4. Aufgabenblatt

Aufgabe 10

a) Modell: $\begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_4 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{X} \beta + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} b + \vec{\varepsilon}$

X hat vollen Rang $p=1$, $Z_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = Z_2$ hat vollen Rang $q=1$, und $N=4 > m \cdot q = 2$, so dass das Modell nach 3.3 identifizierbar ist.

b) Gewöhnliche KQ-Lösung: $\underline{\hat{\vec{\beta}}_{KQ}} = (X'X)^{-1}X'\vec{y} = \frac{1}{N}\sum_{i,j} y_{ij} = \frac{16}{4} = \underline{\underline{4}} \left(= (X_1'X_1)^{-1}X_1'\vec{y}\right)$

$\underline{\underline{\hat{\sigma}^2_{KQ}}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{m}(\vec{y}_i - X_1\hat{\vec{\beta}}_{KQ})'(\vec{y}_i - X_1\hat{\vec{\beta}}_{KQ}) = \frac{1}{4}\left[\left\{\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}4\\4\end{pmatrix}\right\}'\begin{pmatrix}-3\\-1\end{pmatrix} + \left\{\begin{pmatrix}5\\7\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}4\\4\end{pmatrix}\right\}'\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}\right] = \frac{20}{4} = \underline{\underline{5}}$

Fixed effect estimator: $Z_i^+ = (Z_i'Z_i)^{-1}Z_i' = (\vec{1}'\vec{1})^{-1}\vec{1}' = \frac{1}{n}\vec{1}'$, $i = 1,\dots,m$

Wegen $X_i = Z_i$, $i = 1,\dots,m$, hat $W = \begin{pmatrix} X_1 & Z_1 & 0 \\ X_1 & 0 & Z_1 \end{pmatrix}$ keinen vollen Rang und $\vec{\beta}_\infty$ ist nicht eindeutig festgelegt. Wir wählen $\underline{\hat{\beta}_\infty} = 4$, $\hat{b}_1 = -2$, $\hat{b}_2 = 2$, vgl. A8c)

$\underline{\underline{s^2_{min}}} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{m}(\vec{y}_i - X_i\hat{\vec{\beta}}_\infty)'\underbrace{(\mathbb{I} - Z_iZ_i^+)}_{\mathbb{I} - \vec{1}\vec{1}'\frac{1}{n}}(\vec{y}_i - X_i\underset{\hat{\vec{\beta}}_{KQ}}{\underset{\shortparallel}{\hat{\vec{\beta}}_\infty}}) = \hat{\sigma}^2_{KQ} - \frac{1}{4\cdot 2}\left\{\Big[\underbrace{(-3,-1)\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}}_{4}\Big]^2 + 4^2\right\} = \underline{\underline{1}}$

c) Nicht-konstante Terme der Profile-log-Likelihood:

$X_i = Z_i = \vec{1}$, $B = \frac{\tau^2}{\sigma^2} =: \kappa$, $V_i = \begin{pmatrix} 1+\kappa & \kappa \\ \kappa & 1+\kappa \end{pmatrix}$

Damit: $\ln(\det(V_i)) = \ln((1+\kappa)^2 - \kappa^2) = \ln(2\kappa+1)$; $V_i^{-1} = \mathbb{I} - \frac{\kappa}{1+n\kappa}\vec{1}\vec{1}'$ (A7b)

$\vec{y}_i'V_i^{-1}\vec{y}_i = \vec{y}_i'\vec{y}_i - \frac{\kappa}{1+n\kappa}[\vec{1}'\vec{y}_i]^2$ $\qquad X_i'V_i^{-1}X_i = \vec{1}'V_i^{-1}\vec{1} = n - \frac{\kappa}{1+n\kappa}n^2 = \frac{n}{1+n\kappa}$

$X_i'V_i^{-1}\vec{y}_i = \vec{1}'(\mathbb{I} - \frac{\kappa}{1+n\kappa}\vec{1}\vec{1}')\vec{y}_i = \vec{1}'\vec{y}_i - \frac{\kappa}{1+n\kappa}n\vec{1}'\vec{y}_i = \frac{1}{1+n\kappa}\vec{1}'\vec{y}_i$

