应用概率统计　第二十二卷
第三期　2006 年 8 月

Chinese Journal of Applied Probability
and Statistics Vol. 22 No. 3 Aug. 2006

线性混合效应模型参数的谱分解估计

王　松　桂
(北京工业大学应用数理学院，北京，　100022)

摘　要

本文综述混合效应模型参数估计方面的若干新进展．平衡混合效应方差分析模型的协方差阵具有一定结构．对这类模型，文献 [1] 提出了参数估计的一种新方法，称为谱分解法．新方法的突出特点是，能同时给出固定效应和方差分量的估计，前者是线性的，后者是二次的，且相互独立．而后，文献 [2–9] 证明了谱分解估计的进一步的统计性质，同时给出了协方差阵对应的估计，它不仅是正定阵，而且可获得它的风险函数，这些文献还研究了谱分解估计与方差分析估计，极大似然估计，限制极大似然估计以及最小范数二次无偏估计的关系．本文综述这一方向的部分研究成果，并提出一些待进一步研究的问题．

关 键 词：混合效应模型，方差分量，谱分解估计，极大似然估计，方差分析估计．
学 科 分 类 号：O212.4, O211.4.

§1.　引　　言

考虑一般的线性混合模型 [10,11,12]

$$y = X\beta + \sum_{i=1}^{k} U_i\xi_i + e, \tag{1.1}$$

这里，y 为 $n\times 1$ 观测向量，X 为 $n\times p$ 设计矩阵，β 为固定效应，ξ_i 为随机效应，U_i 为 $n\times t_i$ 的已知的设计矩阵，e 为随机误差．为简单计，记 $e=\xi_{k+1}$, 相应地 $U_{k+1}=I_n$. 假定 $\mathsf{E}(\xi_i)=0$, $\mathsf{Cov}\,(\xi_i)=\sigma_i^2 I_{t_i}$, $i=1,\cdots,k+1$, $\mathsf{Cov}\,(\xi_i,\xi_j)=0$ $(i\neq j)$, 则 y 的协方差阵为

$$\mathsf{Cov}\,(y) = \sum_{i=1}^{k+1}\sigma_i^2 U_i U_i' \triangleq \Sigma(\sigma^2), \tag{1.2}$$

其中 $\sigma^2=(\sigma_1^2,\cdots,\sigma_k^2,\sigma_{k+1}^2)'$ 被称为方差分量，且 σ^2 参数空间为

$$\Omega = \{\sigma^2 : \sigma_i^2 \geq 0, i=1,\cdots,k, \sigma_{k+1}^2 > 0\}.$$

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) (见文献 [10, 11]). 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．对于 MINQUE, 它需要对方差分量选取初始值，因而有一定的主观性．关于这些的性质，目前得到的结果还不多．于是迄今为止，对于方差分量，无论从理论上还是从应用上，还没有一个令人满意的估计．

本文 2006 年 3 月 1 日收到.

文献 [1] 提出谱分解估计 (Spectral Decomposition estimate, SDE) 的基本思想是：首先对协方差阵进行进行谱分解，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，它们都是具有一些好的统计性质的线性估计．因此，利用这些估计可以对模型做进一步的统计推断．

具体来说，对于任一线性混合模型，如果 y 的协方差阵 $\Sigma(\sigma^2)$ 有如下谱分解

$$\Sigma(\sigma^2)=\sum_{i=1}^{q}\lambda_i M_i, \tag{1.3}$$

这里 λ_i, $i=1,\cdots,q$ 是 $\Sigma(\sigma^2)$ 的所有互异非零特征根，它们是 σ^2 线性函数， M_i 是特征根 λ_i 对应的主幂等阵 (即 $M_i^2=M_i$, $M_iM_j=0$, $i\neq j$, $\sum\limits_{i=1}^{q}M_i=I$), 且独立于未知参数．我们分别用幂等阵 M_i $(i=1,\cdots,q)$ 左乘模型 (1.1), 于是得到变换后的 q 个新模型

$$M_iy=M_iX\beta+\varepsilon_i,\qquad \varepsilon_i\sim(0,\lambda_iM_i),\ \ i=1,2,\cdots,q, \tag{1.4}$$

这些模型的特点是，模型协方差阵除 λ_i 之外，独立于未知参数．因为 M_i 是奇异阵，我们可以应用最小二乘统一理论获得原模型参数 (固定效应和方差分量) 的估计，称为谱分解估计．这里有如下重要问题需要研究．

