

一类线性混合模型的谱分解估计

史建红¹, 王松桂²

(1. 山西师范大学数学学院, 山西 临汾 041004; 2. 北京工业大学应用数理学院, 北京 100022)

(E-mail: shijh70@sina.com)

摘要: 谱分解估计 (SDE) 是新近提出的关于线性混合模型参数的一种新的估计方法, 此方法的一个突出特点是同时给出固定效应参数和方差分量的显式解估计. 本文就含两个方差分量的线性混合模型, 对谱分解估计的性质做了进一步的研究, 获得了方差分量的 SDE 和方差分析估计相等的充分必要条件, 证明了在一定的条件下方差分量的 SDE 为一致最小方差无偏估计.

关键词: 线性混合模型; 方差分量; 谱分解估计; 方差分析估计.

MSC(2000): 62J05

中图分类号: O212.1

1 引言

含有两个方差分量的线性混合模型广泛地出现在生物、医药和经济等领域的数据分析中, 于是对这种模型的研究, 特别是关于它的参数估计在线性混合模型中占有特别重要的地位^[1]. 这种模型的一般形式是

$$y = X\beta + U\xi + \epsilon, \quad (1.1)$$

这里, y 为 $n \times 1$ 观测向量, X 为 $n \times p$ 的设计阵, $\text{rank}(X) = p$, β 为 $p \times 1$ 的未知固定效应向量, U 为已知的 $n \times m$ 设计阵, 向量 ξ 为 $m \times 1$ 的随机效应向量, ϵ 为 $n \times 1$ 的随机误差向量. 假定 $\xi \sim N_m(0, \sigma_1^2 I_m)$, $\epsilon \sim N_n(0, \sigma^2 I_n)$, 并且 $\text{Cov}(\xi, \epsilon) = 0$. $\theta = (\sigma^2, \sigma_1^2)'$ 称为方差分量. 记 $V = UU'$. 对于方差分量, 文献中已有的估计是方差分析估计 (ANOVAE)、极大似然估计 (MLE)、限制极大似然估计 (RMLE)、和最小范数二次无偏估计 (MINQUE)^[1]. 这些估计不同程度地存在一些缺点, 例如, ANOVAE 和 MINQUE 不能保证非负性, 而 MLE 和 RMLE 都需要求解非线性方程组, 一般没有显式解, 只能获得迭代解. 特别, MINQUE 很强烈地依赖初始值的选取, 人为主观随意性较大. 关于它们的性质, 目前得到的结果还不多. 迄今为止, 无论从理论上还是从应用上, 还没有一个令人满意的估计.

最近, 文献 [2] 中提出了同时估计固定效应和方差分量的一种新方法, 称为谱分解估计 (spectral decomposition estimate, SDE). 此方法和 MLE, RMLE 一样, 同时考虑固定效应和方差分量的估计, 且在任何情况下, SDE 又和 ANOVAE 一样都有显式解, 这有利于进一步做统计推断.

在本文中, 我们将采用下列记号. A' , $\text{tr}(A)$, $\mathcal{M}(A)$, $\text{rk}(A)$, A^- 和 A^+ 分别表示给定矩阵 A 的转置、迹、列向量张成的线性空间、秩、广义逆和 Moore-Penrose 广义逆. 为方便计, A^- 也

收稿日期: 2004-11-08

基金项目: 国家自然科学基金 (10271010), 北京市自然科学基金 (1032001).

称为 A 的 $\{1\}$ 广义逆. 而把满足方程 $AXA = A$ 和 $XAX = X$ 的矩阵 X 称为 A 的 $\{1,2\}$ 广义逆. 又记 $P_A = A(A'A)^{-1}A'$, 表示向空间 $\mathcal{M}(A)$ 的正交投影阵, $N_A = I - P_A$.