Somit

$$l_p(\kappa) = -\frac{1}{2}\left\{const. + m\ln(2\kappa+1) + N\ln\left\{\sum_{i=1}^{m}\left[\vec{y}_i'\vec{y}_i - \frac{\kappa}{1+n\kappa}[\vec{1}'\vec{y}_i]^2\right] - \left(\sum_{i=1}^{m}\frac{1}{1+n\kappa}\vec{1}'\vec{y}_i\right)^2\frac{1+n\kappa}{n}\right\}\right.$$

$$= -\frac{1}{2}\left\{const + 2\ln(2\kappa+1) + 4\ln\left\{84 - \frac{\kappa}{1+2\kappa}\underbrace{(16+144)}_{160} - \underbrace{\left(\frac{1}{1+2\kappa}\right)^2 16^2\,\frac{1+2\kappa}{4}}_{64\cdot\frac{1}{1+2\kappa}}\right\}\right.$$

Restringierte Log-Likelihood:

$$l_{r,p}(\kappa) = -\frac{1}{2}\left\{const. + 2\ln(2\kappa+1) + \ln\left(\frac{2}{2\kappa+1} + \frac{2}{2\kappa+1}\right) + 3\ln\underbrace{\left\{84 - \frac{160\kappa}{1+2\kappa} - \frac{64}{1+2\kappa}\right\}}_{\frac{8\kappa+20}{2\kappa+1}}\right.$$

$$\frac{\partial l_p(\kappa)}{\partial \kappa} = -\frac{1}{2}\left\{\frac{2\cdot 2}{2\kappa+1} + 4\frac{2\kappa+1}{8\kappa+20}\frac{8(2\kappa+1)-2(8\kappa+20)}{(2\kappa+1)^2}\right\} = -\frac{1}{2}\underbrace{\left\{\frac{4}{2\kappa+1} - \frac{4\cdot 8}{(2\kappa+5)(2\kappa+1)}\right\}}_{\frac{8\kappa-12}{(2\kappa+5)(2\kappa+1)}}$$

$$\frac{\partial l_p(\kappa)}{\partial \kappa} \gtrless 0 \Leftrightarrow \kappa \lessgtr 1.5 \Rightarrow \hat{\kappa}_{ML} = 1.5$$

sowie $\underline{\hat{\beta}_{ML}} = \hat{\beta}_{LQ} = \underline{\underline{4}}$ und $\hat{\sigma}^2_{ML} = \frac{1}{2\cdot 1}\sum_{i=1}^{m} \vec{y}_i'\Big[I - \vec{1}\underbrace{(\vec{1}'\vec{1})^{-1}\vec{1}'}_{\frac{1}{4}\vec{1}\vec{1}'}\Big]\vec{y}_i = \frac{1}{2}\left[84 - \frac{1}{2}(4^2+12^2)\right] = \underline{\underline{2}}$

$$\frac{\partial l_{r,p}(\kappa)}{\partial \kappa} = -\frac{1}{2}\left\{\frac{4}{2\kappa+1} - \frac{2\kappa+1}{4}4\frac{2}{(2\kappa+1)^2} - 3\frac{8}{(2\kappa+5)(2\kappa+1)}\right\} = -\frac{1}{2}\left\{\frac{4\kappa+10-24}{(2\kappa+5)(2\kappa+1)}\right\}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial l_{r,p}(\kappa)}{\partial \kappa} \gtrless 0 \Leftrightarrow \kappa \lessgtr 3.5 \Rightarrow \underline{\hat{\kappa}_{ReML} = 3.5}, \text{ sowie } \hat{\beta}_{ReML} = \hat{\beta}_{ML}, \hat{\sigma}^2_{ML} = \hat{\sigma}^2_{ReML}$$

oder: $\hat{\sigma}^2_{ReML} = \frac{1}{4-1}\left[\begin{pmatrix}-3\\-1\end{pmatrix}'\left(I - \frac{\kappa}{1+2\kappa}\vec{1}\vec{1}'\right)\begin{pmatrix}-3\\-1\end{pmatrix}\right]\cdot 2 = \frac{2}{3}\left[10 - \frac{3.5}{8}16\right] = \underline{\underline{2}}$ nach Bel. 2.5

d) Newton-Raphson für Profile-log-Likelihood:

$$\frac{\partial^2 l_p}{\partial \kappa^2} = -\frac{1}{2}\left\{\frac{8(4\kappa^2+12\kappa+5)-(8\kappa+12)(8\kappa-12)}{(2\kappa+5)^2(2\kappa+1)^2}\right. = \frac{-16\kappa^2+48\kappa+92}{(2\kappa+5)^2(2\kappa+1)^2}$$