(1) 对怎样的线性混合模型，它的协方差阵能够有形如 (1.3) 的谱分解．

(2) 谱分解估计有哪些统计性质．

(3) 谱分解估计与文献中已有的估计，如 ANOVAE, MLE, REMLE, MINQUE 的关系．

本文的目的是综述在上述诸方面的最新研究成果，并提出一些尚未解决的问题．

§2. 协方差阵的谱分解

协方差阵的谱分解有多方面的应用．一方面，方差分量的谱分解估计就是以协方差阵 $\Sigma(\sigma^2)$ 的谱分解式为基础构造的；另一方面，从 $\Sigma(\sigma^2)$ 的谱分解式，可以直接获得 $\Sigma(\sigma^2)$ 的逆矩阵和行列式，而这些恰是利用极大似然方法求解方差分量的极大似然估计所必需的．许多文献研究了平衡方差分量模型协方差阵的谱分解．目前文献中已有两种谱分解算法．一种是由 Smith 和 Hocking[13] 提出的，他们基于随机效应模型，给出了谱分解的公式，并将它推广到一般的混合模型的情形．另一种算法是由 Searle 和 Henderson[14] 提出的．该算法没有利用模型随机效应设计阵 $U_1,\cdots,U_k$ 之间的某些关系，而是基于对 $\Sigma(\sigma^2)$ 扩充很多项的方法，给出了一般形式的谱分解公式．随后不久，协方差阵的谱分解又被应用到统计的其他方面，如， Khuri[15] 将这些结果应用到方差分析方法中，解决了平衡混合效应方差分析模型的平方和分解问题．Searle 和 Henderson 的方法在 $\Sigma(\sigma^2)$ 的表达式中添加的项往往比较多，且这些添加项都要参与运算，故此方法运算量大．另外， Searle 和 Henderson 的谱分解方法仅是一种算法，没有给出直接确定

$\Sigma(\sigma^2)$ 的互异特征值的个数以及互异特征值与方差分量 σ^2 的线性关系的方法，这无助于研究一般平衡线性混合模型的估计的性质．因为许多问题都和协方差矩阵的互异特征值个数有关．例如估计的存在性和唯一性问题，极大似然估计的显式解存在性问题等等．最近，吴密霞 [2], 吴密霞和王松桂 [3] 就一类模型研究了协方差矩阵的谱分解，互异特征值个数的确定及求解问题．史建红在他的博士论文 [4] 中把 [2,3] 中的结果推广到一般平衡混合效应方差分析模型．后来，尹素菊在她的博士论文 [5] 对一般平衡混合效应方差分析模型，引进了"层"的概念，把这种模型协方差矩阵的谱分解方法进一步简化和推广．

本节将概述这些文献关于平衡混合效应方差分析模型的协方差阵的谱分解的部分结果．所谓平衡混合效应方差分析模型，它的随机效应的设计阵 U_i 可表为如下形式：

$$U_i = \mathbf{1}_{n_p}^{t_{i1}} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}_{n_1}^{t_{ip}}, \qquad i = 1, \cdots, k+1, \tag{2.1}$$

其中 $\otimes$ 表示 Kronecker 乘积， $\mathbf{1}_b = (1, \cdots, 1)'$, $t_{ij} = 0$ or 1, $j = 1, \cdots, p$. 记 $(\mathbf{1}_b)^0 = I_b$. 这里 I_a 表示 a 阶单位阵．于是对应的协方差阵有如下一般形式．

$$\Sigma(\sigma^2) = \sum_{i=1}^{k+1} \sigma_i^2 (J_{n_p}^{t_{i1}} \otimes \cdots \otimes J_{n_1}^{t_{ip}}), \tag{2.2}$$

这里 $J_b = \mathbf{1}_b \mathbf{1}_b'$, $(J_b)^0 = I_b$.

下面我们先给出两个常见模型，并用上述形式表示它们的随机效应的设计阵 U_i 和协方差阵．

例 2.1 两向分类 (有交互效应) 的随机模型

$$y_{ijk} = \mu + \alpha_i + \beta_j + \gamma_{ij} + \varepsilon_{ijk}, \qquad i = 1, \cdots, a, \; j = 1, \cdots, b, \; k = 1, \cdots, c,$$

这里， μ 为总平均， $\alpha_i \sim (0, \sigma_\alpha^2)$, $\beta_j \sim (0, \sigma_\beta^2)$, $\gamma_{ij} \sim (0, \sigma_\gamma^2)$, $\varepsilon_{ijk} \sim (0, \sigma_\varepsilon^2)$, 且所有的 $\alpha_i, \beta_j, \gamma_{ij}, e_{ijk}$ 都相互独立．

$$U_1 = I_a \otimes \mathbf{1}_b \otimes \mathbf{1}_c, \qquad U_2 = \mathbf{1}_a \otimes I_b \otimes \mathbf{1}_c, \qquad U_3 = I_a \otimes I_b \otimes \mathbf{1}_c, \qquad U_4 = I_a \otimes I_b \otimes I_c = I_{abc},$$

则 $y = (y_{111}, \cdots, y_{11c}, \cdots, y_{ab1}, \cdots, y_{abc})'$ 的协方差阵为

$$\Sigma_1 = \sigma_\varepsilon^2 (I_a \otimes I_b \otimes I_c) + \sigma_\gamma^2 (I_a \otimes I_b \otimes J_c) + \sigma_\alpha^2 (I_a \otimes J_b \otimes J_c) + \sigma_\beta^2 (J_a \otimes I_b \otimes J_c).$$

