Regressão Aleatória

Pollyane Vieira da Silva
Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz - ESALQ

Novembro de 2016

Sumário

Introdução

Um modelo linear que apresenta somente fatores de efeitos fixos, além do erro experimental, que é sempre aleatório, é denominado modelo fixo. Os modelos que apresentam apenas fatores de efeitos aleatórios, exceto a constante μ, que é sempre fixa, é denominado modelo aleatório. Um modelo misto é aquele que apresenta tanto fatores de efeitos fixos como aleatórios, além do erro experimental e da constante μ. Um motivo de se adotar um modelo linear misto é a possibilidade de se fazer a predição de efeitos aleatórios, na presença de efeitos fixos, através dos BLUP's (best linear unbiased prediction) que são de grande valia em genética e melhoramentos.

Modelo Misto

Matricialmente, o modelo misto geral é denotado por:

$$y = X\beta + Z\gamma + e$$

em que,
${}_n y_1$ é o vetor de observações;
${}_n X_{p+1}$ é a matriz de incidência dos efeitos fixos (conhecida);
${}_{p+1}\beta_1$ é o vetor de efeitos fixos desconhecidos;
${}_n Z_q$ é a matriz de incidência dos efeitos aleatórios (conhecida);
${}_q \gamma_1$ é o vetor de efeitos aleatórios desconhecidos;
${}_n e_1$ é o vetor de erros aleatórios.

Modelo Misto

Assumindo-se que os efeitos aleatórios e os erros (resíduos) têm distribuição normal com média zero e são não correlacionados, com matrizes de variâncias e covariâncias dadas por:

$$Var(\gamma) = E(\gamma\gamma') = D \qquad \text{e} \qquad Var(e) = E(ee') = R$$

Deste modo, tem-se que:

$$V = Var(y) = Var(X\beta + Z\gamma + e) = ZDZ' + R$$

Assume-se ainda que V é não singular, e

$$E(y) = E(X\beta + Z\gamma + e) = X\beta,$$

assim,

$$y \sim N(X\beta; ZDZ' + R)$$

Derivação das equações de modelos mistos

Maximização da função densidade de probabilidade conjunta de y e γ. Considerando que a distribuição seja normal. A função densidade de probabilidade de y é dada por:

$$f(y,\gamma) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}(ZDZ' + R)^{1/2}} \exp[-1/2[(y-X\beta)'(ZDZ'+R)^{-1}(\gamma-X\beta)]$$

A função densidade de probabilidade conjunta de y e γ pode ser escrita como o produto entre a função densidade condicional de y, dado γ, e a função densidade de probabilidade de γ.

$$f(y,\gamma) = f(y|\gamma)f(\gamma)$$

$$f(y,\gamma) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}(R)^{1/2}} \exp[-1/2[(y - X\beta - Z\gamma)'(R)^{-1}(y - X\beta - Z\gamma)]]$$
$$\frac{1}{(2\pi)^{n/2}(D)^{1/2}} \exp[-1/2[(\gamma - 0)'(D)^{-1}(\gamma - 0)]]$$

Derivação das equações de modelos mistos

Para se proceder à maximização de $f(y,\gamma)$, pode-se usar o artifício da transformação por logaritmo. Isso é possível, visto que, sendo $f(y,\gamma)$ e $logf(y,\gamma)$ funções contínuas e crescentes no espaço $\mathbb{R}+$, seus pontos de máximo são coincidentes dentro do espaço de $[\beta'\gamma']$ e $ZDZ' + R$. Assim, fazendo-se $L = logf(y,\gamma)$, tem-se:

$$
\begin{aligned}
L =& \frac{1}{2}2nlog(2\pi) - \frac{1}{2}(logR + logD) - \frac{1}{2}(y'R^{-1}y - 2y'R^{-1}X\beta \\
& - 2y'R^{-1}Z\gamma + 2\beta'X'R^{-1}Z\gamma + \beta'X'R^{-1}X\beta + \gamma'Z'R^{-1}Z\gamma + \gamma'D^{-1}\gamma)
\end{aligned}
$$

Derivando L em relação a β e γ, e tornando-se tais derivadas identicamente nulas, obtêm-se:

$$
\begin{bmatrix} \dfrac{\partial L}{\partial \beta} \\ \dfrac{\partial L}{\partial \gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -X'R^{-1}y + X'R^{-1}X\beta_0 + X'R^{-1}Z\widehat{\gamma} \\ -ZR^{-1}y + Z'R^{-1}X\beta_0 + Z'R^{-1}Z\widehat{\gamma} + D^{-1}\widehat{\gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}
$$

$$
\begin{bmatrix} X'R^{-1}X\beta_0 + X'R^{-1}Z\widehat{\gamma} \\ -ZR^{-1}X\beta_0 + Z'R^{-1}Z\widehat{\gamma} + D^{-1}\widehat{\gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X'R^{-1}y \\ Z'R^{-1}y \end{bmatrix}
$$

$$
\begin{bmatrix} X'R^{-1}X & X'R^{-1}Z \\ -ZR^{-1}X & Z'R^{-1}Z\widehat{\gamma} + D^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \widehat{\gamma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X'R^{-1}y \\ Z'R^{-1}y \end{bmatrix}
$$

Essas são as equações de modelos mistos (MME), que permitem obter soluções para os efeitos fixos (β_0) e predições para os efeitos aleatórios ($\hat{\gamma}$).