Für $\kappa_0^{(0)} = 1$: $g_0 = +\frac{2}{21}$; $\mathcal{H}_0 = -\frac{124}{441} \Rightarrow \kappa^{(1)} = 1 + \frac{441}{124}\frac{2}{21} = 1 + \frac{21}{62} = \frac{83}{62} \approx 1.34$

Kontrolle: $l_p(\kappa_0^{(0)}) = -\frac{1}{2}\left\{const + 2\ln 3 + 4\ln\frac{28}{3}\right\} = -\frac{1}{2}\{const + 11.1316\}$

$l_p(\kappa^{(1)}) = -\frac{1}{2}\left\{const + 2\ln 3.68 + 4\ln\frac{30.72}{3.68}\right\} = -\frac{1}{2}\{const + 11.0938\}$

$l_p(\hat{\kappa}_{ML}) = -\frac{1}{2}\left\{const + 2\ln 4 + 4\ln\frac{32}{4}\right\} = -\frac{1}{2}\{const + 11.0904\}$

e) log-Likelihood: (vgl. A7b):

$$l(\vec{\theta}) = -\frac{1}{2}\left\{4\ln(2\pi) + 4\ln\sigma^2 + 2\ln(2\kappa+1) + \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{2}(\vec{y}_i - \vec{1}\beta)'\left(I - \frac{\kappa}{1+2\kappa}\vec{1}\vec{1}'\right)(\vec{y}_i - \vec{1}\beta)\right\}$$

Gradient (vgl. 2.9): $\frac{\partial l}{\partial \beta} = \sigma^{-2}\sum_{i=1}^{2}\vec{1}'\left(I - \frac{\kappa}{1+2\kappa}\vec{1}\vec{1}'\right)(\vec{y}_i - \vec{1}\beta) = \sigma^{-2}\sum_{i=1}^{2}\underbrace{\left(1 - \frac{2\kappa}{1+2\kappa}\right)}_{(1+2\kappa)^{-1}}\vec{1}'(\vec{y}_i - \vec{1}\beta)$

$$\frac{\partial l}{\partial \sigma^2} = -\frac{1}{2}4\sigma^{-2} + \frac{1}{2}\sigma^{-4}\sum_{i=1}^{2}(\vec{y}_i - \vec{1}\beta)'\left(I - \frac{\kappa}{1+2\kappa}\vec{1}\vec{1}'\right)(\vec{y}_i - \vec{1}\beta)$$

$$\frac{\partial l}{\partial \kappa} = -\frac{1}{2}\left\{\frac{4}{2\kappa+1} - \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{2}\left[(\vec{y}_i - \vec{1}\beta)'\vec{1}\right]^2\frac{1+2\kappa-2\kappa}{(1+2\kappa)^2}\right\}$$

Hesse-Matrix: $\frac{\partial^2 \ell}{\partial\beta^2} = \frac{\sigma^{-2}}{1+2\kappa}\sum_{i=1}^{2}(-2) = \frac{-4\sigma^{-2}}{1+2\kappa} < 0$

$$\frac{\partial^2 \ell}{\partial\sigma^2\partial\beta} = -\frac{\sigma^{-4}}{1+2\kappa}\left[\sum_{i=1}^2 \vec{1}'(\vec{y}_i - \vec{1}\beta)\right] \rightsquigarrow E\left(\frac{\partial^2\ell}{\partial\sigma^2\partial\beta}\right) = 0$$

$$\frac{\partial^2\ell}{\partial\kappa\partial\beta} = \frac{-2\sigma^{-2}}{(1+2\kappa)^2}\sum_{i=1}^2 \vec 1'(\vec y_i - \vec 1\beta) \rightsquigarrow E\left(\frac{\partial^2\ell}{\partial\kappa\partial\beta}\right)=0$$

$$\frac{\partial^2\ell}{\partial\sigma^4} = 2\sigma^{-4} + \sigma^{-6}\sum_{i=1}^2(\vec y_i - \vec 1\beta)'\left(\mathbb{I} - \frac{\kappa}{1+2\kappa}\vec1\vec1'\right)(\vec y_i-\vec1\beta) \rightsquigarrow E\left(\frac{\partial^2\ell}{\partial\sigma^4}\right) = 2\sigma^{-4} - \sigma^{-4}4 = -2\sigma^{-4}$$