例 2.2 含两个随机效应的 Panel 数据模型

$$y_{ij} = \alpha + X_{ij}'\beta + \mu_i + \nu_j + \varepsilon_{ij}, \qquad i = 1, \cdots, l, \; j = 1, \cdots, t,$$

这里， α 和 β 都为非随机， μ_i 表示个体效应， ν_j 表示时间效应， μ_i 和 ν_j 皆为随机效应．假设 $\mu_i \sim (0, \sigma_\mu^2)$, $\nu_j \sim (0, \sigma_\nu^2)$, $\varepsilon_{ij} \sim (0, \sigma_\varepsilon^2)$, 且相互独立．

$$U_1 = I_l \otimes \mathbf{1}_t, \qquad U_2 = \mathbf{1}_l \otimes I_t, \qquad U_3 = I_l \otimes I_t = I_{nt},$$

则 $y = (y_{11}, \cdots, y_{1t}, \cdots, y_{l1}, \cdots, y_{lt})'$ 的协方差阵为

$$\Sigma_2 = \sigma_\varepsilon^2 (I_l \otimes I_t) + \sigma_\mu^2 (I_l \otimes J_t) + \sigma_\nu^2 (J_l \otimes I_t).$$

文献 [2, 3] 给出设计阵 $\{U_1,\cdots,U_{k+1}\}$ 一种新序. 事实上, 这种新序与文献中常采用的随机效应的 $\xi_1,\cdots,\xi_k$ 的习惯排序是一致的. 例如, 对随机模型, 我们习惯于先排总体均值, 接下来是随机因子的主效应, 然后是其交互效应 (或套效应), 最后为随机误差. 基于这种序, 文献 [2, 3] 提出了一般衡混合效应方差分析模型协方差阵新的谱分解方法. 此方法的突出特点是能够明确给出 $\Sigma(\sigma^2)$ 的不同特征值的个数, 以及谱分解中主幂等阵与模型随机效应设计阵 $U_1,\cdots,U_{k+1}$ 之间的关系, 这将对 ANOVAE, MLE, REMLE 以及 SDE 进一步性质的研究提供更有力的工具.

令 $P_A=A(A'A)^-A'$, 即子空间 $\mathcal{M}(A)$ 上的正交投影阵, 这里 $\mathcal{M}(A)$ 表示由矩阵 A 的列向量张成的子空间.

我们构造一组正交投影阵

$$\begin{aligned} &M_i=P_{(U_1:\cdots:U_{i-1}:U_i)}-P_{(U_1:\cdots:U_{i-1})}, \qquad i=2,\cdots,k+1,\\ &M_1=P_{U_1}-P_{U_0}, \qquad M_0=P_{U_0}=\overline{J}_n. \end{aligned} \tag{2.3}$$

显然, $M_iM_j=0\ (i\neq j)$, $\sum\limits_{i=0}^{k+1}M_i=I_n$. 因此 $\{M_0,M_1,\cdots,M_{k+1}\}$ 是一个正交投影的完全集.

记 $\mathcal{D}_0=\{P_{U_0},P_{U_1},\cdots,P_{U_{k+1}}\}$. 若 $P_{U_i}P_{U_j}\in\mathcal{D}_0$, $0\le i,\ j\le k+1$, 则称 $\mathcal{D}_0$ 是封闭的.

定理 2.1[2,3] 对平衡混合效应方差分析模型 (1.1), 若 $\mathcal{D}_0$ 是封闭的, 则 $\Sigma(\sigma^2)$ 的谱分解为

$$\Sigma(\sigma^2)=\sum_{i=0}^{k+1}\lambda_iM_i, \tag{2.4}$$

这里 M_i 如 (2.3) 所定义,

$$\lambda_0=\sum_{i=1}^{k+1}c_i\sigma_i^2, \qquad \lambda_i=\sum_{j=i}^{k+1}c_j\sigma_j^2r_{ij}, \qquad i=1,\cdots,k+1 \tag{2.5}$$

是 $\Sigma(\sigma^2)$ 的 $k+2$ 个 (不同) 的特征值, 重数分别为 1, $r_1=\mathrm{tr}(M_1),\cdots,r_{k+1}=\mathrm{tr}(M_{k+1})$, 其中

$$r_{ij}=\begin{cases}1, & \text{当 } P_{U_i}P_{U_j}=P_{U_i},\\ 0, & \text{其它}.\end{cases} \tag{2.6}$$

这里 $c_i=\prod\limits_{l=1}^{p}n_l^{t_{il}}$. 记 $\lambda=(\lambda_1,\cdots,\lambda_{k+1})'$, $H=(h_{ij})$, 其中 $h_{ij}=c_jr_{ij}$, 若 $j\ge i$; 不然 $h_{ij}=0$. 显然 H 是一个可逆上三角阵, λ 和 σ^2 有关系

$$\lambda=H\sigma^2, \qquad \sigma^2=H^{-1}\lambda, \qquad \lambda_0=c'H^{-1}\lambda, \tag{2.7}$$

这里 $c=(c_1,\cdots,c_{k+1})$.

