo ξ tak slučajni vektor, da je $E(\xi) = \mu$ in $Var(\xi) = \Sigma$. Potem za vsako neslučajno simetrično matriko A velja*

$$\mathrm{E}(\xi' A\xi) = \mu' A\mu + \mathrm{sled}(A\Sigma).$$

Dodatno, če je $\xi \sim N(0, \Sigma)$, je $\xi' A\xi$ je porazdeljena kot χ^2_r, $r = rang(A)$, če in samo če je $A\Sigma$ idempotentna ([1] Jiang, 2007, str. 237).

Lema 5.6. *Naj bo A poljubna takšna simetrična matrika, da velja $X'AX = 0$. Naj bo $\sigma_0^2 = \tau^2$ in $Z_0 = I_m$, kjer je m velikost vzorca. V modelih (1) in (4) je koeficient pri σ_i^2 v $\mathrm{E}(Y'AY)$ enak $\mathrm{sled}(AZ_iZ_i')$, $0 \leq i \leq s$ (tudi brez predpostavke normalnosti).*

Dokaz (5.6). Iz trditve (5.5) sledi:

$$E(Y'AY) = \mathrm{sled}(AV) + \beta' X' AX\beta = \mathrm{sled}(AV), \text{kjer je } V = \sum_{i=0}^{s} \sigma_i^2 Z_i Z_i'.$$

Torej velja: $\mathrm{E}(Y'AY) = \sum_{i=0}^{s} \sigma_i^2 \mathrm{sled}(AZ_iZ_i')$ ([1] Jiang, 2007, str. 27). ■

Naj bo A simetrična matrika, za katero velja $A'X = 0$ in naj bo $\hat{\eta}$ nepristranska cenilka za $b'\theta$. Iz leme (5.6) sledi, da je

$$b_i = \mathrm{sled}(AZ_iZ_i'),\ 0 \leq i \leq s. \tag{21}$$

Z upoštevanjem oblike modela (1) iz poglavja 3 je

$$\hat{\eta} = \alpha' Z_*' AZ_*\alpha, \tag{22}$$

kjer je $Z_* = (Z_0, Z_1, \ldots, Z_s)$, $Z_0 = \mathrm{I}$, $\alpha = (\alpha_0', \alpha_1', \ldots, \alpha_s')'$ in $\alpha_0 = \epsilon$ ([1] Jiang, 2007, str. 28).

Izpeljava (22).

$$\begin{aligned} Y'AY &= \langle AY, Y\rangle = \langle A(X\beta + Z\alpha + \epsilon), X\beta + Z\alpha + \epsilon\rangle = \langle X'A(X\beta + Z\alpha + \epsilon), \beta\rangle + \\ &+ \langle Z'A(X\beta + Z\alpha + \epsilon), \alpha\rangle + \langle A(X\beta + Z\alpha + \epsilon), \epsilon\rangle = \langle Z'AZ\alpha, \alpha\rangle + \langle Z'A\epsilon, \alpha\rangle + \\ &+ \langle AZ\alpha, \epsilon\rangle + \langle A\epsilon, \epsilon\rangle = \langle A(Z\alpha + \epsilon), Z\alpha + \epsilon\rangle = \langle AZ_*\alpha, Z_*\alpha\rangle = \alpha' Z_*' AZ_*\alpha. \end{aligned}$$

□

Po drugi strani, če bi bili α_i opazljivi (kot rezultat slučajnega eksperimenta), bi bila cenilka za σ_i^2 po metodi momentov

$$\frac{1}{m_i} \sum_{j=1}^{m_i} \alpha_{ij}^2 = \frac{1}{m_i} \|\alpha_i\|^2,$$

kjer je $0 \leq i \leq s$ in m_i dimenzija vektorja α_i, $m_0 = m$. Nepristranska cenilka za η bi bila $\tilde{\eta} = \sum_{i=0}^{s} b_i m_i^{-1} \|\alpha_i\|^2 = \alpha' B\alpha$, kjer je $B = \mathrm{diag}(b_i m_i^{-1} I_{m_i}, 0 \leq i \leq s)$ bločna diagonalna matrika ([1] Jiang, 2007, str. 28).

Izkaže se, da je $\hat{\eta}$ prava cenilka. Za $\hat{\eta}$ in cenilko po metodi momentov $\tilde{\eta}$ velja $E(|\hat{\eta} - \tilde{\eta}|^2) = 2\mathrm{sled}[\{(Z_*AZ_* - B)D\}^2]$, kjer je $D = \mathrm{diag}(\sigma_i^2 I_{m_i}, 0 \leq i \leq s)$. Iskano matriko A se, upoštevajoč predpostavko normalnosti, dobi z iskanjem minimuma izraza $E(|\hat{\eta} - \tilde{\eta}|^2)$, torej z minimizacijo pričakovane vrednosti kvadrirane razlike med dejansko cenilko $\hat{\eta}$ in cenilko po metodi momentov $\tilde{\eta}$. Tu je na mestu pripomba, da se brez predpostavke normalnosti matriko A še vedno lahko izračuna na podoben način in sicer z iskanjem minimuma utežene evklidske norme $\text{sled}[\{(Z_*AZ_* - B)D\}^2] = \|D^{1/2}(Z_*AZ_* - B)D^{1/2}\|_2^2$ ([1] Jiang, 2007, str. 28).

Upoštevajoč (21), za omenjeni cenilki $\hat{\eta}$ in $\tilde{\eta}$ velja enakost

$$E(\hat{\eta} - \tilde{\eta}) = 0. \tag{23}$$

Dokaz (23). Najprej si je potrebno ogledati $\hat{\eta}$.

$\hat{\eta} = \alpha' Z_*' A Z_* \alpha = \langle AZ_*\alpha, Z_*\alpha\rangle = \sum_{i,j}\langle AZ_i\alpha_i, Z_j\alpha_j\rangle$. Zaradi nekoreliranosti za različne i in j je pričakovana vrednost $\hat{\eta}$ enaka $E(\hat{\eta}) = \sum_i E(\langle AZ_i\alpha_i, Z_i\alpha_i\rangle)$.