$$\frac{\partial^2\ell}{\partial\kappa\partial\sigma^2} = -\frac12\sigma^{-4}\sum_{i=1}^2 \left[(\vec y_i - \vec1\beta)'\vec1\right]^2 \frac{1+2\kappa-2\kappa}{(1+2\kappa)^2}\left[\vec1'(\vec y_i-\vec1\beta)\right]$$

$$E\left(\frac{\partial^2\ell}{\partial\kappa\partial\sigma^2}\right) = -\frac{1}{2\sigma^4}\frac{1}{(1+2\kappa)^2}\sum_{i=1}^2 \mathrm{spur}\Big(\vec1\vec1' \cdot \underbrace{E(\vec y_i-\vec1\beta)(\vec y_i - \vec1\beta)'}_{\sigma^2V_i=\sigma^2(\mathbb I+\kappa\vec1\vec1')}\Big) = -\frac{1}{2\sigma^2}\frac{2}{(1+2\kappa)^2}[2+4\kappa] = -\frac{2}{\sigma^2(1+2\kappa)}$$

$$\frac{\partial^2\ell}{\partial\kappa^2} = -\frac12\left\{-\frac{4\cdot2}{(2\kappa+1)^2} - \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^2 \left[(\vec y_i-\vec1\beta)'\vec1\right]^2\frac{-2\cdot2}{(1+2\kappa)^3}\right\}$$

$$E\left(\frac{\partial^2\ell}{\partial\kappa^2}\right) = -\frac12\left\{-\frac{8}{(2\kappa+1)^2} + \frac{4}{\sigma^2(1+2\kappa)^3}\sum_{i=1}^2 \mathrm{spur}\Big(\vec1\vec1' \underbrace{E(\vec y_i-\vec1\beta)(\vec y_i-\vec1\beta)'}_{\sigma^2V_i=\sigma^2(\mathbb I+\kappa\vec1\vec1')}\Big)\right\}$$

$$= \frac{4}{(2\kappa+1)^2} - \frac{2\cdot2}{(2\kappa+1)^3}[2+4\kappa] = \frac{-4}{(2\kappa+1)^2}$$

$\Rightarrow$ Fisher-scoring $\quad \hat{\vec\theta}^{(s+1)} = \hat\theta^{(s)} + \lambda_s I_s^{-1} \vec g_s$

mit $I_s = \begin{pmatrix} +\frac{4\sigma^{-2}}{1+2\kappa} & 0 & 0\\ 0 & +2\sigma^{-4} & +2\frac{1}{\sigma^2(1+2\kappa)} \\ 0 & +2\frac{1}{\sigma^2(1+2\kappa)} & \frac{+4}{(2\kappa+1)^2}\end{pmatrix}$ oder mit 2.10: $Z_i'V_i^{-1}Z_i = \vec1'\left(\mathbb I - \frac{\kappa}{1+2\kappa}\vec1\vec1'\right)\vec1 = 2-4\frac{\kappa}{1+2\kappa} = \frac{2}{1+2\kappa}$

Startwert: $\hat\theta^{(0)} = (\hat\beta^{(0)}, \hat\sigma^{2(0)}, \hat\gamma^{(0)}) = (4, 5, 0.01)$

$$\hat\theta^{(1)} = \hat\theta^{(0)} + I_s^{-1}\vec g_s = \begin{pmatrix}4\\5\\0.01\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}\frac{5.1}{4} & 0 & 0\\ 0 & \multicolumn{2}{c}{\multirow{2}{*}{$\begin{pmatrix}\frac{2}{25} & \frac{2}{5.1}\\ \frac{2}{5.1} & \frac{4}{(1.02)^2}\end{pmatrix}^{-1}$}}\\ 0 & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\ -\frac25 + \frac1{50}\left[20 - \frac{0.16}{1.02}\right]\\ -\frac{2}{1.02}+\frac{1}{10}\frac{32}{1.02^2}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}4\\-1.76\\0.99\end{pmatrix}$$

Dieser Wert ist unzulässig, da die 2. Komponente negativ ist. Halbierung der Schrittweite führt zu $\hat\theta^{(1)} = (4, 1.62, 0.51)'$. Dieser Wert vergrößert die Log-Likelihood von -8.713 für $\hat\theta^{(0)} = \hat\theta_{KQ}$ auf -8.156 für $\hat\theta^{(1)}$ und wird daher akzeptiert. Zum Vergleich: Die Log-Likelihood für $\hat\theta_\infty$ mit $\hat\kappa = 10^6$ ist -18.8, für $\hat\theta_{ML}$ ist -7.566.