2 ANOVAE 和 SDE

方差分量的 ANOVAE 有多种等价表达式, 为了便于和 SDE 比较, 本文采用文献 [3] 和 [4] 中的等价表达式. 设 Z 为 $n \times q (q = n - p)$ 的列满秩阵, 且满足 $Z'X = 0, Z'Z = I_q$. 记 $u = Z'y$, 则有

$$E(u) = 0, \quad \text{Cov}(u) = \sigma^2 I_q + \sigma_1^2 V_1,$$

这里, $V_1 = Z'VZ$. 设 $t = \text{rk}(V_1)$, 对方方差阵 V_1 做谱分解

$$V_1 = \sum_{j=1}^g \tau_j A_j, \quad (2.1)$$

这里, $\tau_1 > \tau_2 > \dots > \tau_g$ 表示 V_1 的重数分别为 a_1, a_2, \dots, a_g 的所有互不相等的非零特征值, $A_j (j = 1, 2, \dots, g)$ 为对应的主幂等阵. 显然, $\text{rk}(A_j) = a_j, \sum_{j=1}^g a_j = t$. 设 $A_0 = I - \sum_{j=1}^g A_j$, 则 $\text{rk}(A_0) = q - t$. 本文我们总假设 $q - t > 0$.

由 [4] 知, 在模型 (1.1) 下, σ^2 和 σ_1^2 的 ANOVAE 可以分别表示为

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{u'A_0u}{q-t}, \quad (2.2)$$

$$\hat{\sigma}_1^2 = \frac{1}{\text{tr}V_1} \left(\sum_{j=1}^g u'A_ju - \frac{t}{q-t} u'A_0u \right). \quad (2.3)$$

众所周知, ANOVAE 在某些条件下有良好的统计性质, 例如, 当 V_1 只有一个非零特征值时, 方差分量的 ANOVAE 为 UMVUE.

谱分解估计的基本思想是: 首先对方方差阵进行谱分解, 然后利用谱分解得到的主幂等阵对原模型进行适当的线性变换, 获得若干个新的奇异线性模型. 这些新模型的特点是它的固定效应与原模型相同, 但新模型的协方差阵除了一个因子外, 不含未知的方差分量, 利用最小二乘统一理论, 对每个新模型可以得到固定效应和特征值的一个估计, 由于在常见情形下, 协方差阵的特征值是方差分量的线性函数, 因此, 通过解线性方程组可以获得方差分量的估计. 新方法的突出特点是, 对于固定效应可以获得若干个谱分解估计, 它们都是具有良好性质的线性估计, 因此, 可以利用这些估计对固定效应做进一步假设检验、区间估计以及模型诊断等一系列统计推断.

具体来说, 设 $s = \text{rk}(V)$, 对方方差阵 V 做谱分解

$$V = \sum_{i=1}^k \lambda_i M_i, \quad (2.4)$$

这里, $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_k$ 表示 V 的重数分别为 m_1, m_2, \dots, m_k 的所有互不相等的非零特征值, $M_i (i = 1, 2, \dots, k)$ 为对应的主幂等阵. 显然, $\text{rk}(M_i) = m_i, \sum_{i=1}^k m_i = s$. 设 $M_0 = I - \sum_{i=1}^k M_i$, 则 $\text{rk}(M_0) = n - s$.

分别用 $M_i (i = 0, 1, \dots, k)$ 左乘模型 (1.1), 并记 $y^{(i)} = M_i y, X_i = M_i X, \varepsilon_i = M_i U \xi + M_i \epsilon, \lambda_0 = 0$, 则得到变换后的新模型

$$y^{(i)} = X_i \beta + \varepsilon_i, \quad \varepsilon_i \sim N(0, (\sigma^2 + \lambda_i \sigma_1^2) M_i), \quad i = 0, 1, 2, \dots, k, \quad (2.5)$$

因为 M_i 是奇异阵, 由最小二乘统一理论可以得到 $\sigma^2 + \lambda_i \sigma_1^2$ 的估计, 记为 α_i^*

$$\alpha_i^* = \frac{1}{r_i} y' (M_i - P_{M_i X}) y, \quad (2.6)$$

这里, $r_i = \text{rk}(M_i) - \text{rk}(M_i X) (i = 0, 1, 2, \dots, k)$.