Fiksirajmo i in pišimo $S = Z_i' A Z_i$ ter vzemimo $\alpha_i := \alpha \sim N(\begin{bmatrix}0\\ \vdots \\ 0\end{bmatrix}, \sigma^2 I_n)$.

Po Sylvestrovem izreku je simetrično matriko S mogoče diagonalizirati v ortonormirani bazi, $S = Q\Lambda Q'$ za ortogonalno matriko Q in diagonalno matriko Λ. Sledi

$$\langle S\alpha, \alpha\rangle = \langle Q \begin{bmatrix}\lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n\end{bmatrix} Q'\alpha, \alpha\rangle = \langle \begin{bmatrix}\lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n\end{bmatrix} Q'\alpha, Q'\alpha\rangle.$$

Naj bo sedaj $u := Q'\alpha$. Ker velja

$$Q'\alpha \sim N(Q' \begin{bmatrix}0\\ \vdots \\ 0\end{bmatrix}, Q'\sigma^2 I_n (Q')') \overset{Q \text{ ortogonalna}}{=} N(\begin{bmatrix}0\\ \vdots \\ 0\end{bmatrix}, \sigma^2 I_n) \sim \alpha,$$

sledi, da je $\langle S\alpha, \alpha\rangle = \langle \begin{bmatrix}\lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n\end{bmatrix} \begin{bmatrix}u_1\\ \vdots \\ u_n\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}u_1\\ \vdots \\ u_n\end{bmatrix}\rangle = \sum_{k=1}^n \lambda_k u_k^2$.

Nadalje, velja še

$$u_k \sim N(0, \sigma^2) \Rightarrow \frac{u_k}{\sigma} \sim N(0,1) \Rightarrow (\frac{u_k}{\sigma})^2 \sim \chi_1^2 \Rightarrow u_k^2 \sim \sigma^2\chi_1^2,$$

zato je

$$E(\langle S\alpha, \alpha\rangle) = E(\sum_{k=1}^n \lambda_k u_k^2) = \sigma^2(\lambda_1 + \ldots + \lambda_n) = \sigma^2 \text{sled} S.$$

Pišimo zdaj $S_i = Z_i' A Z_i$. Velja

$E(\hat{\eta}) = \sum_i E(\langle S_i\alpha_i, \alpha_i\rangle) = \sum_i \sigma_i^2 \text{sled} S_i = \sum_i \sigma_i^2 \text{sled}(Z_i' A Z_i)$.

Za $\tilde{\eta}$ pa velja

$$\tilde{\eta} = \sum_{i=0}^s b_i \frac{1}{m_i}\|\alpha_i\|^2,\ \|\alpha_i\|^2 = \langle \begin{bmatrix}1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1\end{bmatrix} \alpha_i, \alpha_i\rangle.$$

Z apliciranjem matematičnega upanja na $\|\alpha_i\|^2$ je

$$E(\|\alpha_i\|^2) = \sigma_i^2 \sum_i 1 = \sigma_i^2 m_i \Rightarrow E(\tilde{\eta}) = \sum_{i=0}^{s} b_i \frac{1}{m_i} \sigma_i^2 m_i$$

in sedaj $E(\hat{\eta} - \tilde{\eta}) = 0$ takoj sledi.

■

Cenilka $\hat{\eta}$ se imenuje cenilka, dobljena po kvadratičnem nepristranskem ocenjevanju minimalnih norm oziroma MINQUE parametra η. MINQUE za σ_i^2, $0 \leq i \leq s$, pa se dobi z ustrezno izbiro vektorja b ([1] Jiang, 2007, str. 28).

5.5.1. *I-MINQUE.* V tem podrazdelku je na kratko opisan I-MINQUE (*ang. Iterative MINQUE*), posebna različica metode MINQUE.

Za izračun minimuma $E(|\hat{\eta} - \tilde{\eta}|^2)$, je potrebno poznati matriko D oziroma parametre σ_i^2, $0 \leq i \leq s$, ki pa so ravno variančne komponente, ki se jih v splošnem ocenjuje. Z iterativno metodo kvadratičnega nepristranskega ocenjevanja minimalnih norm se variančne komponente σ_i^2 zamenja z nekimi začetnimi vrednostmi σ_{0i}^2, $0 \leq i \leq s$. V tem primeru je cenilka MINQUE odvisna od začetnih vrednosti, zato se izvede iterativni postopek, kjer je MINQUE, dobljena po prvem koraku, uporabljena kot začetna vrednost nove iteracije. S ponavljanjem postopka se izkaže, da v primeru, ko I-MINQUE konvergira, izbrane začetne vrednosti σ_i^2, $0 \leq i \leq s$ na konvergenco ne vplivajo. Velja celo to, da je cenilka, dobljena po iterativni metodi kvadratičnega nepristranskega ocenjevanja minimalnih norm enaka cenilki po restringirani metodi največjega verjetja, opisani v poglavju 5.2 ([1] Jiang, 2007, str. 28).

5.6. **Primer v programu R.** Osnovna tabela, uporabljena v opisanem primeru, je tabela `Rail`. Uvožena je iz knjižnice `nlme` v programskem paketu R in je za namene diplomske naloge preoblikovana v tabelo `Zeleznice`. Tabela ima 18 vrstic - meritve so na vsaki od šestih železnic ($n = 6$) izvedene trikrat, v enakih časovnih trenutkih t_1, t_2, in t_3. Teh šest železnic predstavlja slučajni vzorec populacije železnic, za katero nas zanima pričakovana vrednost časa potovanj ultrazvočnih valov vzdolž železnic, variabilnost meritev, ki se jo lahko med železnicami pričakuje in variabilnost v samem procesu meritev. Tabela ima dva stolpca, `zeleznica`, v katerem so identifikacijske številke posameznih železnic in stolpec `Cas`, ki pa vsebuje čase potovanj ultrazvočnih valov vzdolž železnice merjene v nanosekundah ([10]).