记 $\mathcal{D}=\{P_{U_1},\cdots,P_{U_{k+1}}\}$, 则 $\mathcal{D}_0$ 封闭且 $\lambda_0=\lambda_1$ 就等价于 $\mathcal{D}$ 封闭.

推论 2.1 对平衡混合效应方差分析模型 (1.1), 若 $\mathcal{D}$ 是封闭的, 则协方差阵 $\Sigma(\sigma^2)$ 只有 $k+1$ 个不同特征根, 且其谱分解为

$$\Sigma(\sigma^2)=\sum_{i=2}^{k+1}\lambda_iM_i+\lambda_1P_{U_1}, \tag{2.8}$$

这里特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{k+1}$ 的定义同前, 其重数分别为 $1+r_1,r_2,\cdots,r_{k+1}$.

对一些常见的平衡混合效应方差分析模型，集合 $\mathcal{D}_0$ 关于矩阵乘积是封闭的，如一般的随机效应模型，随机效应部分为一般多项分类平衡数据模型的线性混合模型，以及模型中不存在两个随机因子同时与同一固定因子有交互效应的混合模型．

例 2.3　对例 2.1 讨论的带交互效应两向分类随机模型， $p=3$, $n_3=a$, $n_2=b$, $n_1=c$, $n=abc$,

$$P_{U_1}=I_a\otimes\overline{J}_b\otimes\overline{J}_c,\qquad P_{U_2}=\overline{J}_a\otimes I_b\otimes\overline{J}_c,\qquad P_{U_3}=I_a\otimes I_b\otimes\overline{J}_c,\qquad P_{U_4}=I_n,$$

且

$$\begin{aligned}
M_1&=P_{U_1}-\overline{J}_n=(I_a-\overline{J}_a)\otimes\overline{J}_b\otimes\overline{J}_c,\\
M_2&=(I-P_{U_1})P_{U_2}=\overline{J}_a\otimes(I_b-\overline{J}_b)\otimes\overline{J}_c,\\
M_3&=(I-M_2-P_{U_1})P_{U_3}=(I_a-\overline{J}_a)\otimes(I_b-\overline{J}_b)\otimes\overline{J}_c,\\
M_4&=I-M_3-M_2-P_{U_1}=I_a\otimes\overline{J}_b\otimes(I_c-\overline{J}_c).
\end{aligned}$$

这里 $\overline{J}_b=J/b$. 显然

$$P_{U_1}P_{U_2}=\overline{J}_n=P_{U_0},\qquad P_{U_1}P_{U_3}=P_{U_1},\qquad P_{U_2}P_{U_3}=P_{U_2},$$

这时 $\mathcal{D}$ 关于矩阵乘积是不封闭的，而 $\mathcal{D}_0$ 封闭．由定理 2.1, $\Sigma(\sigma^2)$ 的全部不同的特征值为

$$\begin{aligned}
\lambda_0&=bc\sigma_\alpha^2+ac\sigma_\beta^2+c\sigma_\gamma^2+\sigma_e^2,\\
\lambda_1&=bc\sigma_\alpha^2+c\sigma_\gamma^2+\sigma_e^2,\\
\lambda_2&=ac\sigma_\beta^2+c\sigma_\gamma^2+\sigma_e^2,\\
\lambda_3&=c\sigma_\gamma^2+\sigma_e^2,\\
\lambda_4&=\sigma_e^2,
\end{aligned}$$

它们的重数分别为 1, $r_1=(a-1)$, $r_2=(b-1)$, $r_3=(a-1)(b-1)$, $r_4=ab(c-1)$, 于是 $\Sigma(\sigma^2)$ 的谱分解为

$$\Sigma(\sigma^2)=\sum_{i=1}^4\lambda_iM_i+\lambda_0\overline{J}_N.$$

据此易得

$$\Sigma(\sigma^2)^{-1}=\sum_{i=1}^4\frac{1}{\lambda_i}M_i+\frac{1}{\lambda_0}\overline{J}_N,\qquad |\Sigma(\sigma^2)|=\lambda_0\prod_{i=1}^4\lambda_i^{r_i}.$$

这些是求 MLE 所必需的．与 Searle 和 Henderson[12] 的方法相比，定理 2.1 提供的算法更为简单．

史建红和尹素菊分别在他们的博士论文 [4] 和 [5] 中研究了 $\mathcal{D}_0=\{P_{U_0},P_{U_1},\cdots,P_{U_{k+1}}\}$ 不封闭的情形，通过引进一系列新概念，然后借助于关系矩阵给出了一般平衡混合效应方差分析模型协方差阵的一种显式的谱分解方法．此法的特点是适用面广，方法简单，计算量小，并能给出直接计算协方差阵的特征值和主幂等阵 M_i 的公式，且在谱分解之前就可以确定协方差阵的不同特征值的个数．这些都便于求方差分量的谱分解估计和极大似然估计以及研究它们的性质．由于这些结果的叙述需要引进较多概念，限于本文篇幅，我们这里只能建议感兴趣的读者去阅读他们的博士论文 [4] 和 [5].