本文我们假设 $k = 1$, 即 $V = \lambda_1 M_1, M_0 = I - M_1$, 此时 σ^2 和 σ_1^2 的 SDE 唯一, 它们分别为

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{r_0} u' Z' [M_0 - P_{M_0 X}] Z u, \quad (2.7)$$

$$\tilde{\sigma}_1^2 = \frac{1}{\lambda_1} \left[\frac{1}{r_1} u' Z' (M_1 - P_{M_1 X}) Z u - \frac{1}{r_0} u' Z (M_0 - P_{M_0 X}) Z u \right]. \quad (2.8)$$

这里 u 同前文 ($u = Z' y$), 由 [2] 知 SDE 也是方差分量的不变二次无偏估计.

3 谱分解估计的性质

为了证明本文的主要结果, 我们需要如下引理.

引理 3.1 若 $V = U U'$ 的谱分解为 $V = \lambda_1 M_1$, 即 V 只有一个非零特征值 (不计重数), 则 $M_1 = U (U' U)^{-1} U'$.

注意到 $U' U$ 和 $U U'$ 有相等的非零特征值 λ_1 , 且 $1/\lambda_1 I$ 为 $U' U$ 的一个广义逆, 引理显然.

引理 3.2 对任意给定的行数相等的矩阵 B 和 C , 记 $L = (B:C)$, 则下式成立,

$$P_L = P_B + N_B C (C' N_B C)^{-1} C' N_B.$$

注意到 $\mathcal{M}(L) = \mathcal{M}(B:N_B C)$ 及 $B' N_B C = 0$, 引理易证.

引理 3.3 对给定的矩阵 B , 已知 C 为 B 的一个 $\{1\}$ 广义逆, 则 C 为 B 的一个 $\{1,2\}$ 广义逆 $\iff \text{rk}(B) = \text{rk}(C)$.

证明参见 [5, p126] 定理 5.1.3.

引理 3.4 设 $Y \sim N_p(\mu, V)$, 且 V 为 $p \times p$ 的非奇异阵, 则 $\text{Var}(Y' B Y) = 2 \text{tr}[(B V)^2] + 4 \mu' B V B \mu$.

证明参见 [6, §2.5].

定理 3.1 在模型 (1.1) 下, $\hat{\sigma}^2 = \tilde{\sigma}^2$.

证明 由引理 3.1 和引理 3.2 得 $M_0 = I - M_1 = N_U$, 于是

$$M_0 - P_{M_0 X} = N_U - P_{N_U X} = I - (P_U + P_{N_U X}) = I - P_{(U:X)},$$

故

$$r_0 = \text{rk}(M_0 - P_{M_0 X}) = \text{rk}(I - P_{(U:X)}) = n - \text{rk}(U:X) = n - \text{rk}(X) - \text{rk}(Z' U) = q - t. \quad (3.1)$$

由谱分解的性质得

$$\begin{aligned} Z'(M_0 - P_{M_0X})ZA_0 &= Z'(M_0 - P_{M_0X})Z(I - \sum_{j=1}^g A_j) \\ &= Z'(M_0 - P_{M_0X})Z - \sum_{j=1}^g \frac{1}{\tau_j} Z'(M_0 - P_{M_0X})ZZ'VA_j \\ &= Z'(M_0 - P_{M_0X})Z - \sum_{j=1}^g \frac{1}{\tau_j} Z'(M_0 - P_{M_0X})VZA_j = Z'(M_0 - P_{M_0X})Z, \end{aligned}$$

于是 $[Z'(M_0 - P_{M_0X})Z]A_0[Z'(M_0 - P_{M_0X})Z] = Z'(M_0 - P_{M_0X})Z$, 即 A_0 为 $Z'(M_0 - P_{M_0X})Z$ 的一个 $\{1\}$ 广义逆.