Za ilustracijo je podan vrh tabele `Zeleznice`:

```
> head(Zeleznice)
  zeleznica Cas
1         1  55
2         1  53
3         1  54
4         2  26
5         2  37
6         2  32
```

Parametri, ki jih je potrebno oceniti, so:

- pričakovani čas potovanja ultrazvočnih valov vzdolž železnice,
- variabilnost časov potovanj ultrazvočnih valov med železnicami (σ^2),

- variabilnost med meritvami časov potovanja ultrazvočnih valov znotraj železnic (τ^2).

V modelu z enotnim povprečjem za vse železnice, $Y_{ij} = \mu + \epsilon_{ij}$, $\epsilon_{ij} \sim N(0, \tau^2)$, znaša povprečje podatkov 66,5 nanosekund, standardni odklon pa 23,65 nanosekund. Za namene prikaza, zakaj je slučajne učinke dobro vključiti v model, naj bo najprej Y_{ij} predstavljen z modelom, v katerega slučajni učinki niso zajeti:

$$Y_{ij} = \mu_i + \epsilon_{ij},\ i = 1, \ldots, 6,\ j = 1, 2, 3,\ \epsilon_{ij} \sim N(0, \tau^2).$$

Tu Y_{ij} predstavlja j-to meritev časa potovanj ultrazvočnih valov v nanosekundah za i-to železnico, μ_i pa predstavlja povprečni čas potovanja ultrazvočnih valov vzdolž železnice za i-to železnico ([5]). Model se v programskem paketu R zapiše s funkcijo `lm`:

```
model1 <- lm(Cas ~ zeleznica - 1, data = Zeleznice).
```

Ukaz `summary(model1)` vrne rezultate, prikazane na sliki (1).

```
> summary(model1)

Call:
lm(formula = Cas ~ zeleznica - 1, data = Zeleznice)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-6.6667 -1.0000  0.1667  1.0000  6.3333 

Coefficients:
           Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
zeleznica2   31.667      2.321   13.64 1.15e-08 ***
zeleznica5   50.000      2.321   21.54 5.86e-11 ***
zeleznica1   54.000      2.321   23.26 2.37e-11 ***
zeleznica6   82.667      2.321   35.61 1.54e-13 ***
zeleznica3   84.667      2.321   36.47 1.16e-13 ***
zeleznica4   96.000      2.321   41.35 2.59e-14 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 4.021 on 12 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9978,    Adjusted R-squared:  0.9967 
F-statistic: 916.6 on 6 and 12 DF,  p-value: 2.971e-15
```

Slika 1. Model brez vključenih slučajnih učinkov.

Iz izpisa je razvidno, da standardna napaka residualov znaša $\hat{\tau}_1 = 4,02$. Slabost prikazanega modela brez vključenih slučajnih učinkov je, da ne da cenilke za varianco $\hat{\sigma}^2$ med železnicami. Omenjeno težavo se da rešiti z vključitvijo slučajnih učinkov v model.

Prejšnji model je potrebno reparametrizirati tako, da se kot slučajni učinek za i-to železnico vključi slučajno spremenljivko $\alpha_i := \mu_i - \mu$, ki je porazdeljena normalno. Naj bodo α_i, $i = 1, \ldots, 6$, neodvisne in enako porazdeljene slučajne spremenljivke, neodvisne od ϵ_{ij}, $\forall i, j$. Nov model se lahko zapiše v obliki

$$Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \epsilon_{ij},\ \alpha_i \sim N(0, \sigma^2),\ \epsilon_{ij} \sim N(0, \tau^2).$$

Meritve izvedene na i-ti železnici so bile v prejšnjem primeru neodvisne, v tem modelu pa so med seboj korelirane, saj imajo pripisan enak slučajni učinek α_i. V tem modelu je potrebno oceniti tri parametre, μ, σ in τ, ne glede na to, koliko železnic je v eksperiment vključenih. Model za i-to železnico je oblike:

$$\begin{bmatrix} Y_{i1} \\ Y_{i2} \\ Y_{i3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \mu + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \alpha_i + \begin{bmatrix} \epsilon_{i1} \\ \epsilon_{i2} \\ \epsilon_{i3} \end{bmatrix}.$$

V smislu linearnega mešanega modela v splošni obliki $Y = X\beta + Z\alpha + \epsilon$, za $\alpha \sim N(0, G)$, $G = \sigma^2 I_6$ in $\epsilon \sim N(0, R)$, $R = \tau^2 I_{18}$, se v matrični obliki zgornji model zapiše na naslednji način:

$$Z = \begin{bmatrix} Z_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & Z_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & Z_6 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix} Y_{11} \\ Y_{12} \\ Y_{13} \\ Y_{21} \\ Y_{22} \\ Y_{23} \\ \vdots \\ Y_{61} \\ Y_{62} \\ Y_{63} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \mu + \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \\ \alpha_6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{12} \\ \epsilon_{13} \\ \epsilon_{21} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{23} \\ \vdots \\ \epsilon_{61} \\ \epsilon_{62} \\ \epsilon_{63} \end{bmatrix}$$

([5], 2016).

Model z vključenimi slučajnimi učinki se lahko ocenjuje s pomočjo funkcije `lme` iz knjižnice `nlme`. V tej funkciji je narejena predpostavka, da so slučajni učinki α_i med železnicami neodvisni. Funkcija za ocenjevanje uporabi restringirano metodo največjega verjetja, če pa v klicu funkcije dodamo še ukaz `method = "ML"`, pa bodo parametri modela ocenjeni po običajni metodi največjega verjetja ([9]).

