

Züchtungslehre - Varianzkomponentenschätzung - Teil 2

Peter von Rohr

2017-12-01

Varianzanalyse

- ▶ Erwartungswerte von Summenquadraten sind Funktionen von Varianzkomponenten
- ▶ Negative Schätzwerte aufgrund von Datenkonstellationen
- ▶ keine Konsistenz, d.h. bei steigenden Datenmengen keine Steigerung der Qualität
- ▶ keine Berücksichtigung der Verteilung der Daten

Likelihood

- ▶ Anpassung einer Verteilung an die Daten
- ▶ Verteilungsparameter sollen so geschätzt werden, dass Verteilung “optimal” zu Daten passt
- ▶ Als Kriterium dient die **Likelihood** L
- ▶ Definition

$$L(\theta) = f(y|\theta)$$

Maximierung der Likelihood

- ▶ Nach Beobachtung der Daten ist y fix gegeben
- ▶ Deshalb wird L als Funktion der Parameter θ aufgefasst
- ▶ **Ziel:** finde Parameter θ , so dass L möglichst gut zu beobachteten Daten passt
- ▶ Umsetzung: Maximierung von L im Bezug auf θ , setze θ beim Maximum von L als Schätzwert

$$\hat{\theta}_{ML} = \operatorname{argmax}_{\theta} L(\theta)$$

Beispiel

- ▶ Regressionmodell

$$y = Xb + e$$

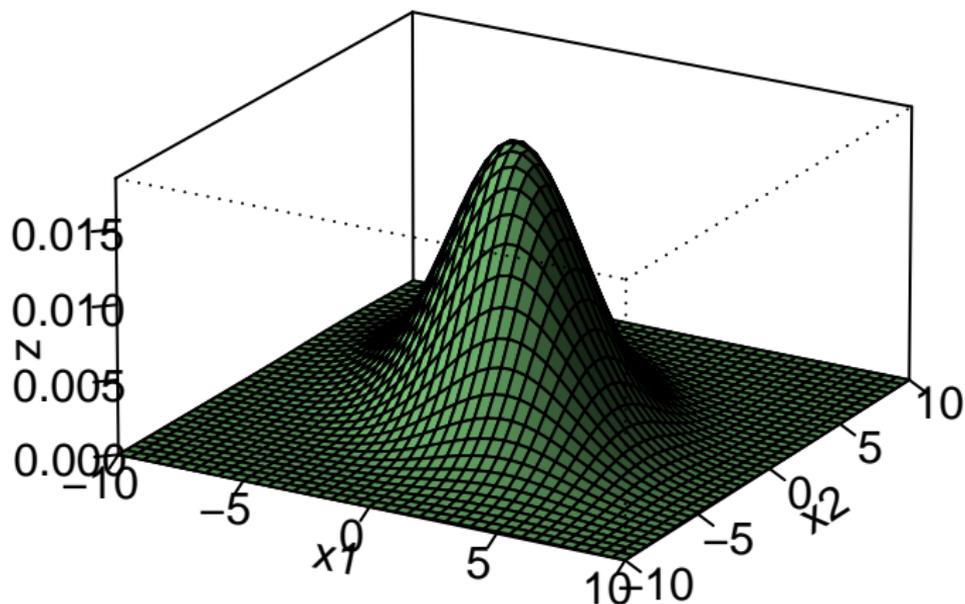
- ▶ Ziel: Schätzung der Restvarianz σ^2 mit ML
- ▶ Annahme: Beobachtungen sind normalverteilt

$$f_Y(y|b, \sigma^2) = (2\pi\sigma^2)^{-n/2} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(y - Xb)^T (y - Xb)\right)$$

Multivariate Normalverteilung

Two dimensional Normal Distribution

$$\mu_1 = 0, \mu_2 = 0, \sigma_{11} = 10, \sigma_{22} = 10, \sigma_{12} = 15, \rho = 0.5$$