Soluções para os efeitos fixos e predições dos efeitos aleatórios

A solução do sistema de equações de modelos mistos pode ser obtida por absorção ou por obtenção da matriz inversa por partição. Em ambos os casos, os resultados serão:

$$\begin{aligned}\beta_0 =& \{X'[R^{-1} - R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + D^{-1})^{-1}Z'R^{-1}]X\}^{-} \\ & X'[R^{-1} - R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + D^{-1})^{-1}Z'R^{-1}]y\end{aligned}$$

$$\hat{\gamma} = (ZR^{-1}Z + D^{-1})^{-1}Z'R^{-1}(y - X\beta_0)$$

Outra alternativa para se obter soluções para os efeitos fixos é pelo uso de um modelo linear generalizado, ignorado-se os efeitos aleatórios, como a seguir:

Dado o modelo

$$y = X\beta + Z\gamma + e$$

anteriormente descrito, e com $Var(y) = ZDZ' + R$, tem-se que o sistema de equações normais generalizada é dado por:

$$X'V^{-1}X\beta_0 = X'V^{-1}y$$

cuja solução é:

$$\beta_0 = (X'V^{-1}X)^{-}X'V^{-1}y$$

e a predição de γ seria obtida por:

$$\hat{\gamma} = DZ'V^{-1}(y - X\beta_0)$$

$$V^{-1} = R^{-1} - R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + D^{-1})^{-1}Z'R^{-1}$$

Algumas propriedades das soluções para os efeitos fixos

a) A solução β_0, obtida pelas MME é também uma solução de mínimos quadrados generalizados(GLS), utilizando o modelo que ignora os efeitos aleatórios.

b) A variância de β_0 é dada por:

$$Var[\beta_0] = [X'R^{-1} - X'R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + D^{-1})^{-1}Z'R^{-1}X]^{-}.$$

c) Para um dado conjunto p de funções estimáveis, linearmente independentes, estabelecidas por uma matriz conhecida λ, a variância de $\lambda'\beta_0$, (BLUE) de $\lambda'\beta$ é dada por:

$$Var[\lambda'\beta_0] = \lambda'[X'R^{-1} - X'R^{-1}Z(Z'R^{-1}Z + D^{-1})^{-1}Z'R^{-1}X]^{-}\lambda$$

Algumas propriedades da predição para os efeitos aleatórios

a) O preditor $\hat{\gamma}$ é o Melhor Preditor Linear Não -viesado(BLUP) de γ.

b) A variância de $\hat{\gamma}$ é dada por:

$$Var[\hat{\gamma}] = DZ'[V^{-1} - V^{-1}X(X'V^{-1}X)^{-}V^{-1}]ZD'$$

c) A variância do erro de predição é dada por:

$$Var[\gamma - \hat{\gamma}] = D - DZ'[V^{-1} - V^{-1}X(X'V^{-1}X)^{-}X'V^{-1}]ZD'$$

d) A correlação entre os valores reais e preditos é máxima. Dentre uma classe de funções lineares que gera predições não viciadas, o BLUP maximiza a correlação $(\gamma - \hat{\gamma})$.

Discussão sobre diferentes aplicações

Polinômios ortogonais

A utilização do modelo de regressão aleatória exige a escolha de uma função para a descrição das trajetórias dos efeitos fixos e aleatórios, estas funções podem ser ortogonais, paramétricas ou de covariância. Dentre estas, os polinômios ortogonais de Legendre, tem sido utilizados. Os polinômios de Legendre são regressões ortogonais, portanto possuem a vantagem computacional de reduzir a correlação entre os coeficientes estimados, facilitando a convergência.

Exemplo:

Avaliação genética do crescimento de codornas
Modelar as variações da produção de leite
Análise genética de pesos de bovinos

Exemplo

Vamos considerar o exemplo da apostila retirado do livro de Montgomery. O experimento estuda a variabilidade de lotes e fornecedores na pureza da matéria prima. A análise assume que os fornecedores são efeitos fixos enquanto que lotes são efeitos aleatórios.

Conclusão

No uso de modelos fixos, devem-se estimar os próprios efeitos fixos, enquanto que os modelos aleatórios prestam-se para estimar os componentes de variância(das variáveis aleatórias), bem como a predição das próprias variáveis aleatórias. Dessa forma, os modelos mistos podem servir para a estimação das médias de um modo mais preciso, uma vez que deve-se levar em conta a influência dos componentes de variância que podem ser estimados pelo modelo.

- Nota metodológica sobre Modelos Lineares Mistos. Professor Jomar Antonio Camarinha Filho. UFPR - 2003.
- Rovadoscki, G. A. - Modelos de curvas de crescimento e regressão aleatória em linhagem nacionais de frango caipira. Dissertação de mestrado(2013) - ESALQ/USP.
- Lucambio, F. - Modelos Lineares Mistos. UFPR (2008).
- Macedo, O. J. - Modelos de regressão aleatória usando como bases as funções polinomiais de Legendre, de Jacobi modificadas e trigonométrica, com uma aplicação na análise genética dos pesos dos bovinos da raça Nelore. Tese -ESALQ/USP(2007).
- Camarinha filho, J. A. - Modelos lineares mistos: estruturas de matrizes de variância e covariâncias e seleção de modelos. Tese - ESALQ/USP(2002).