Model v programskem paketu R kličemo z ukazom

```
model2 <- lme(Cas ~ 1, random = ~ 1|zeleznica, data = Zeleznice),
```

izpis je prikazan na sliki (2) spodaj.

```
> summary(model2)
Linear mixed-effects model fit by REML
 Data: Zeleznice
      AIC      BIC    logLik
  128.177 130.6766 -61.0885

Random effects:
 Formula: ~1 | zeleznica
        (Intercept) Residual
StdDev:    24.80547 4.020779

Fixed effects: Cas ~ 1
            Value Std.Error DF  t-value p-value
(Intercept)  66.5  10.17104 12 6.538173       0

Standardized Within-Group Residuals:
        Min          Q1         Med          Q3         Max
-1.61882658 -0.28217671  0.03569328  0.21955784  1.61437744

Number of Observations: 18
Number of Groups: 6
```

SLIKA 2. Model z vključenimi slučajnimi učinki ocenjen po restringirani metodi največjega verjetja.

Iz izpisa je razvidno, da je $\hat{\sigma}_2 = 24,81$, $\hat{\tau}_2 = 4,02$ in $\hat{\beta}_2 = 66,5$. Z ukazom `VarCorr(model2)` pa dobimo $\hat{\sigma}_2^2 = 615,31$ in $\hat{\tau}_2^2 = 16,167$. Iz izpisa (3), kjer z dodanim ukazom `method = "ML"` model ocenimo po običajni metodi največjega verjetja, pa dobimo cenilke $\hat{\sigma}_3 = 22,62$, $\hat{\tau}_3 = 4,02$ in $\hat{\beta}_3 = 66,5$ ([6]). Cenilki za $\hat{\tau}$ in $\hat{\beta}$ sta v obeh primerih enaki, cenilka za $\hat{\sigma}_3$, dobljena po običajni metodi največjega verjetja, pa zaradi pristranskosti vrne nekoliko podcenjeno vrednost parametra.

```
> summary(model2.ml)
Linear mixed-effects model fit by maximum likelihood
 Data: Zeleznice
     AIC      BIC    logLik
  134.56 137.2312 -64.28002

Random effects:
 Formula: ~1 | zeleznica
        (Intercept) Residual
StdDev:    22.62435 4.020779

Fixed effects: Cas ~ 1
            Value Std.Error DF  t-value p-value
(Intercept)  66.5  9.554026 12 6.960417       0

Standardized Within-Group Residuals:
        Min          Q1         Med          Q3         Max
-1.61098123 -0.28887045  0.03454166  0.21372780  1.62222279

Number of Observations: 18
Number of Groups: 6
```

SLIKA 3. Model z vključenimi slučajnimi učinki ocenjen po običajni metodi največjega verjetja.

Kot omenjeno v podrazdelku (5.5.1), se lahko v Gaussovih linearnih mešanih modelih variančne komponente ocenjuje tudi z metodo I-MINQUE. V programskem paketu R to metodo na podatkih uporabimo s funkcijo `lmm` iz knjižnice `minque`. Na primeru merjenja ultrazvočnih valov, metodo kličemo z ukazom

```
minque <- lmm(Cas ∼ 1|zeleznica, data = Zeleznice, method =
"minque").
```

Del rezultatov, ki jih vrne omenjena metoda, je prikazan na sliki (4). Iz izpisa je razvidno, da so cenilke, dobljene po iterativni metodi kvadratičnega nepristranskega ocenjevanja minimalnih norm, enake $\hat{\sigma}_4^2 = 615,31$, $\hat{\tau}_4^2 = 16,167$ ter $\hat{\beta} = 66,5$ in so enake cenilkam, dobljenim po restringirani metodi največjega verjetja ([8], 2015, str. 5).

```
> minque[[1]]$Var
$Cas
                    Est         SE   Chi_sq     P_value
V(zeleznica) 615.31111 392.571313 2.456702 0.058512149
V(e)          16.16667   6.600014 6.000000 0.007152939

> minque[[1]]$FixedEffect
$Cas
    Est       SE  z_value      P_value
mu 66.5 10.17104 6.538173 6.227496e-11
```

Slika 4. Model z variančnimi komponentami, ocenjenimi po metodi I-MINQUE.

Interval zaupanja za model iz slike (2), ocenjen po restringirani metodi največjega verjetja, dobimo z ukazom `intervals(model2)`. Izpis je prikazan na spodnji sliki.

```
> intervals(model2)
Approximate 95% confidence intervals

 Fixed effects:
               lower est.    upper
(Intercept) 44.33921 66.5 88.66079
attr(,"label")
[1] "Fixed effects:"

 Random Effects:
  Level: zeleznica
                   lower     est.    upper
sd((Intercept)) 13.27434 24.80547 46.35341

 Within-group standard error:
   lower     est.    upper
2.695007 4.020779 5.998747
```

Slika 5. Interval zaupanja za variančne komponente ocenjene po restringirani metodi največjega verjetja.

Statistično značilnost cenilk fiksnih učinkov pa se preveri s funkcijo `anova`. Tako v primeru ocenjevanja po običajni metodi največjega verjetja, kot tudi v primeru uporabe restringirane metode, je p-vrednost zanemarljivo majhna, $p < .0001$, zato lahko trdimo, da so cenilke za fiksne učinke statistično značilno različne od 0 ([5], 2016).

6. Test po metodi razmerja verjetij v normalnih linearnih mešanih modelih

Za normalne linearne mešane modele je znanih več testov, med njimi so med drugim eksaktni testi, optimalni testi in testi po metodi razmerja verjetij. Za konstrukcijo statističnih testov je razmerje verjetij bralcu dobro poznana metoda. V tem poglavju so testi po metodi razmerja verjetij najprej opisani v splošnem ter nato na primeru enosmernega modela slučajnih učinkov. V zadnjem podrazdelku tega poglavja, pa je na vhodnih podatkih kot v primeru iz (5.6), v programskem paketu R izveden test po metodi razmerja verjetij.

