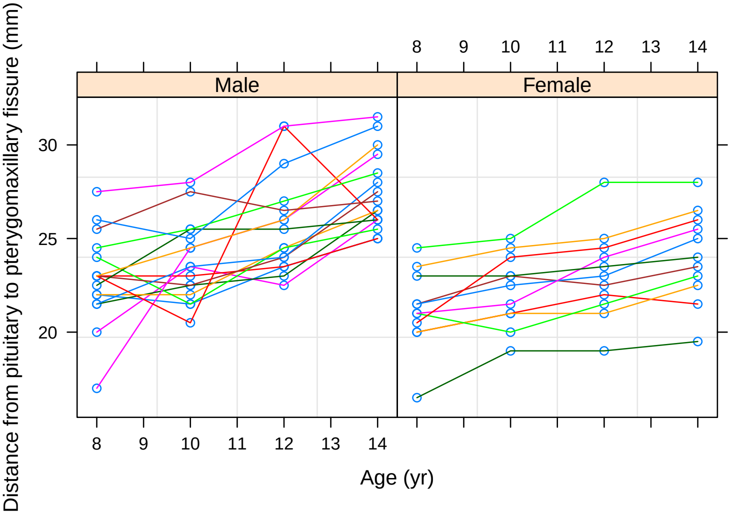
MAT-269: Modelo de Curvas de Crecimiento (GMANOVA)

Felipe Osorio

fosorios.mat.utfsm.cl

Departamento de Matemática, UTFSM

Estudio de Ortodoncia (Potthoff y Roy, 1964)



Modelo de regresión multivariado

- ¿Cómo manipular los distintos grupos e incorporar covariables?
- Se puede extender el modelo mediante incluir una matriz de diseño adicional:
$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z} + \boldsymbol{E},$$
donde $\boldsymbol{Z}$ es matriz conocida.
- El modelo anterior se denomina modelo de curvas de crecimiento o GMANOVA.

Definición 1 (Modelo GMANOVA)

Un modelo GMANOVA (curvas de crecimiento) está definido como

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z} + \boldsymbol{E},$$

donde $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{n\times m}$ y $\boldsymbol{Z} \in \mathbb{R}^{q\times p}$ son matrices de diseño con $\operatorname{rg}(\boldsymbol{X}) = m$ y $\operatorname{rg}(\boldsymbol{Z}) = q$, respectivamente. $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{q\times r}$ es matriz de coeficientes de regresión y

$$\boldsymbol{E} \sim \mathsf{N}_{n,p}(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_n, \boldsymbol{\Sigma}).$$

De ahí que

$$\boldsymbol{Y} \sim \mathsf{N}_{n,p}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{I}_n, \boldsymbol{\Sigma}).$$

EX UMBRA IN SOLEM

Estimación LS

Considere
$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}).$$

El estimador LS en el modelo GMANOVA está definido como la solución del problema:
$$\min_{B} \operatorname{tr} \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) := \min_{B} \operatorname{tr}(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}).$$

En efecto, diferenciando con relación a $\boldsymbol{B}$, obtenemos
$$\begin{aligned}
\mathsf{d}_B \operatorname{tr} \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) &= -\operatorname{tr} \boldsymbol{Z}^\top(\mathsf{d}\boldsymbol{B})^\top\boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}) - \operatorname{tr}(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top\boldsymbol{X}(\mathsf{d}\boldsymbol{B})\boldsymbol{Z} \\
&= -2\operatorname{tr} \boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\boldsymbol{Z}^\top(\mathsf{d}\boldsymbol{B})^\top,
\end{aligned}$$

de ahí que la ecuación de estimación para $\boldsymbol{B}$ es dada por:
$$\boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\boldsymbol{Z}^\top = \boldsymbol{0}.$$

Desde la ecuación de estimación $\boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\boldsymbol{Z}^\top=\boldsymbol{0}$, tenemos que

$$\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{B}}\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top=\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^\top,$$

es decir el estimador LS para $\boldsymbol{B}$ asume la forma:

$$\widehat{\boldsymbol{B}}=(\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}.$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}\mathsf{d}_B^2\operatorname{tr}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B})&=2\operatorname{tr}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X}(\mathsf{d}\boldsymbol{B})\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top(\mathsf{d}\boldsymbol{B})^\top\\&=2(\mathsf{d}\operatorname{vec}\boldsymbol{B})^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top\otimes\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})\,\mathsf{d}\operatorname{vec}\boldsymbol{B},\end{aligned}$$

y como $\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top\otimes\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X}$ es matriz positiva definida, sigue que $\widehat{\boldsymbol{B}}$ es mínimo (global).