§3. 谱分解估计及性质

有了协方差阵的谱分解，我们可以很容易地获得固定效应，方差分量，协方差阵及其特征值的谱分解估计．除定理 3.4 之外，本节的结论，对任何协方差阵有谱分解形式 (1.3) 的混合模型都成立．

假设 $\Sigma(\sigma^2)$ 的不同特征值个数为 q. 对模型 (1.4) 我们应用最小二乘统一理论 [10,11] 可以获得模型参数 (固定效应和方差分量) 的估计．事实上，任一在 (1.4) 的第 i 个模型可估的函数 $c'\beta$ 的最佳线性无偏估计为 $c'\beta^{*(i)}$, 这里

$$\beta^{*(i)} = (X'M_iX)^- X'M_iy, \qquad i=1,\cdots,q,$$

这里 A^- 表示矩阵 A 的任一广义逆．我们得到 $c'\beta^{*(i)}$, $i=1,\cdots,q$, 称这些估计为 $c'\beta$ 的谱分解估计 (SDE). 当 $\mathrm{rank}(X)=p$, 且 $\mathcal{M}(X)\cap\mathcal{M}(M_i^{\perp})=\{0\}$, 将上式中广义逆矩阵改为普通逆矩阵，称 $\beta^{*(i)}$ 为 β 的谱分解估计．进一步，由模型 (1.4), 我们可以得到 λ_i 估计

$$\lambda_i^* = \frac{y'M_i[I-M_iX(X'M_iX)^-X'M_i]M_iy}{r_i}, \qquad i=1,2,\cdots,q, \tag{3.1}$$

其中 $r_i=\mathrm{rank}(M_i)-\mathrm{rank}(M_iX)$.

将 λ_i^* 代入 (1.3), 便得到协方差阵 $\Sigma(\sigma^2)$ 的谱分解估计:

$$\Sigma^* = \Sigma(\lambda^*) = \sum_{i=1}^{q}\lambda_i^* M_i. \tag{3.2}$$

从 (2.7) 我们知道， λ_i 是方差分量 σ^2 的线性函数，据此可解出方差分量 σ^2 的谱分解估计，记为 $\sigma^{2*}=({\sigma^2}^*{}_1,\cdots,{\sigma^2}^*{}_{k+1})'$. 不难证明，这些估计具有下列性质．

定理 3.1 (1) 设 $c'\beta$ 在 (1.4) 的第 i 个模型是可估的，则 $c'\beta^{*(i)}$ 是其在对应模型的最佳线性无偏估计．

(2) 若 $\xi_i\sim N(0,\sigma_i^2 I_{q_i})$, $i=1,\cdots,q$, $c'\beta^{*(i)}\sim N(c'\beta,\lambda_i c'(X'M_iX)^-c)$, 且 $c'\beta^{*(i)}$ 和 $c'\beta^{*(j)}$, $i\neq j$ 相互独立．

(3) 若 $\mathrm{rank}(M_iX)=p$, 则谱分解估计 $\beta^{*(i)}$ 是 β 在对应模型的最佳线性无偏估计．若我们进一步假设 $\xi_i\sim N(0,\sigma_i^2 I_{q_i})$, $i=1,\cdots,q$, 则 $\beta^{*(i)}\sim N(\beta,\lambda_i(X'M_iX)^{-1})$.

关于模型协方差阵的特征值的谱分解估计，我们有下述定理．

定理 3.2 若 $\xi_i\sim N(0,\sigma_i^2 I_{q_i})$, $i=1,\cdots,q$, 则

(1) $r_i\lambda_i^*\sim\chi^2_{r_i}$, $i=1,\cdots,q$;

(2) λ_i^* and $c'\beta^{*(i)}$, $i=1,\cdots,q$ 相互独立．

据此及 (2.7) 不难看出，方差分量 σ^2 谱分解估计是独立 χ^2 变量的线性组合．

我们知道，对协方差阵 $\Sigma(\sigma^2)$ 的其它估计，如 ANOVAE 、 MLE 、 REMLE 和 MINQUE, 即将方差分量 σ^2 的对应估计代入 (1.2) 所得的协方差阵 Σ 的估计，它们的统计性质所知很少．但我们很易得到协方差阵的谱分解估计的如下性质．

定理 3.3 (1) 协方差阵 Σ 的谱分解估计 Σ^* 是无偏估计;

(2) $\lambda_1^* I\leq\Sigma^*\leq\lambda_q^* I$. 这里 $A\leq B$ 表示 $B-A\geq 0$;

(3) $\Sigma^* > 0$.

另外，对于协方差阵的谱分解估计，我们可以获得它在 Stein 损失下的风险函数 [16].

Stein 损失函数定义为

$$L(\widehat{\Sigma}, \Sigma) = \mathrm{tr}(\widehat{\Sigma} - \Sigma)^2,$$

这里 $\widehat{\Sigma}$ 是协方差阵 Σ 任一估计．对应的风险函数为 $R(\widehat{\Sigma}, \Sigma) = \mathsf{E}[L(\widehat{\Sigma}, \Sigma)]$.