Naj bo X slučajna spremenljivka, za katero je privzet parametrični model s parametrom $\theta = (\theta_1, \ldots, \theta_r) \in \Theta \subset \mathbb{R}^r$. $\hat{\theta} = \hat{\theta}(x_1, \ldots, x_n)$ je ocena prirejena konkretnemu vzorcu $(x_1, \ldots, x_n)$, pri kateri je verjetnost danega vzorca največja:

$$L(x_1, \ldots, x_n; \hat{\theta}) = \max_{\theta \in \bar{\Theta}} L(x_1, \ldots, x_n; \theta).$$

Za preizkušanje domneve $H \subset \Theta$ nasproti $A = H^C = \Theta \backslash H$, se razmerje verjetij za domnevo H glasi:

$$0 \leq \frac{\max_{\theta \in \bar{H}} L(x_1, \ldots, x_n; \theta)}{\max_{\theta \in \bar{\Theta}} L(x_1, \ldots, x_n; \theta)} \leq 1.$$

Naj bo

$$\lambda(x_1, \ldots, x_n) := \frac{\max_{\theta \in \bar{H}} L(x_1, \ldots, x_n; \theta)}{\max_{\theta \in \bar{\Theta}} L(x_1, \ldots, x_n; \theta)},$$

kjer $\lambda(x_1, \ldots, x_n)$ predstavlja testno statistiko. Namesto λ za testno statistiko raje vzamemo $-2\log\lambda$. Ta konvergira k porazdelitvi χ_r^2, kjer z r označimo razliko dimenzij $\dim\Theta - \dim H$, če velja domneva H.

Metoda razmerja verjetij v normalnih linearnih mešanih modelih pa je sledeča. Naj bo $\psi = (\beta', \theta')'$ vektor vseh neznanih parametrov vključenih v normalni linearni mešani model, kjer θ predstavlja vektor variančnih komponent. Naj bo Θ parametrični prostor. Običajno se testira hipotezo, ali je vektor $\theta^{(1)}$, ki je podvektor vektorja θ, enak nekemu znanemu vektorju $\theta_0^{(1)}$. Naj bo $\theta^{(2)}$ podvektor vektorja θ, ki je komplementaren $\theta^{(1)}$. Tedaj se lahko funkcijo verjetja zapiše kot

$$L(\theta) = L(\theta^{(1)}, \theta^{(2)}),$$

([1] Jiang, 2007, str. 55).

Definicija 6.1. Naj bo $\hat{\theta}$ cenilka, pri kateri je verjetnost danega vzorca največja, $L(\hat{\theta}) = \max_{\theta \in \Theta} L(\theta)$. Naj bo $\hat{\theta}^{(2)}$ maksimum funkcije $L(\theta_0^{(1)}, \theta^{(2)})$,
$L(\theta_0^{(1)}, \hat{\theta}^{(2)}) = \max_{\theta^{(2)} \in \Theta^{(2)}} L(\theta_0^{(1)}, \theta^{(2)})$, kjer je $\Theta^{(2)}$ prostor parametrov za $\theta^{(2)}$.
Potem je razmerje verjetij v obravnavanih modelih dano na naslednji način:

$$\lambda = \frac{L(\theta_0^{(1)}, \hat{\theta}^{(2)})}{L(\hat{\theta})}.$$

Pod predpostavko, da ničelna hipoteza drži, testna statistika $-2\log\lambda$ konvergira k porazdelitvi χ^2 z r prostostnimi stopnjami, kjer je r dimenzija vektorja $\theta^{(1)}$ ([1] Jiang, 2007, str. 55). Kot primer je v nadaljevanju prikazan test po metodi razmerja verjetij v enosmernem modelu slučajnih učinkov.

6.1. **Razmerje verjetij za enosmerni model slučajnih učinkov.** V tem primeru gre za enosmerni model slučajnih učinkov kot v (2). Izkaže se, da se lahko z ocenjevanjem z asimptotično kovariančno matriko v normalnih linearnih mešanih modelih, ki v diplomskem delu ni opisano, pod določenimi pogoji izraz za logaritmirano funkcijo verjetja kot v (7), zapiše v obliki:

$$l(\mu, \sigma^2, \tau^2) = c \; - \; \frac{1}{2}(m-n)\log(\tau^2) \; - \; \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\log(\tau^2 + m_i\sigma^2) \; -$$
$$\frac{1}{2\tau^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m_i}(Y_{ij}-\mu)^2 \; + \; \frac{\sigma^2}{2\tau^2}\sum_{i=1}^{n}\frac{m_i^2}{\tau^2 + m_i\sigma^2}(\bar{Y}_{i.}-\mu)^2,$$

kjer je $m = \sum_{i=1}^{n} m_i$, $\bar{Y}_{i.} = \frac{\sum_{j=1}^{m_i} Y_{ij}}{m_i}$ in c konstanta.

Naj bodo $\hat{\mu}$, $\hat{\sigma}^2$ in $\hat{\tau}^2$ cenilke po metodi največjega verjetja za μ, σ^2 in τ^2. Denimo, da preizkušamo ničelno domnevo $H_0 : \sigma^2 = 0$. Pod ničelno hipotezo je zgornji izraz za logaritmirano funkcijo verjetja oblike

$$l(\mu, 0, \tau^2) = c \; - \; \frac{m}{2}\log(\tau^2) \; - \; \frac{1}{2\tau^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m_i}(Y_{ij}-\mu)^2.$$

Izkaže se, da so cenilke po metodi največjega verjetja pod ničelno hipotezo enake

$$\tilde{\mu} = \bar{Y}_{..} \text{ in } \tilde{\tau}^2 = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m_i}(Y_{ij}-\bar{Y}_{..})^2,$$

kjer je $\bar{Y}_{..} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m_i} Y_{ij}$. Testna statistika λ je oblike:

$$\lambda = \frac{L(\tilde{\mu}, 0, \tilde{\tau}^2)}{L(\hat{\mu}, \hat{\sigma}^2, \hat{\tau}^2)},$$

testna statistika $-2\log\lambda$ pa je enaka $-2\log\lambda = -2[l(\tilde{\mu}, 0, \tilde{\tau}^2) - l(\hat{\mu}, \hat{\sigma}^2, \hat{\tau}^2)]$ ([1] Jiang, 2007, str. 55).

