

Modelos lineares mistos: parte 2

Prof. Caio Azevedo

Referências

- Nobre (2004). Métodos de diagnóstico para modelos lineares mistos. Dissertação de Mestrado. IME-USP.
- Nobre & Singer (2007). Residual analysis for linear mixed models. Biometrical Journal, 49, 6, 863-875.

Análise de resíduos para modelos mistos

- Existem duas fontes de variação: os efeitos aleatórios \mathbf{b} e os erros ξ .
- Tipos de erros:
 - Erros condicionais: $\xi_j = \mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}_j\mathbf{b}_j$
 - Erros marginais: $\epsilon_j = \mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j\boldsymbol{\beta} = \mathbf{Z}_j\mathbf{b}_j + \xi_j$
 - Efeitos aleatórios: $\mathbf{Z}_j\mathbf{b}_j = \mathcal{E}(\mathbf{Y}_j|\mathbf{b}_j) - \mathcal{E}(\mathbf{Y}_j)$.
- Respectivos resíduos:
 - Resíduos condicionais: $\hat{\xi}_j = \mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j\hat{\boldsymbol{\beta}} - \mathbf{Z}_j\hat{\mathbf{b}}_j$
 - Resíduos marginais: $\hat{\epsilon}_j = \mathbf{Y}_j - \mathbf{X}_j\hat{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{Z}_j\hat{\mathbf{b}}_j + \hat{\xi}_j$

Tipos de resíduos

- Segundo Hilden-Minton (1995)
 - Resíduo puro (para um específico tipo de erro): se ele depende apenas das componentes fixas e do erro que ele pretende predizer.
 - Resíduo confundido: depende de outros tipos de erros.

Tipos de resíduos

- Na função “lme”

- Resíduo condicional normalizado: $\hat{\xi}_j^* = (\hat{\sigma} \hat{\mathbf{U}}_{(c)j})^{-1} \hat{\xi}_j$

- Resíduo marginal normalizado: $\hat{\epsilon}_j^* = (\hat{\sigma} \hat{\mathbf{U}}_{(m)j})^{-1} \hat{\epsilon}_j$

em que $\hat{\mathbf{U}}_{(c)j}$ é a matriz triangular superior da decomposição de Cholesky de $\hat{\mathbf{R}}_j = \hat{\mathbf{U}}'_{(c)j} \hat{\mathbf{U}}_{(c)j}$ e $\hat{\mathbf{U}}_{(m)j}$ é a matriz triangular superior da decomposição de Cholesky de $\hat{\mathbf{V}}_j = \hat{\mathbf{U}}'_{(m)j} \hat{\mathbf{U}}_{(m)j}$.

Tipos de resíduos

- Segundo Pinheiro and Bates (2000), página 239, e Schabenberger (2004), respectivamente, $\hat{\xi}_j^*$ e $\hat{\epsilon}_j^*$ devem seguir, aproximadamente uma distribuição $N(0,1)$, no caso do modelo estar bem ajustado.
- No entanto, Nobre and Singer (2007) sugerem a utilização do resíduo de confundimento mínimo proposto por Hilden-Milton (1995), veja também Nobre (2004).

Comentários

- Tanto o resíduo condicional quanto o resíduos marginal são influenciados tanto pela distribuição dos efeitos aleatórios quanto pela distribuição dos erros.
- Faz-se mister definir um resíduo que dependa apenas a distribuição dos erros.

Forma matricial

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} \mathbf{Y}_1 \\ \mathbf{Y}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{Y}_n \end{bmatrix}; \mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{X}_1 \\ \mathbf{X}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{X}_n \end{bmatrix}; \boldsymbol{\xi} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\xi}_1 \\ \boldsymbol{\xi}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{\xi}_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \mathbf{Z}_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathbf{Z}_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathbf{Z}_n \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \mathbf{Z}\mathbf{b} + \boldsymbol{\xi}, \mathbf{b} = (\mathbf{b}_1, \dots, \mathbf{b}_n)'$$

Forma matricial

- Temos que $\mathbf{Y} \sim N_{\sum_{j=1}^n k_j}(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2 \mathbf{ZDZ}' + \sigma^2 \mathbf{R})$ e $\mathbf{b} \sim N_{nq}(\mathbf{0}, \sigma^2 \mathbf{D})$, em que

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{R}_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathbf{R}_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathbf{R}_n \end{bmatrix}; \mathbf{D} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Psi} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\Psi} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \boldsymbol{\Psi} \end{bmatrix}$$

Formas matriciais para erros e resíduos

- Tipos de erros:

- Erros condicionais: $\xi = \mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta - \mathbf{Zb}$