定理 3.4 对平衡混合效应方差分析模型 (1.1), 设 $\mathcal{D}_0$ 封闭的．

(1) 若 $\lambda_1 = \lambda_0$, 则

$$R(\Sigma^*, \Sigma) = 2\frac{1+m_1}{r_1}\lambda_1^2 + 2\sum_{i=2} k + 1\frac{m_i}{r_i}\lambda_i^2,$$

这里 $r_1 = \mathrm{rank}(P_{U_1}) - \mathrm{rank}(P_{U_1}X)$, $m_i = \mathrm{tr}(M_i)$.

(2) 若 $\lambda_1 \neq \lambda_0$, 则

$$R(\Sigma^*, \Sigma) = 2\sum_{i=1} k + 1\frac{m_i}{r_i}\lambda_i^2 + c'H^{-1}DH^{-1\prime}c.$$

这里 H 由 (2.7) 处定义．尹素菊在她的博士论文 [4] 中把这些结果推广到一般平衡混合效应方差分析模型．

另外，文献 [2] 还将协方差阵的谱分解结果应用到研究线性混合模型 (1.1) 的极大似然估计显式形式存在问题．

§4. 进一步性质及与其它估计的比较

关于谱分解估计的进一步性质，吴密霞 [2], 吴密霞和王松桂 [3] 证明了如下事实．

定理 4.1 对平衡混合效应方差分析模型 (1.1), 若 $\mathcal{D}_0$ 是封闭的，且满足 $\mathbf{1} \in \mathcal{M}(X)$, P_X 与每个 P_{U_i} 可交换，则方差分量的 SDE 与 ANOVAE 相等．

对一般平衡随机方差分析模型 (即 $X\beta = \mathbf{1}\mu$), 由于 $\mathcal{D}_0$ 是封闭的，而且 $P_X = P_{U_0}$, 因此定理 4.1 的条件成立，故有如下结论．

推论 4.1 对一般平衡随机方差分析模型，

(1) 方差分量的 SDE 与 ANOVAE 相等．

(2) 若 y 服从正态分布，则方差分量 σ^2 的 SDE 与 ANOVAE 都为一致最小方差无偏估计 (UMVUE).

史建红在 [3] 中进一步研究了方差分量的几种估计：ANOVAE、MLE、RMLE、MINQUE 与 SDE 之间的关系．为叙述他的结果，我们先引进一些记号．

若向量的每个分量皆为 0 或 1, 则称之为二进制向量．$\mathbb{T}_a$ 表示所有 a 维二进制列向量的集合．a 维二进制向量 $\mathbf{t}_i$ 的分量表示方法为 $\mathbf{t}_i = (t_{i1}, t_{i2}, \cdots, t_{ia})$. 记

$$\mathbb{K} \triangleq \{K_{\mathbf{t}_i} : K_{\mathbf{t}_i} = \overline{J}_{n_1}^{t_{i1}} \otimes \overline{J}_{n_2}^{t_{i2}} \otimes \cdots \otimes \overline{J}_{n_a}^{t_{ia}}, \mathbf{t}_i \in \mathbb{T}_a\}, \qquad n_j\ (j = 1, \cdots, a) \text{ 为正整数}.$$

对应于 y 的协方差阵 Σ (见 (1.2) 式或 (2.2)) 中的每一项 $\sigma_i^2 U_i U_i'$, 总有唯一 $K_{\mathbf{t}_i} \in \mathbb{K}$, 使得

$$\sigma_i^2 U_i U_i' = \sigma_i^2 c_i K_{\mathbf{t}_i},$$

这里， $c_i=\prod\limits_{j=1}^{a}n_j^{t_{ij}}$ 为常数．若记 $\theta_{\mathbf{t}_i}=c_i\sigma_i^2$ $(i=1,\cdots,k+1)$, 则平衡混合效应方差分析模型 (1.1) 的协方差阵 Σ (见 (2.2)) 可改写为

$$\Sigma=\sum_{i=1}^{k+1}\theta_{\mathbf{t}_i}K_{\mathbf{t}_i}. \tag{4.1}$$

显然，在 (4.1) 式中， $\theta_{\mathbf{t}_{k+1}}=\sigma_{k+1}^2$， $K_{\mathbf{t}_{k+1}}=I_n$．对应于 (4.1) 式的 Σ, 记 $\mathbb{K}_\Sigma\triangleq\{K_{\mathbf{t}_i}:i=1,\cdots,k+1\}$.

定理 4.2 对平衡混合效应方差分析模型 (1.1), 若集合 $\mathbb{K}_\Sigma$ 对通常意义下的矩阵乘封闭，且 P_X 与 Σ 可交换， LS 估计 $\beta^*=(X'X)^{-1}X'y$ 为 β 的 UMVUE (这里假定 X 列满秩); 方差分量的 SDE 也为 UMVUE.

定理 4.3 对平衡混合效应方差分析模型 (1.1), 在定理 4.2 的条件下, 方差分量的 ANOVAE, MINQUE 和 SDE 相等，且都为 UMVUE.

定理 4.4 对平衡混合效应方差分析模型 (1.1), 在定理 4.2 的条件下，模型协方差阵的特征值的 SDE 是 MINQUE.