6.2. **Nadaljevanje primera v programu R iz (5.6).** Za prikaz testa po metodi razmerja verjetij za enosmerni modelu slučajnih učinkov, $Y_{ij} = \mu + \alpha_i + \epsilon_{ij}$, uporabimo enako tabelo podatkov `Zeleznice` kot v (5.6).

Za namene nadaljnje uporabe s funkcijo `lme` ocenimo model z vključenimi slučajnimi učinki

```
zeleznice.lme <- lme(Cas ~ 1, random = ~ 1|zeleznica, data =
Zeleznice)
```

in model, v katerem slučajni učinki niso vključeni

```
zeleznice.lm <- lm(Cas ~ 1, data = Zeleznice).
```

Ničelna hipoteza testa po metodi razmerja verjetij je, da je variabilnost slučajnih učinkov α_i enaka 0, $H_0 : \sigma^2 = 0$. Za potrebe omenjenega testa v programskem paketu R zapišemo funkciji `test` in `hi2`:

```
test <- -2 * logLik(zeleznice.lm) + 2 * logLik(zeleznice.lme, REML =
FALSE),
hi2 <- mean(pchisq(test, df = c(0, 1), lower.tail = FALSE)).
```

Ker funkcija `hi2` vrne vrednost, ki je mnogo manjša od 0,05, ničelno hipotezo zavrnemo in sprejmemo sklep, da je $\sigma^2 \neq 0$ ([5]).

7. Intervali zaupanja v normalnih linearnih mešanih modelih

V zadnjem poglavju diplomskega dela so opisani intervali zaupanja v normalnih linearnih mešanih modelih. Za te modele se da konstruirati več različnih tipov intervalov zaupanja, med drugim eksaktne intervale zaupanja za variančne komponente, aproksimativne intervale zaupanja za variančne komponente, simultane intervale zaupanja in intervale zaupanja za fiksne učinke ([1] Jiang, 2007, str. 66). V diplomskem delu so opisani eksaktni intervali zaupanja za variančne komponente in intervali zaupanja za fiksne učinke.

7.1. **Eksaktni intervali zaupanja za variančne komponente.** V tem razdelku je predstavljena osnovna metoda, ki se jo lahko uporabi za izračun eksaktnega intervala zaupanja v normalnih linearnih mešanih modelih za neuravnoteženi primer. Metoda konstrukcije eksaktnega intervala zaupanja za varianco vsake meritve Y_{ij}, torej za $\mathrm{Var}(Y_{ij}) = \sigma^2 + \tau^2$, je prikazana na naslednjem primeru.

7.1.1. *Nadaljevanje primera iz (6.1).* Naj bodo c_{ij}, $1 \leq j \leq m_i$, takšne konstante, da velja $\sum_{j=1}^{m_i} c_{ij} = 0$ in $\sum_{j=1}^{m_i} c_{ij}^2 = 1 - 1/m_i$. Naj bo slučajna spremenljivka U_i definirana kot $U_i = \bar{Y}_{i\cdot} + \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij} Y_{ij}$, $1 \leq i \leq n$. Velja, da so $U_1, \ldots, U_n$ neodvisne in normalno porazdeljene slučajne spremenljivke z upanjem μ in varianco $\sigma^2 + \tau^2$ ([1] Jiang, 2007, str. 67).

Pričakovana vrednost slučajne spremenljivke U_i takoj sledi iz znanih porazdelitev slučajnih spremenljivk Y_{ij} in $\bar{Y}_{i\cdot}$:

$$Y_{ij} \sim N(\mu, \sigma^2 + \tau^2) \text{ in } \bar{Y}_{i\cdot} \sim N(\mu, \sigma^2 + \frac{\tau^2}{m_i})$$
$$\Rightarrow E(U_i) = E(\bar{Y}_{i\cdot}) + \sum_{j=1}^{m_i} c_{ij} E(Y_{ij}) = \mu.$$

Izračun variance slučajne spremenljivke U_i pa je nekoliko bolj zapleten, zato je v diplomskem delu izpuščen.

Iz dejstva, da so $U_i \sim N(\mu, \sigma^2 + \tau^2)$, $i = 1, \ldots, n$, neodvisne in enako porazdeljene, sledi, da je slučajna spremenljivka

$$\chi^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (U_i - \bar{U})^2}{\sigma^2 + \tau^2}$$

porazdeljena kot χ^2_{n-1}. Izkaže se, da je eksakten $(1-\rho)\%$ interval zaupanja za $\sigma^2 + \tau^2$ oblike

$$\left[\frac{\sum_{i=1}^{n} (U_i - \bar{U})^2}{\chi^2_{n-1,\rho/2}}, \frac{\sum_{i=1}^{n} (U_i - \bar{U})^2}{\chi^2_{n-1,1-\rho/2}} \right].$$

Metodo za izračun eksaktnega intervala zaupanja za $\sigma^2 + \tau^2$ uporabljeno na zgornjem primeru, sta razvila Burdick in Sielken. Slabost te metode pa je, da se z njo ne da izračunati eksaktnega intervala zaupanja za σ^2 ([1] Jiang, 2007, str. 67).

7.2. **Intervali zaupanja za fiksne učinke.** V zadnjem podrazdelku diplomskega seminarja so opisani še intervali zaupanja za fiksne učinke. Zaradi poenostavitve je metoda pridobivanja obravnavanih intervalov zaupanja prikazana na posebnem primeru regresijskega modela vgnezdenih napak.