注意到

$$\text{rk}(Z'(M_0 - P_{M_0X})Z) = \text{rk}(M_0 - P_{M_0X}) = \text{rk}(A_0),$$

由引理 3.3, A_0 为 $Z'(M_0 - P_{M_0X})Z$ 的一个 $\{1, 2\}$ 广义逆. 又因为

$$[Z'(M_0 - P_{M_0X})ZA_0]' = Z'(M_0 - P_{M_0X})ZA_0,$$

且

$$[A_0Z'(M_0 - P_{M_0X})Z]' = A_0Z'(M_0 - P_{M_0X})Z,$$

故 A_0 为 $Z'(M_0 - P_{M_0X})Z$ 的 Moore-Penrose 广义逆, 于是, 由 Moore-Penrose 广义逆的唯一性得

$$Z'(M_0 - P_{M_0X})Z = A_0, \quad (3.2)$$

由 (3.1) 和 (3.2) 得 $\hat{\sigma}^2 = \tilde{\sigma}^2$. □

定理 3.2 在模型 (1.1) 下, $\tilde{\sigma}_1^2 = \hat{\sigma}_1^2 \iff Z'M_1Z$ 为幂等阵.

证明 “ \Rightarrow ” 由引理 3.4 计算 $\tilde{\sigma}_1^2$ 和 $\hat{\sigma}_1^2$ 的方差得

$$\text{Var}(\hat{\sigma}_1^2) = \frac{2}{(\text{tr}V_1)^2} \left(t + \frac{t^2}{q-t} \right) \sigma^4 + \frac{2\text{tr}V_1^2}{(\text{tr}V_1)^2} \sigma_1^4 + \frac{4}{\text{tr}V_1} \sigma^2 \sigma_1^2, \quad (3.3)$$

$$\text{Var}(\tilde{\sigma}_1^2) = \frac{2}{\lambda_1^2} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_0} \right) \sigma^4 + \frac{2}{r_1} \sigma_1^4 + \frac{4}{\lambda_1 r_1} \sigma_1^2 \sigma^2, \quad (3.4)$$

对任意 $\sigma^2 > 0$, $\sigma_1^2 > 0$, 若 $\tilde{\sigma}_1^2 = \hat{\sigma}_1^2$, 则下面三个等式同时成立,

$$\frac{1}{(\text{tr}V_1)^2} \left(t + \frac{t^2}{q-t} \right) = \frac{1}{\lambda_1^2} \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_0} \right), \quad (3.5)$$

$$\frac{\text{tr}V_1^2}{(\text{tr}V_1)^2} = \frac{1}{r_1}, \quad (3.6)$$

$$\text{tr}V_1 = \lambda_1 r_1, \quad (3.7)$$

由 (3.5) 和 (3.7) 及定理 3.1 已证明的结论 $r_0 = q - t$ 得

$$\frac{1}{r_1^2} \left(t + \frac{t^2}{r_0} \right) = \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_0},$$

进一步化简得 $t = r_1$, 即

$$\text{rk}(Z'M_1Z) = \text{rk}(Z'(M_1 - P_{M_1X})Z), \quad (3.8)$$

由 (3.8), 利用和定理 3.1 类似的证明方法, 可以证明 $Z'M_1Z$ 为 $Z'(M_1 - P_{M_1X})Z$ 的 Moore-Penrose 广义逆, 故得 $Z'M_1Z$ 为幂等阵, 必要性得证.

“ \Rightarrow ” 若 $Z'M_1Z$ 为幂等阵, 由谱分解的唯一性得 V_1 的谱分解为

$$V_1 = \lambda_1 Z'M_1Z, \quad (3.9)$$

即 $A_1 = Z'M_1Z$, $A_0 = Z'M_0Z$, 且

$$Z'M_1Z = Z'M_1ZZ'M_1Z = Z'M_1(I - P_X)M_1Z = Z'M_1Z - Z'M_1P_XM_1Z,$$

于是, $Z'M_1X(X'X)^-X'M_1Z = 0$, 因为前式和 $(X'X)^-$ 的选取无关, 故 $Z'M_1X = 0$, $Z'M_0X = 0$, 于是

$$\tilde{\sigma}_1^2 = \frac{1}{\lambda_1} \left(\frac{1}{r_1} u'Z'M_1Zu - \frac{1}{r_0} u'Z'M_0Zu \right) \quad (3.10)$$

$$r_1 = \text{rk}(Z'(M_1 - M_1X(X'M_1X)^-X'M_1)Z) = \text{rk}(Z'M_1Z) = \text{rk}(V_1) = t, \quad (3.11)$$