定理 4.5 对平衡混合效应方差分析模型 (1.1), 在定理 4.2 的条件下，若所有随机效应都服从正态分布，则似然方程组有显式解，且方差分量的 SDE 恰为唯一解．

推论 4.2 对平衡混合效应方差分析模型 (1.1), 在定理 4.2 的条件下，若限制似然方程组有非负解，则方差分量的 SDE 和 REMLE 相等．

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，经济等领域的数据分析中，于是对这种模型的研究近年来倍受关注．这种模型的一般形式是

$$y=X\beta+U\xi+\epsilon, \tag{4.2}$$

这里， y 为 $n\times1$ 观测向量， X 为 $n\times l$ 的设计阵， $\mathrm{rank}(X)=p\le l$, β 为 $l\times1$ 的未知固定效应向量， U 为已知的 $n\times m$ 设计阵，向量 ξ 为 $m\times1$ 的随机效应向量， ϵ 为 $n\times1$ 的随机误差向量．假定 $\xi\sim N_m(0,\sigma_1^2I_m)$, $\epsilon\sim N_n(0,\sigma^2I_n)$, 并且 $\mathsf{Cov}\,(\xi,\epsilon)=0$. 记 $V=UU'$, k 为它的非零特征根个数．设 Z 为 $n\times(n-\mathrm{rank}(X))$ 的列满秩阵，且满足 $Z'X=0$, $Z'Z=I_{n-\mathrm{rank}(X)}$.

史建红和王松桂在文献 [7] 证明了

定理 4.6 在模型 (4.2) 下，若 $k=1$, 则

(1) 误差方差 σ^2 的 SDE 和 ANOVAE 相等．

(2) 随机效应方差 σ_1^2 的 SDE 和 ANOVAE 相等 $\Longleftrightarrow$ $Z'M_1Z$ 为幂等阵．

(3) 若 $Z'M_1Z$ 为幂等阵，则 σ^2 和 σ_1^2 的 SDE 都是 UMVUE.

对于 $k>1$ 的情形，史建红和王松桂在文献 [9] 引进了广义谱分解估计，并建立了类似的结果．

§5. 待进一步研究的问题

在这一节, 我们列举一些围绕谱分解估计需要进一步研究的问题, 供感兴趣的读者参考．当然，其中很多问题对于其它估计，如方差分析估计、极大似然估计、限制极大似然估计和最小范数二次无偏估计也都没有解决．

(1) 固定效应的估计　因为固定效应的谱分解估计有 q 个，一般情况下 $q>1$, 且 $c'\beta^{*(i)}$ 只是 $c'\beta$ 其在对应模型的最佳线性无偏估计．基于这些估计，如何构造 $c'\beta$ 在原模型 (1.1) 的具有优良统计性质的线性估计，是很有理论和实用意义的问题．吴密霞和王松桂 [18] 研究了固定效应的最小二乘估计和方差分量方差分析估计估计的同时最优性问题，对于谱分解估计，这个问题有待研究．

(2) 固定效应的两步估计的性质　以 $\operatorname{rank}(X)=p$ 为例．记

$$\widehat{\beta}(\sigma^2)=(X'\Sigma^{-1}(\sigma^2)X)^{-1}X'\Sigma^{-1}(\sigma^2)y,$$

当 σ^2 已知时，$\widehat{\beta}(\sigma^2)$ 就是 β 的广义最小二乘估计，也是最佳线性无偏估计．现在 σ^2 是未知的，设 $\widehat{\sigma^2}$ 为它的任一估计，则 $\widehat{\beta}(\widehat{\sigma}^2)$ 就是 β 的两步估计．陈希孺和王松桂 [19] 综述了一般两步估计的无偏性，协方差阵以及均方误差阵等问题的若干新进展．对于对应 σ^2 谱分解估计的两步估计的这些问题还有待研究．

(3) 固定效应的精确检验　基于固定效应的谱分解估计 $c'\beta^{*(i)}$ 如何构造线性假设 $H_0: H\beta=0$ 的显著性水平为 α 的精确检验．王松桂和马文卿在 [20] 对一类较简单的混合效应模型应用 Cohen 和 Sackrowitz[21] 的组合检验法研究了这个问题．关于组合检验法的进一步讨论见 Zhou 和 Mathew[22], 以及 Marden[23].

(4) 方差分量的精确检验　我们知道，方差分量 σ^2 的谱分解估计是独立 χ^2 变量的线性组合．利用这个性质，如何何构造假设 $H_0:\sigma_i^2=0$ 的显著性水平为 α 的精确检验．关于这方面的问题可参阅 [10, 11, 18, 24].