Kot že povedano v podpoglavju (5.3), je najboljša linearna nepristranska cenilka za vektor fiksnih učinkov β iz (1), dana z enačbo $\beta_{\text{BLUE}} = (X'V^{-1}X)^{-1}X'V^{-1}Y$. Variančno-kovariančna matrika cenilke $\hat{\beta}_{\text{BLUE}}$ je:

$$Var(\hat{\beta}_{\text{BLUE}}) = (X'V^{-1}X)^{-1}. \tag{24}$$

V splošnem sta tako $\hat{\beta}_{\text{BLUE}}$ kot tudi njegova variančno kovariančna matrika odvisna od variančnih komponent, zato je potrebno za konstrukcijo intervala zaupanja za fiksne učinke zamenjati neznane variančne komponente z doslednimi, denimo REML cenilkami, opisanimi v podpoglavju (5.2) ([1] Jiang, 2007, str. 71).

7.2.1. *Regresijski model vgnezdenih napak.* Naj bo

$$Y_{ij} = \beta_0 + \beta_1 x_i + \alpha_i + \epsilon_{ij},\ i = 1, \ldots, n,\ j = 1, \ldots, m_i,$$

kjer sta β_0 in β_1 neznana regresijska koeficienta, x_i znane konstante, α_i slučajni učinki in ϵ_{ij} slučajna odstopanja. Naj bodo slučajni učinki in slučajna odstopanja med seboj neodvisni ter porazdeljeni $\alpha_i \sim N(0, \sigma^2)$ in $\epsilon_{ij} \sim N(0, \tau^2)$. Za boljšo preglednost enačb v nadaljevanju naj bo $d_i = m_i/(\tau^2 + m_i\sigma^2)$. Izkaže se, da se lahko v tem primeru iz enačbe (19) dobi najboljši linearni nepristranski cenilki za parametra β_0 in β_1 s pomočjo naslednjih dveh izrazov:

$$\hat{\beta}_{\text{BLUE},0} = \frac{(\sum_{i=1}^n d_i x_i^2)(\sum_{i=1}^n d_i \bar{Y}_{i\cdot}) - (\sum_{i=1}^n d_i x_i)(\sum_{i=1}^n d_i x_i \bar{Y}_{i\cdot})}{(\sum_{i=1}^n d_i)(\sum_{i=1}^n d_i x_i^2) - (\sum_{i=1}^n d_i x_i)^2}, \tag{25}$$

$$\hat{\beta}_{\text{BLUE},1} = \frac{(\sum_{i=1}^n d_i)(\sum_{i=1}^n d_i x_i \bar{Y}_{i\cdot}) - (\sum_{i=1}^n d_i x_i)(\sum_{i=1}^n d_i \bar{Y}_{i\cdot})}{(\sum_{i=1}^n d_i)(\sum_{i=1}^n d_i x_i^2) - (\sum_{i=1}^n d_i x_i)^2}. \tag{26}$$

V uravnoteženem primeru, ko je $m_i = \tilde{m},\ 1 \leq i \leq n$, se zgornja izraza se preoblikujeta v

$$\hat{\beta}_{\text{BLUE},0} = \frac{(\sum_{i=1}^n x_i^2)(\sum_{i=1}^n \bar{Y}_{i\cdot}) - (\sum_{i=1}^n x_i)(\sum_{i=1}^n x_i \bar{Y}_{i\cdot})}{n\sum_{i=1}^n x_i^2 - (\sum_{i=1}^n x_i)^2},$$

$$\hat{\beta}_{\text{BLUE},1} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_\cdot)(\bar{Y}_{i\cdot} - \bar{Y}_{\cdot\cdot})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x}_\cdot)^2}.$$

V uravnoteženem primeru BLUE ni odvisen od variančnih komponent, v neuravnoteženem primeru pa je. Z upoštevanjem (24) sledi, da je variančno-kovariančna matrika za $\hat{\beta}_{\text{BLUE}} = (\hat{\beta}_{\text{BLUE},0}, \hat{\beta}_{\text{BLUE},1})'$ oblike

$$Var(\hat{\beta}_{\text{BLUE}}) = \frac{1}{\tau^2 D}\begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n d_i x_i^2 & -\sum_{i=1}^n d_i x_i \\ -\sum_{i=1}^n d_i x_i & \sum_{i=1}^n d_i \end{pmatrix}, \tag{27}$$

kjer je $D = (\sum_{i=1}^n d_i)(\sum_{i=1}^n d_i x_i^2) - (\sum_{i=1}^n d_i x_i)^2$.

Iz (27) je razvidno, da je variančno kovariančna matrika cenilke BLUE tudi v uravnoteženem primeru odvisna od variančnih komponent ([1] Jiang, 2007, str. 71).

7.2.2. *EBLUE.* Cenilka, dobljena z zamenjavo variančnih komponent v BLUE z njihovimi cenilkami, se imenuje empirični BLUE ali EBLUE (*ang. empirical BLUE*). Pod predpostavko normalnosti in če variančne komponente zamenjamo s cenilkami dobljenimi po metodi največjega verjetja, je cenilka EBLUE enaka cenilki za β dobljeni po metodi največjega verjetja. Potrebno pa je pripomniti, da je EBLUE bolj zapleten in tipično nelinearen v Y. Velja še, da rezultat podceni pravo variabilnost cenilke EBLUE, če se v (24) variančne komponente na desni strani enačbe zamenja z njihovimi cenilkami ([1] Jiang, 2007, str. 71).

Po Kackar in Harville pod predpostavko normalnosti velja:

$$\mathrm{Var}(a'\hat{\beta}) = \mathrm{Var}(a'\hat{\beta}_{\mathrm{BLUE}}) + \mathrm{E}\big(a'(\hat{\beta} - \hat{\beta}_{\mathrm{BLUE}})\big)^2 \tag{28}$$

za poljuben vektor a. Ker velja $\mathrm{Var}(a'\hat{\beta}_{\mathrm{BLUE}}) = a'\mathrm{Var}(\hat{\beta}_{\mathrm{BLUE}})a$, se lahko prvi člen na desni strani zgornje enačbe (28) oceni z desno stranjo (24), kjer pa se variančne komponente zamenja s pripadajočimi cenilkami. Dodatno bo, če so cenilke za variančne komponente v modelu ANOVA dobljene po restringirani metodi največjega verjetja ali po običajni metodi največjega verjetja, asimptotična variančno-kovariančno matrika vektorja $\hat{\beta}$ še vedno dana z desno stranjo (24) (čeprav so variančne komponente ocenjene) ([1] Jiang, 2007, str. 72).