- Erros marginais: $\epsilon = \mathbf{Y} - \mathbf{X}\beta = \mathbf{Zb} + \xi$

- Respectivos resíduos:

- Resíduos condicionais: $\hat{\xi} = \mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta} - \mathbf{Z}\hat{\mathbf{b}}$

- Resíduos marginais: $\hat{\epsilon} = \mathbf{Y} - \mathbf{X}\hat{\beta} = \mathbf{Z}\hat{\mathbf{b}} + \hat{\xi}$

Resultados

- $\hat{\xi} = \mathbf{RQ}\xi + \mathbf{RQZ}b.$
- $\hat{\epsilon} - \epsilon = -\mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{M}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{M}\epsilon.$
- $\text{Cov}(\hat{\xi}) = \sigma^2\mathbf{RQR}.$
- $\text{Cov}(\hat{\epsilon}) = \sigma^2\mathbf{M}^{-1}\mathbf{QM}^{-1}.$

em que $\mathbf{Q} = \mathbf{M} - \mathbf{MX}(\mathbf{X}'\mathbf{M}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{M}$ e

$\mathbf{M} = \mathbf{R}^{-1} - \mathbf{R}^{-1}\mathbf{ZC}^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{R}^{-1}$ em que $\mathbf{C} = \mathbf{D}^{-1} + \mathbf{Z}'\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Z}$. \mathbf{Q} e \mathbf{M}

são matrizes simétricas.

Resíduo Marginal

- Dado que ele está associado ao modelo $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\beta + \xi$, um gráfico desse resíduo versus cada covariável (variável explicativa) ajuda a verificar se o preditor linear está corretamente especificado.
- Espera-se, em caso de correta especificação, que o gráfico tenha um comportamento aleatório em torno do zero.

Resíduo Condicional

- Seja (resíduo condicional padronizado) $\hat{\xi}_j^* = \frac{\hat{\xi}_j}{\hat{\sigma}\sqrt{\hat{p}_{jj}}}$, em que \hat{p}_{jj} é a estimativa de p_{jj} o qual, por sua vez, é o j -ésimo elemento da diagonal principal de **RQR**.
- Presença de “outliers”: $\xi_j^* \times$ índice da observação.
- Homocedasticidade dos erros condicionais: $\xi_j^* \times$ valor predito ($\hat{\mathbf{Y}}_j = \mathbf{X}_j\hat{\beta} + \mathbf{Z}_j\hat{\mathbf{b}}_j$).

Resíduo de confundimento mínimo

- Para checar a normalidade dos erros condicionais.
- Lembre que: $\hat{\xi} = \mathbf{RQ}\xi + \mathbf{RQZb}$. Hilden-Milton (1995) (HM) argumentam que a habilidade para avaliar a normalidade de $\hat{\xi}$ diminui quando $\mathcal{V}(\mathbf{RQZb}) = \mathbf{RQZDZ}'\mathbf{QRU}_j$ aumenta em relação à $\mathcal{V}(\mathbf{RQ}\xi) = \sigma^2\mathbf{RQRQR}$ (temos ainda que: $\text{Cov}(\hat{\xi}) = \sigma^2\mathbf{RQR}$).
- Esse autor define a fração de confundimento para $\hat{\xi}_j$ como
$$0 \leq FC_j = \frac{\mathbf{U}_j'\mathbf{RQZDZ}'\mathbf{QRU}_j}{\mathbf{U}_j'\mathbf{RQRU}_j} = 1 - \frac{\mathbf{U}_j'\mathbf{RQRQRU}_j}{\mathbf{U}_j'\mathbf{RQRU}_j} \leq 1$$
em que \mathbf{U}_j denota a j -ésima linha da matriz \mathbf{I}_n . FC_j representa a porção da variabilidade de $\hat{\xi}_j$ devida ao confundimento com $\hat{\mathbf{b}}$. Quando maior for FC_j , maior é o grau de confundimento de $\hat{\xi}_j$.

Resíduo de confundimento mínimo

- HM sugere utilizar uma transformação linear, digamos, $\mathbf{L}\xi$, que minimize o confundimento (em algum sentido).
- Uma sugestão é minimizar o confundimento de $\mathbf{l}'_j\xi$ (em que \mathbf{l}'_j é a j -ésima linha da matriz \mathbf{L}), ou seja maximizar

$$\lambda_j = \frac{\mathbf{l}'_j \mathbf{R} \mathbf{Q} \mathbf{R} \mathbf{Q} \mathbf{R} \mathbf{l}_j}{\mathbf{l}'_j \mathbf{R} \mathbf{Q} \mathbf{R} \mathbf{l}_j}$$

sujeito à restrição $\mathcal{V}(\widehat{\mathbf{l}'_j \xi_j}) \propto \mathbf{l}'_j \mathbf{R} \mathbf{Q} \mathbf{R} \mathbf{l}_j > 0$.