f) Herleitung eines EM-Algorithmus nach 2.11:

$$E_{\hat{\theta}_{(s)}}(\vec{b}_i \mid \vec{y}_i = \vec{y}_i) = \hat{\mathbb{B}}_{(s)} Z_i' \hat{V}_{i(s)}^{-1}(\vec{y}_i - X_i \hat{\beta}_{(s)}) = \underbrace{\hat{\sigma}^2_{(s)} \hat{\kappa}_{(s)} \vec{1}' \frac{1}{\hat{\sigma}^2_{(s)}} \left(\mathbb{I} - \frac{\hat{\kappa}_{(s)}}{1+n\hat{\kappa}_{(s)}} \vec{1}\vec{1}'\right)}_{\frac{\hat{\kappa}_{(s)}}{1+n\hat{\kappa}_{(s)}} \vec{1}'} (\vec{y}_i - X_i \hat{\beta}_{(s)})$$

$$\begin{aligned} Var_{\hat{\theta}_{(s)}}(b_i \mid \vec{y} = \vec{y}) &= \hat{\mathbb{B}}_{(s)} - \hat{\mathbb{B}}_{(s)} Z_i' \hat{V}_{i(s)}^{-1} Z_i \hat{\mathbb{B}}_{(s)} = \hat{\sigma}^2_{(s)} \left(\hat{\kappa}_{(s)} - \hat{\kappa}^2_{(s)} \vec{1}' \left(\mathbb{I} - \frac{\hat{\kappa}_{(s)}}{1+n\hat{\kappa}_{(s)}} \vec{1}\vec{1}'\right)\vec{1}\right) \\ &= \hat{\sigma}^2_{(s)} \left(\hat{\kappa}_{(s)} - \hat{\kappa}^2_{(s)} \frac{n}{1+n\hat{\kappa}_{(s)}}\right) = \hat{\sigma}^2_{(s)} \frac{\hat{\kappa}_{(s)}}{1+n\hat{\kappa}_{(s)}} \end{aligned}$$

$$E_{\hat{\theta}_{(s)}}(\vec{\varepsilon}_i \mid \vec{y} = \vec{y}) = \vec{y}_i - X_i \hat{\beta}_{(s)} - Z_i E(\vec{b}_i \mid \vec{y} = \vec{y}) = \vec{y}_i - \vec{1}\left(\hat{\beta}_{(s)} + E(\vec{b}_i \mid \vec{y} = \vec{y})\right)$$

$$Var_{\hat{\theta}_{(s)}}(\vec{\varepsilon}_i \mid \vec{y} = \vec{y}) = Var_{\hat{\theta}_{(s)}}(b_i \mid \vec{y} = \vec{y}) \vec{1}\vec{1}'$$

M-Schritt: $$\hat{\tau}^2_{(s+1)} = \sum_{i=1}^{m} \left\{ \left[\frac{\hat{\kappa}_{(s)}}{1+n\hat{\kappa}_{(s)}} \vec{1}'(\vec{y}_i - \vec{1}\hat{\beta}_{(s)})\right]^2 + \hat{\sigma}^2_{(s)} \frac{\hat{\kappa}_{(s)}}{1+n\hat{\kappa}_{(s)}} \right\}$$

$$\hat{\sigma}^2_{(s+1)} = \sum_{i=1}^{m} \left\{ E_{\hat{\theta}_{(s)}}(\vec{\varepsilon}_i \mid \vec{y} = \vec{y}) E_{\hat{\theta}_{(s)}}(\vec{\varepsilon}_i \mid \vec{y} = \vec{y})' + n Var_{\hat{\theta}_{(s)}}(b_i \mid \vec{y} = \vec{y}) \right\} / N$$

$$\left(\hat{\kappa}_{(s+1)} = \hat{\tau}^2_{(s+1)} / \hat{\sigma}^2_{(s+1)}\right)$$

Für Programm und Grafiken siehe Extrablatt

g) Gemäß Beh. 3.3 können drei Bedingungen für Identifizierbarkeit verletzt sein:

X hat nicht vollen Rang: z.B. $X_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}, i = 1, \dots, m$: $\vec{\beta}$ nicht identifizierbar.

Keine Matrix Z_i vollen Rang: z.B. Z_i wie X_i in a): $\vec{\gamma}$ " "

$N \leq m \cdot q$: $(\sigma^2, \vec{\gamma})$ nicht identifizierbar.