(5) 协方差阵 Σ 的谱分解估计的进一步统计性质　例如，如果取 Entropy 损失函数

$$L(\widehat{\Sigma},\Sigma)=\operatorname{tr}(\Sigma^{-1}\widehat{\Sigma})-\log\det(\Sigma^{-1}\widehat{\Sigma})-n,$$

如何获得它的风险函数．另外，协方差阵 Σ 的谱分解估计在一定估计类中中的优良性，也值得研究．

(6) 方差分量的非负估计　方差分量是非负参数，但除了误差方差之外，所有随机效应方差常用的估计，如 ANOVAE, MINQUE 都不是非负的．谱分解估计也不例外．于是如何基于这些估计去构造随机效应方差的非负估计，是一个很重要的问题．这一方面的文献不是很多．参见史建红和王松桂 [8] 及徐礼文 [25].

后记　谨以此文纪念我的老师陈希孺院士逝世一周年．

参 考 文 献

[1] 王松桂，尹素菊，线性混合模型参数的一种新估计，中国科学 (A 辑), **32(5)**(2002), 434–443.

[2] 吴密霞，混合效应模型估计理论及方法，北京工业大学博士论文，北京， 2004.

[3] 吴密霞, 王松桂, 线性混合模型协方差阵的谱分解的一种新方法及其应用，中国科学 (A 辑), **35(8)**(2005), 947–960.

[4] 史建红，方差分量的估计，北京工业大学博士论文，北京， 2005.

[5] 尹素菊，线性模型的参数估计理论及方法，北京工业大学博士论文，北京， 2005.

[6] 史建红，王松桂，平衡线性混合模型方差分量几种估计的优良性，数学年刊, **26A**(2005), 1–8.

[7] 史建红, 王松桂，Some properties of spectral decomposition estimate of variance components Chinese, *Journal of Applied Probability and Statistics*, **20**(2004), 287–294.

[8] 史建红，王松桂，方差分量的非负估计， 工程数学学报, **21**(2004), 623–627.
[9] 史建红，王松桂，方差分量的广义谱分解估计， 高校应用数学学报, **20(1)**(2005), 83–89.
[10] 王松桂，史建红，尹素菊，吴密霞， 线性模型引论, 科学出版社，北京， 2004.
[11] Wang, S.G., Chow, S.C., *Advanced Linear Models*, Marcel Dekker Inc., New York, 1994.
[12] Searle, S.R., Casella, G., McCulloch, C.E., *Variance components*, Wiley, New York, 1992.
[13] Smith, D.W., Hocking, R.H., Maximum likelihood analysis of the mixed model: the balanced case, *Commun. Statist. -Theor. Meth.*, **A7(13)**(1978), 1253–1266.
[14] Searle, S.R., Henderson, H.V., Dispersion matrices for variance components models, *J. Amer. Statist. Assoc.*, **74(366)**(1979), 465–470.
[15] Khuri, A.I., Direct products: a powerful tool for the analysis of balanced data, *Commun. Statist. -Theor. Meth.*, **11(25)**(1982), 2903–2920.
[16] Wang, S.G., Yin, S.J., Estimating The covariance matrix in linear mixed models by spectral decomposition approach, *Proceedings of the Fifth Asian Symposium on Statistics*, 2005, 147–155.
[17] Wu, M.X., Wang, S.G., On estimation of variance components in the mixed-effects models for longitudinal data, *Proceedings of Asian Symposium on Statistics*, 2002, 27–38.
[18] 吴密霞，王松桂，线性混合模型中固定效应和方差分量同时最优估计， 中国科学 (A 辑), **34(3)**(2004), 373–384.
[19] 陈希孺，王松桂， 线性模型中的最小二乘法, 上海科学出版社， 2003.
[20] 王松桂，马文卿， On exact tests of linear hypothesis in linear models with nested error structure, *Journal of Statistical Planning and Inference*, **106**(2002), 225–233.
[21] Cohen, A., Sackrowitz, H.B., Exact tests that recover interblock information in balanced incomplete block designs, *J. Amer. Statist. Assoc.*, **84**(1989), 556–559.
[22] Zhou, L.P., Mathew, T., Combining independent tests in linear models, *J. Amer. Statist. Assoc.*, **88**(1993), 650–655.
[23] Marden, J.I., Combining independent noncentral chi-squared or F-tests, *Ann. Statist.*, **10**(1982), 266–277.
[24] Khuri, A.I., Mathew, T. and Sinha, B.K., *Statistical Tests for Mixed Linear Models*, John Wiley, New York, 1998.
[25] 徐礼文，几类统计模型的估计与预测理论，北京工业大学博士论文，北京， 2006.

On Spectral Decomposition Estimates in Mixed Linear Models

WANG SONGGUI
(*College of Applied Sciences, Beijing University of Technology, Beijing, 100022*)

This paper gives a survey of the recent developments on parameter estimation in linear mixed model. The covariance matrix in balanced analysis of variance mixed linear models has a specific structure. For this model, [1] proposed a new approach, spectral decomposition method, to estimate parameters. The merits of the approach is to provide independent estimates of fixed effects and variance components simultaneously, the former is linear and late quadratic. [2–9] established some further properties of the new estimates and corresponding estimates of covariance matrix with risk function. These papers also obtained some relations among the analysis of variance estimate, maximum likelihood estimate, restricted maximum likelihood estimate, minimum norm quadratic unbiased estimate and new estimates. Finally, some open problems are proposed.