- A base para a obtenção de \mathbf{l}_j é a decomposição espectral de $\mathbf{R}^{1/2} \mathbf{Q} \mathbf{R}^{1/2} = \mathbf{K} \mathbf{\Pi} \mathbf{K}'$.

Resíduo de confundimento mínimo

- Após várias manipulações algébricas, chega-se que o resíduo de confundimento mínimo é dado por:

$$\mathbf{I}'_j \hat{\boldsymbol{\xi}} = \sqrt{\pi_j} \mathbf{K}'_j \mathbf{R}^{-1/2} \mathbf{Y}$$

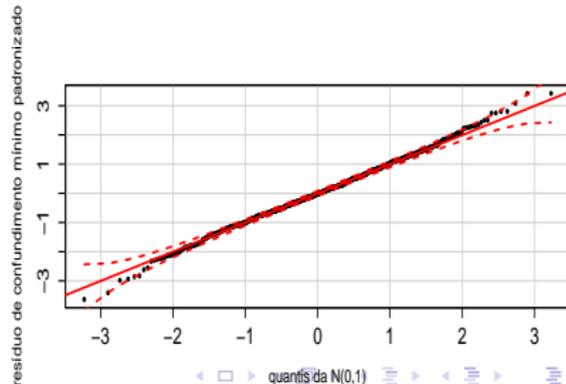
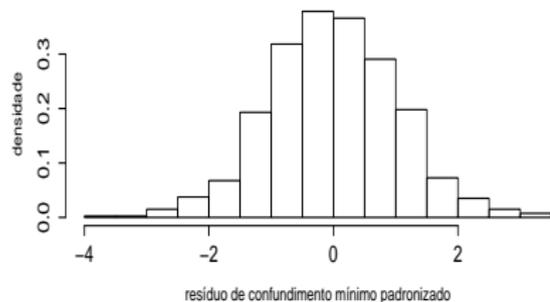
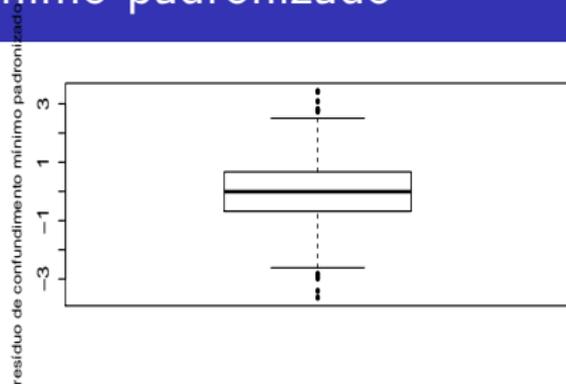
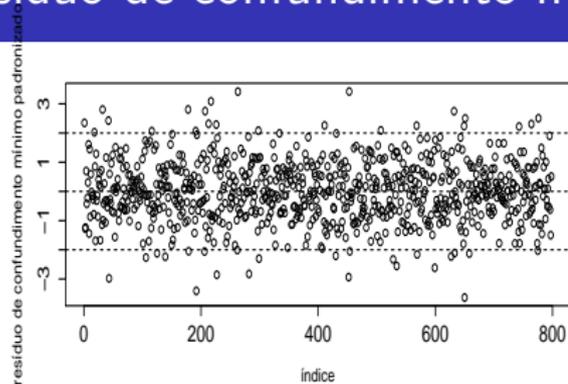
em que \mathbf{K}_j é a j -ésima coluna de \mathbf{K} e π_j é o j -ésimo autovalor (ordenado) (da matriz $\mathbf{\Pi}$), $j=1,2,\dots,n-p$ (“ $n-p$ ” é devido ao rank da matriz \mathbf{Q})

- Pode-se provar ainda que $Cov(\mathbf{I}'_i \hat{\boldsymbol{\xi}}, \mathbf{I}'_j \hat{\boldsymbol{\xi}}) = \sigma^2 \delta_{ij}$, $i, j = 1, 2, \dots, n - p$, em que $\delta_{ij} = 1$ se $i = j$ e 0 caso contrário.

Resíduo de confundimento mínimo

- Os resíduos de confundimento mínimo são não correlacionados, com variâncias constante e média zero.
- Além disso, $\frac{I_j \hat{\xi}}{\hat{\sigma}}$ tem aproximadamente distribuição $N(0,1)$.
- Sugere-se fazer um gráfico de quantil quantil com envelopes para $\frac{I_j \hat{\xi}}{\hat{\sigma}}$.

Resíduo de confundimento mínimo padronizado



Resíduo de confundimento mínimo padronizado

