

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: $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{Y} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{Z}\mathbf{b}$

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

- Respectivos resíduos:

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

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

Resultados

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

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

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

M são matrizes simétricas.

Resíduo Marginal

- Dado que ele está associado ao modelo $\mathbf{Y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\xi}$, 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 ($\hat{Y}_j = X_j\hat{\beta} + Z_j\hat{b}_j$).

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, $L\xi$, que minimize o confundimento (em algum sentido).
- Uma sugestão é minimizar o confundimento de $I'_j\xi$ (em que I'_j é a j -ésima linha da matriz L), ou seja maximizar

$$\lambda_j = \frac{I'_j R Q R Q R I_j}{I'_j R Q R I_j}$$

sujeito à restrição $\mathcal{V}(I'_j \hat{\xi}_j) \propto I'_j R Q R I_j > 0$.

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

Resíduo de confundimento mínimo

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

$$I_j' \hat{\xi} = \sqrt{\pi_j} K_j' R^{-1/2} Y$$

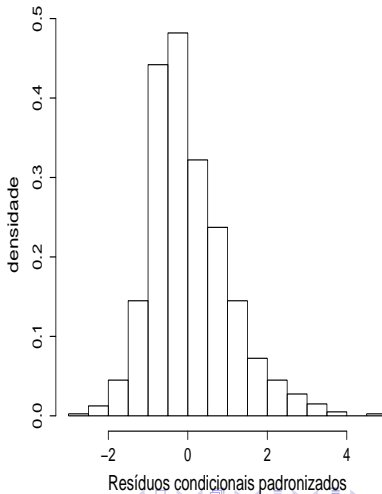
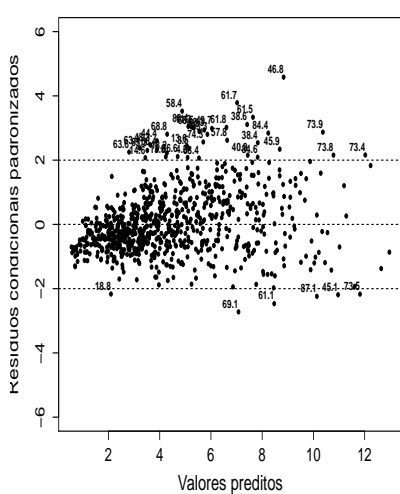
em que K_j é a j -ésima coluna de K e π_j é o j -ésimo autovalor (ordenado) (da matriz Π), $j=1,2,\dots,n-p$ (“ $n-p$ ” é devido ao rank da matriz Q)

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

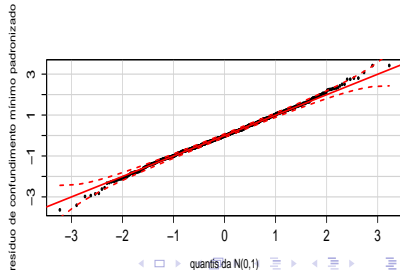
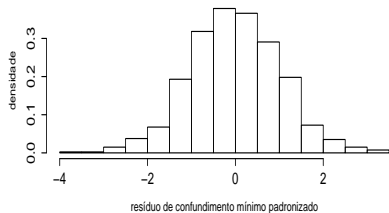
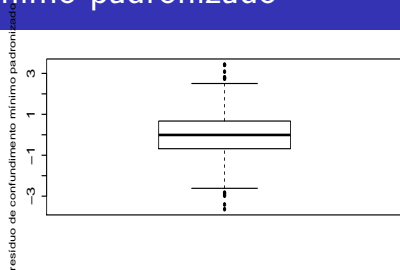
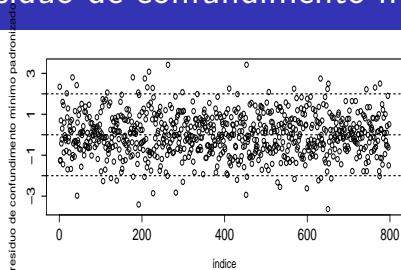
Resíduo de confundimento mínimo

- 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 condicional padronizado



Resíduo de confundimento mínimo padronizado



Resíduo de confundimento mínimo padronizado