由 (3.9) 和 (3.11) 得

$$\hat{\sigma}_1^2 = \frac{1}{\text{tr}V_1} \left(\sum_{j=1}^g u'A_ju - \frac{t}{q-t} u'A_0u \right) = \frac{1}{\lambda_1 r_1} (u'Z'M_1Zu - \frac{r_1}{r_0} u'Z'M_0Zu) = \tilde{\sigma}_1^2.$$

推论 3.1 在模型 (1.1) 下, $\tilde{\sigma}_1^2 = \hat{\sigma}_1^2 \iff Z'M_1X = 0 \iff Z'M_0X = 0$.

推论 3.2 在模型 (1.1) 下, $\tilde{\sigma}_1^2 = \hat{\sigma}_1^2 \iff N_X M_1 X = 0 \iff N_X M_0 X = 0$.

注意到 $Z'M_1ZZ'M_1Z = Z'M_1(I - P_X)M_1Z = Z'M_1Z - Z'M_1P_XM_1Z$ 及 M, M_1, Z 的性质, 以上两推论易证.

推论 3.3 在模型 (1.1) 下, $\tilde{\sigma}_1^2 = \hat{\sigma}_1^2 \iff P_X P_U = P_U P_X$.

证明 由引理 3.1 和推论 3.2, 只需证明 $N_X M_1 X = 0 \iff P_X M_1 = M_1 P_X$.

“ \Rightarrow ” $N_X M_1 X = 0 \Rightarrow (I - P_X)M_1 P_X = 0 \Rightarrow M_1 P_X = P_X M_1 P_X \Rightarrow M_1 P_X = P_X M_1 - P_X M_1 N_X \Rightarrow P_X M_1 = M_1 P_X$.

“ \Leftarrow ” 若 $P_X M_1 = M_1 P_X$, 则 $N_X M_1 = M_1 N_X$, 因而 $N_X M_1 X = M_1 N_X X = 0$. \square

注 3.1 由推论 3.3 和文献 [1, p202] 的推论 5.5.2 知, 模型 (1.1) 下方差分量 σ_1^2 的 SDE 和 ANOVAE 相等的充分必要条件恰是固定效应的可估函数的 LSE 为 BLUE 的充分必要条件.

例 3.1 考虑无交互效应的两向分类混合模型

$$y_{ij} = \mu + \beta_i + \alpha_j + \varepsilon_{ij} \quad (i = 1, \dots, a, j = 1, \dots, b), \quad (3.12)$$

这里 μ 和 β_i 为固定效应, α_j 和 ε_{ij} 为随机效应, α_j 和 ε_{ij} 互不相关且均值都为 0, $\text{Var}(\alpha_j) = \sigma_\alpha^2$, $\text{Var}(\varepsilon_{ij}) = \sigma_\varepsilon^2$. 下文中, \otimes 表示 Kronecker 乘积, $\mathbf{1}_a$ 表示所有元素皆为 1 的 a 维列向量, 记

$$\mathbf{y} = (y_{11}, \dots, y_{1b}, y_{21}, \dots, y_{2b}, \dots, y_{ab})', \quad \boldsymbol{\varepsilon} = (\varepsilon_{11}, \dots, \varepsilon_{1b}, \varepsilon_{21}, \dots, \varepsilon_{2b}, \dots, \varepsilon_{ab})'$$

$$\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_a)', \quad \boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_b)', \quad \mathbf{J}_a = \mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}'_a, \quad \bar{\mathbf{J}}_a = 1/a \mathbf{J}_a.$$