Izkaže se, da je interval zaupanja za $a'\beta$ za velik vzorec oblike

$$[a'\hat{\beta} - z_{\rho/2}\big(a'(X'\hat{V}^{-1}X)^{-1}a\big)^{1/2}, a'\hat{\beta} + z_{\rho/2}\big(a'(X'\hat{V}^{-1}X)^{-1}a\big)^{1/2}], \tag{29}$$

kjer cenilko za $\hat{V}$ dobimo iz V z zamenjavo variančnih komponent z njihovimi cenilkami dobljenimi ali po restringirani ali po običajni metodi največjega verjetja ([1] Jiang, 2007, str. 72).

7.2.3. *Nadaljevanje primera (7.2.1).* V tem primeru je prikazan interval zaupanja za $\hat{\beta}_1$. Naj bo $a = (0,1)'$ in $\hat{d}_i = m_i/(\hat{\tau}^2 + m_i\hat{\sigma}^2)$. Naj bo $\hat{\beta}_1$ dan kot v (26) z d_i zamenjanim z $\hat{d}_i$ in $\hat{D}$ enak D (kot v (27)) prav tako z d_i zamenjanim s cenilkami $\hat{d}_i$, $1 \leq i \leq n$. Naj bosta cenilki $\hat{\sigma}^2$ in $\hat{\tau}^2$ dobljeni po restringirani metodi največjega verjetja. Upoštevajoč (29) in (27) je, v primeru velikega vzorca, interval zaupanja za $\hat{\beta}_1$ oblike

$$\left[\hat{\beta}_1 - z_{\rho/2}\left(\frac{\sum_{i=1}^n \hat{d}_i}{\hat{\tau}^2\hat{D}}\right)^{1/2}, \hat{\beta}_1 + z_{\rho/2}\left(\frac{\sum_{i=1}^n \hat{d}_i}{\hat{\tau}^2\hat{D}}\right)^{1/2}\right]$$

([1] Jiang, 2007, str. 72).

Slovar strokovnih izrazov

analysis of variance analiza variance
balanced case uravnotežen primer
best linear unbiased estimator najboljša linearna nepristranska cenilka
confidence intervals intervali zaupanja
consistency doslednost
estimator cenilka
exact tests eksaktni testi
fixed effects fiksni učinki
Gaussian mixed models normalni linearni mešani modeli
growth curve model model krivulje rasti
iterative weighted least squares iterativno uteženo povprečje najmanjših kvadratov
joint probability density function zvezna porazdelitvena gostota
likelihood-ratio test test po metodi razmerja verjetij
log-likelihood function logaritmirana funkcija verjetja
maximum likelihood estimation ocenjevanje po metodi največjega verjetja
minimum norm quadratic unbiased estimation kvadratično nepristransko ocenjevanje minimalnih norm
nested error regression model regresijski model vgnezdenih napak
one-way random effects model enosmerni model slučajnih učinkov
ordinary least squares method običajna metoda najmanjših kvadratov
point estimation točkovno ocenjevanje
random effects slučajni učinki
restricted maximum likelihood estimation ocenjevanje po restringirani metodi največjega verjetja
two-way random effects model dvosmerni model slučajnih učinkov
unbiasedness nepristranskost

Literatura

[1] J. Jiang, *Linear and Generalized Linear Mixed Models and Their Applications*, Springer Series in Statistics, Springer Science + Business Media, LLC, New York, 2007.

[2] A. Tang, *A Class of Mixed-Distribution Models with Applications in Financial Data Analysis*, doktorska disertacija, College of Arts and Sciences, The Florida State University, 2011.

[3] Statistics How To, *ANOVA Test: Definition, Types, Examples*, [ogled 17. 7. 2018], dostopno na `http://www.statisticshowto.com/probability-and-statistics/hypothesis-testing/anova/`.

[4] N. E. Cotter, *Conceptual Tools*, v: Statistics ANOVA One Way Calculations, [ogled 10. 7. 2018], dostopno na `https://www.ece.utah.edu/eceCTools/Statistics/ANOVA/OneWay/StatsANOVAOneWayCalc.pdf`.

[5] D. Lee, *Introduction to mixed models with R*, v: Neiker Courses on Statistical Modelling, [ogled 15. 7. 2018], dostopno na `https://idaejin.github.io/bcam-courses/neiker-2016/material/mixed-models/#maximum-likelihood`.

[6] *lme*, v RDocumentation, [ogled 15. 8. 2018], dostopno na `https://www.rdocumentation.org/packages/nlme/versions/3.1-137/topics/lme`.

[7] *Mixed model*, v: Wikipedia: The Free Encyclopedia, [ogled 24. 7. 2018], dostopno na `https://en.wikipedia.org/wiki/Mixed_model`.

[8] J. Wu, *Package 'minque'*, v: An R package for Linear Mixed Model Analyses, [ogled 17. 7. 2018], dostopno na `https://cran.r-project.org/web/packages/minque/minque.pdf`.

[9] J. Pinheiro et al., *Package 'nlme'*, v: Linear and Nonlinear Mixed Effects Models, [ogled 17. 7. 2018], dostopno na `https://cran.r-project.org/web/packages/nlme/nlme.pdf`.

[10] *Rail: Evaluation of Stress in Railway Rails*, v MEMSS: Data sets from Mixed-effects Models in S, [ogled 15. 8. 2018], dostopno na `https://rdrr.io/rforge/MEMSS/man/Rail.html`.