Parameter

- ▶ Für unser Beispiel sind b und σ^2 unbekannte Parameter
- ▶ Schätzung für b : Maximierung von L im Bezug auf b
- ▶ Schätzung für σ^2 : Maximierung von L im Bezug auf σ^2
- ▶ Maximierung von L :
 - ▶ Partielle Ableitung
 - ▶ Ableitung 0 setzen
 - ▶ nach gesuchtem Parameter auflösen
- ▶ Vorbereitung: Transformation von L zu l , wobei

$$l(\theta) = \log(L(\theta))$$

ML Schätzung für b

- ▶ Transformation

$$\begin{aligned}l(b, \sigma^2) &= \log(L(b, \sigma^2)) \\ &= -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log(\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} (y - Xb)^T (y - Xb)\end{aligned}$$

- ▶ Partielle Ableitung:

$$\begin{aligned}\frac{\partial l(b, \sigma^2)}{\partial b} &= -\frac{1}{2\sigma^2} (-(y^T X)^T - X^T y + 2X^T Xb) \\ &= -\frac{1}{2\sigma^2} (-2X^T y + 2X^T Xb)\end{aligned}\tag{1}$$

Bestimmung von \hat{b}_{ML}

- ▶ Nullstelle der Ableitung

$$-\frac{1}{2\sigma^2}(-2X^T y + 2X^T X b) = 0$$

- ▶ Normalgleichung

$$X^T y = X^T X \hat{b}$$

- ▶ Resultat ist gleich wie bei LS

$$\hat{b} = (X^T X)^{-1} X^T y$$

ML Schätzung für σ^2

- ▶ Analoges Vorgehen wie bei b
- ▶ Partielle Ableitung von l nach σ^2

$$\frac{\partial l(b, \sigma^2)}{\partial \sigma^2} = -\frac{n}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4}(y - Xb)^T (y - Xb) \quad (2)$$

- ▶ Vorausgesetzt, $\sigma^2 \neq 0$

$$\frac{1}{\hat{\sigma}^2}(y - Xb)^T (y - Xb) - n = 0$$

- ▶ Nullstelle der Ableitung

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n}(y - Xb)^T (y - Xb) \quad (3)$$

Bestimmung von $\hat{\sigma}^2$

- ▶ Da b unbekannt, wird \hat{b}_{ML} eingesetzt
- ▶ In Summennotation:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - x_i^T \hat{b})^2 \quad (4)$$

- ▶ Schätzung aufgrund der Residuen

$$\hat{\sigma}_{Res}^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^n r_i^2 \quad (5)$$

- ▶ Somit $E[\hat{\sigma}_{ML}^2] \neq \sigma^2$

Lineares gemischtes Modell

- ▶ Gleiches Vorgehen
- ▶ Modell

$$y = Xb + Zu + e \quad (6)$$

$$\text{var}(e) = R = I * \sigma_e^2$$

$$\text{var}(u) = G.$$

$$E[e] = 0 \text{ und } E[u] = 0$$

$$E[y] = Xb \text{ und } \text{var}(y) = V$$

$$y \sim \mathcal{N}(Xb, V)$$

ML-Schätzung

- ▶ Log-Likelihood

$$l(b, V) = \log(L(b, V)) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \log(\det(V)) - \frac{1}{2} (y - Xb)^T V^{-1} (y - Xb)$$

- ▶ Partielle Ableitungen bilden

$$\frac{\partial l(b, V)}{\partial b}$$

$$\frac{\partial l(b, V)}{\partial \sigma^2}$$

- ▶ Nullstellen finden
- ▶ Schätzer bestimmen

Restricted (Residual) Maximum Likelihood (REML)

- ▶ ML-Schätzer für Varianzkomponenten nicht erwartungstreu
- ▶ Problem: gleichzeitiges Schätzen von fixen Effekten, was bei Schätzung von σ^2 nicht berücksichtigt
- ▶ Lösung:
 - ▶ vorgängige transformation von y zu $\tilde{y} = Ky$, so dass gilt $E[\tilde{y}] = 0$
 - ▶ dann gleiches Vorgehen mit $l(\theta) = f(\tilde{y}|\theta)$
- ▶ Resultat entspricht **REML**-Schätzung, wobei $\hat{\sigma}_{REML}^2$ erwartungstreu