模型 (3.12) 用矩阵表示为

$$y = (\mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}_b)\mu + (I_a \otimes \mathbf{1}_b)\beta + (\mathbf{1}_a \otimes I_b)\alpha + \varepsilon.$$

观测向量的协方差阵为

$$\text{Cov}(y) = \sigma_\varepsilon^2 I + \sigma_\alpha^2 (\mathbf{J}_a \otimes I_b),$$

容易验证此模型满足本文所讨论模型的条件, 对应的 X , U 和 M_1 分别为

$$X = (\mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}_b : I_a \otimes \mathbf{1}_b), \quad U = (\mathbf{1}_a \otimes I_b), \quad M_1 = \bar{\mathbf{J}}_a \otimes I_b,$$

经验证

$$\begin{aligned} N_X M_1 X &= (I_a \otimes (I_b - \bar{\mathbf{J}}_b))(\bar{\mathbf{J}}_a \otimes I_b)(\mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}_b : I_a \otimes \mathbf{1}_b) \\ &= (\bar{\mathbf{J}}_a \otimes (I_b - \bar{\mathbf{J}}_b))(\mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}_b : I_a \otimes \mathbf{1}_b) = 0, \end{aligned}$$

因此, 模型 (3.12) 满足推论 3.2 的条件, 故 σ_ε^2 和 σ_α^2 的 SDE 和 ANOVAE 相等, 分别为

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_\varepsilon^2 = \tilde{\sigma}_\varepsilon^2 &= \frac{1}{(a-1)(b-1)} y'(I_a - \bar{\mathbf{J}}_a) \otimes (I_b - \bar{\mathbf{J}}_b) y = \frac{1}{(a-1)(b-1)} \sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{.j} + \bar{y}_{..})^2, \\ \hat{\sigma}_\alpha^2 = \tilde{\sigma}_\alpha^2 &= \frac{1}{a(b-1)} (y' \bar{\mathbf{J}}_a \otimes (I_b - \bar{\mathbf{J}}_b) y - \frac{1}{(a-1)} y'(I_a - \bar{\mathbf{J}}_a) \otimes (I_b - \bar{\mathbf{J}}_b) y) \\ &= \frac{1}{a(b-1)} \left(\sum_j (\bar{y}_{.j} - \bar{y}_{..})^2 - \frac{1}{(a-1)} \sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{.j} + \bar{y}_{..})^2 \right). \end{aligned}$$

这里,

$$\bar{y}_{..} = \frac{1}{ab} \sum_i \sum_j y_{ij}, \quad \bar{y}_{i.} = \frac{1}{b} \sum_j y_{ij}, \quad \bar{y}_{.j} = \frac{1}{a} \sum_i y_{ij}, \quad i = 1, \dots, a, \quad j = 1, \dots, b.$$

例 3.2 仍考虑无交互效应的两向分类混合模型 (3.12), 但本例中我们假设 μ 和 α_j 为固定效应, β_i 和 ε_{ij} 为随机效应, β_i 和 ε_{ij} 互不相关且均值都为 0, $\text{Var}(\beta_i) = \sigma_\beta^2$, $\text{Var}(\varepsilon_{ij}) = \sigma_\varepsilon^2$. 我们称此模型为模型 (3.13).

不难验证模型 (3.13) 也满足本文所讨论模型的条件, 对应的 X , U 和 M_1 分别为

$$X = (\mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}_b : \mathbf{1}_a \otimes I_b), \quad U = (I_a \otimes \mathbf{1}_b), \quad M_1 = I_a \otimes \bar{\mathbf{J}}_b, \quad Q_X = (I_a - \bar{\mathbf{J}}_a) \otimes I_b.$$

经验证

$$\begin{aligned} N_X M_1 X &= ((I_a - \bar{\mathbf{J}}_a) \otimes I_b)(I_a \otimes \bar{\mathbf{J}}_b)(\mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}_b : \mathbf{1}_a \otimes I_b) \\ &= ((I_a - \bar{\mathbf{J}}_a) \otimes \bar{\mathbf{J}}_b)(\mathbf{1}_a \otimes \mathbf{1}_b : \mathbf{1}_a \otimes I_b) = 0. \end{aligned}$$

因此, 模型 (3.13) 也满足推论 3.2 的条件, 故 σ_ε^2 和 σ_β^2 的 SDE 和 ANOVAE 相等, 分别为

$$\hat{\sigma}_\varepsilon^2 = \tilde{\sigma}_\varepsilon^2 = \frac{1}{(a-1)(b-1)} y'(I_a - \bar{\mathbf{J}}_a) \otimes (I_b - \bar{\mathbf{J}}_b) y = \frac{1}{(a-1)(b-1)} \sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{.j} + \bar{y}_{..})^2,$$

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_\beta^2 &= \tilde{\sigma}_\beta^2 = \frac{1}{b(a-1)}(y'(I - \bar{\mathbf{J}}_a) \otimes \bar{\mathbf{J}}_b y - \frac{1}{(b-1)}y'(I_a - \bar{\mathbf{J}}_a) \otimes (I_b - \bar{\mathbf{J}}_b)y) \\ &= \frac{1}{b(a-1)}\left(\sum_i (\bar{y}_{i.} - \bar{y}_{..})^2 - \frac{1}{(b-1)}\sum_i \sum_j (y_{ij} - \bar{y}_{i.} - \bar{y}_{.j} + \bar{y}_{..})^2\right).\end{aligned}$$

这里, $\bar{y}_{..}$, $\bar{y}_{i.}$, $\bar{y}_{.j}$ ($i = 1, \dots, a$, $j = 1, \dots, b$) 的定义同上例.

定理 3.3 若 $Z'M_1Z$ 为幂等阵, 则谱分解估计 $\tilde{\sigma}^2$ 和 $\tilde{\sigma}_1^2$ 分别为 σ^2 和 σ_1^2 的 UMVUE.

证明 在模型 (1.1) 下, y 的密度函数为

$$\begin{aligned}f(y) &= (2\pi)^{-\frac{n}{2}}|\sigma^2 I + \sigma_1^2 UU'|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(y - X\beta)'(\sigma^2 I + \sigma_1^2 UU')^{-1}(y - X\beta)\right\} \\ &= (2\pi)^{-\frac{n}{2}}|\sigma^2 I + \sigma_1^2 UU'|^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(y - X\beta)'\left(\frac{1}{\sigma^2}M_0 + \frac{1}{\sigma^2 + \lambda_1\sigma_1^2}M_1\right)(y - X\beta)\right\} \\ &= h(\beta, \theta) \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}y'M_0y - \frac{1}{2(\sigma^2 + \lambda_1\sigma_1^2)}y'M_1y + \frac{1}{\sigma^2}\beta'X'M_0y + \frac{1}{\sigma^2 + \lambda_1\sigma_1^2}\beta'X'M_1y\right\}\end{aligned}$$

这里 $h(\beta, \theta)$ 与变量 y 无关. 因为 $Z'M_1Z$ 为幂等阵, 所以

$$f(y) = h(\beta, \theta) \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2}y'M_0y - \frac{1}{2(\sigma^2 + \lambda_1\sigma_1^2)}y'M_1y + ((X'X)^{-1}X'(\sigma^2 I + \sigma_1^2 UU')^{-1}X\beta)'X'y\right\}$$

设

$$\Theta = \{(\theta'_1, \theta_2, \theta_3)'\} : \beta \in \mathbf{R}^p, \sigma_1^2 \geq 0, \sigma^2 > 0\},$$

其中,

$$\theta_1 = (X'X)^{-1}X'(\sigma^2 I + \sigma_1^2 UU')^{-1}X\beta, \quad \theta_2 = -\frac{1}{2\sigma^2}, \quad \theta_3 = -\frac{1}{2(\sigma^2 + \lambda_1\sigma_1^2)}.$$

对给定的 σ^2 , σ_1^2 (θ_1, θ_2 随之给定), 矩阵 $(X'X)^{-1}X'(\sigma^2 I + \sigma_1^2 UU')^{-1}X$ 非奇异, 故当 β 取遍 \mathbf{R}^p 时, θ_1 也取遍 \mathbf{R}^p . 因此 $\mathbf{R}^p \otimes (\theta_2, \theta_3)' \in \Theta$. 进一步, $\Theta = \mathbf{R}^p \otimes \Delta$, 其中 $\Delta = \{(\theta_2, \theta_3)'\} : \sigma_1^2 \geq 0, \sigma^2 > 0\}$, 显然 Δ 必存在非空子集为开集, 因此 Θ 存在非空子集为开集, 于是由文献 [7] 定理 1.6.1 得 $\{y'M_0y, y'M_1y, X'y\}$ 为 (β', θ') 的完全充分统计量. 又因

$$\tilde{\sigma}^2 = \frac{1}{r_0}(y'M_0y - y'X(X'X)^{-1}X'M_0X(X'X)^{-1}X'y)$$

$$\tilde{\sigma}_1^2 = \frac{1}{\lambda_1}\left\{\frac{1}{r_1}(y'M_1y - y'X(X'X)^{-1}X'M_1X(X'X)^{-1}X'y) - \tilde{\sigma}^2\right\}$$

即谱分解估计 $\tilde{\sigma}^2$ 和 $\tilde{\sigma}_1^2$ 分别可以表示为完全充分统计量的函数, 故由文献 [7] 定理 2.1.1 得证 $\tilde{\sigma}^2$ 和 $\tilde{\sigma}_1^2$ 分别为 σ^2 和 σ_1^2 的 UMVUE. \square

参考文献:

- [1] WANG Song-gui, CHOW S C. *Advanced Linear Models* [M]. Marcel Dekker Inc., New York. 1994.
- [2] 王松桂, 尹素菊. 线性混合模型参数的一种新估计 [J]. 中国科学 (A 辑), 2002, 32(5): 434-443.
WANG Song-gui, YIN Su-ju. A new estimate of the parameters in linear mixed models [J]. Sci. China Ser. A, 2002, 32(5): 434-443. (in Chinese)

- [3] MATHEW T, SINHA B K. *Nonnegative estimation of variance components in unbalanced mixed model with two variance components* [J]. J. Multivariate Anal., 1992, **42**: 77–101.
- [4] KELLY R J, MATHEW T. *Improved estimators of variance components with smaller probability of negativity* [J]. J. Roy. Statist. Soc. Ser. B, 1993, **55**: 897–911.
- [5] 王松桂, 杨振海. 广义逆矩阵及其应用 [M]. 北京: 北京工业大学出版社, 1996.
WANG Song-gui, YANG Zhen-hai. *Generalized Inverse for Matrices and Its Applications* [M]. Beijing: Beijing University of Technology Press, 1996. (in Chinese)
- [6] SEARLE S R. *Linear Models* [M]. John Wiley & Sons, New York, 1971.
- [7] 陈希孺. 数理统计引论 [M]. 北京: 科学出版社, 1997.
CHEN Xi-ru. *An Introduction to Statistics* [M]. Beijing: Science Press, 1997. (in Chinese)

On Spectral Decomposition Estimate for a Class of Linear Mixed Models

SHI Jian-hong¹, WANG Song-gui²

(1. College of Math. & Comp. Sci., Shanxi Normal University, Linfen 041004, China;

2. College of Appl. Math., Beijing University of Technology, Beijing 100022, China)

Abstract: The spectral decomposition estimate (SDE) proposed by Wang and Yin^[2] is a new method of simultaneously estimating fixed effects and variance components in linear mixed models. In this paper, we further study the properties of SDE under linear mixed models with two variance components. We get the necessary and sufficient condition for the equality of the analysis of variance estimate and the SDE of variance components, and show that the SDE of variance components is a uniformly minimum variance unbiased estimate under some conditions.

Key words: linear mixed model; variance components; SDE; ANOVAE.