Resultado 1 (Distribución del estimador LS de B en GMANOVA)

En el modelo GMANOVA, la distribución del estimador LS, $\widehat{\boldsymbol{B}}$ puede ser escrita como:

$$\widehat{\boldsymbol{B}} \sim \mathsf{N}_{q,p}(\boldsymbol{B}, (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1}, (\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{Z}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}).$$

Es decir,

$$\mathsf{Cov}(\operatorname{vec}\widehat{\boldsymbol{B}}^\top) = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \otimes (\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{Z}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}.$$

Demostración:

El resultado sigue desde $\boldsymbol{Y} \sim \mathsf{N}_{q,p}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}, \boldsymbol{I}_n, \boldsymbol{\Sigma})$ y de la definición del estimador mínimos cuadrados:

$$\widehat{\boldsymbol{B}} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}.$$

Modelo GMANOVA

Para el ejemplo de datos dentales tenemos que:

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{1}_{16} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1}_{11} \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{Z} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 8 & 10 & 12 & 14 \end{pmatrix},$$

mientras que $\boldsymbol{Y} \in \mathbb{R}^{27\times 4}$. De este modo, tenemos que $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ y $\boldsymbol{\Sigma}$ es matriz definida positiva 4×4.

```
library(nlme) # Biblioteca nlme contiene los datos 'dentales'
data(Orthodont)
names(Orthodont)
[1] "distance" "age"      "Subject"  "Sex"

# matriz de respuestas
y <- Orthodont$distance
y <- matrix(y, ncol = 4, byrow = TRUE)

y
      [,1] [,2] [,3] [,4]
 [1,] 26.0 25.0 29.0 31.0
 [2,] 21.5 22.5 23.0 26.5
 [3,] 23.0 22.5 24.0 27.5
 [4,] 25.5 27.5 26.5 27.0

...

[24,] 23.0 23.0 23.5 24.0
[25,] 20.0 21.0 22.0 21.5
[26,] 16.5 19.0 19.0 19.5
[27,] 24.5 25.0 28.0 28.0
```

Comandos en R

```
# matrices de diseno
x <- cbind(c(rep(1,16), rep(0,11)), c(rep(0,16), rep(1,11)))
z <- rbind(rep(1,4), c(8,10,12,14))

# contruye estimador para B
xx <- crossprod(x)
zz <- crossprod(t(z))
xyz <- crossprod(x, y %*% t(z))
B <- solve(xx, xyz %*% solve(zz))

# Salida
B
       Intercept       age
Male    16.34063 0.7843750
Female  17.37273 0.4795455
```

Comandos en R

```
# construye estimador para Sigma
res <- y - x %*% B %*% z
n <- nrow(y)
Sigma <- crossprod(res) / n

# Salida
Sigma
         [,1]     [,2]     [,3]     [,4]
[1,] 5.054480 2.457757 3.615701 2.531994
[2,] 2.457757 3.958162 2.717032 3.039186
[3,] 3.615701 2.717032 5.978775 3.821699
[4,] 2.531994 3.039186 3.821699 4.629217

# Calcula covarianza (estimada) del estimador de B
kronecker(solve(xx), solve(zz, z %*% Sigma %*% t(z)) %*% solve(zz))
            [,1]         [,2]       [,3]        [,4]
[1,]  0.96056230 -0.071385371  0.0000000  0.00000000
[2,] -0.07138537  0.006848071  0.0000000  0.00000000
[3,]  0.00000000  0.000000000  1.3971815 -0.10383327
[4,]  0.00000000  0.000000000 -0.1038333  0.00996083
```

Estimación ML GMANOVA

- Primeramente, asumiremos que la matriz $\boldsymbol{\Sigma}$ es no estructurada, es decir corresponde a una matriz simétrica y definida positiva.

- Luego consideraremos estructuras lineales del tipo:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{Z}^\top \boldsymbol{\Gamma} \boldsymbol{Z} + \boldsymbol{G}^\top \boldsymbol{\Phi} \boldsymbol{G},$$

  donde $\boldsymbol{G} \in \mathcal{Q}$ tal que

$$\mathcal{Q} = \{\boldsymbol{G} : \boldsymbol{G} \in \mathbb{R}^{p\times(p-m)}, \boldsymbol{G}\boldsymbol{Z}^\top = \boldsymbol{0}\}.$$

  Clase que es conocida como estructura de covarianza (simple) de Rao.

Sea $\boldsymbol{\Theta} = (\boldsymbol{B}, \boldsymbol{\Sigma})$, entonces la función de log-verosimilitud adopta la forma

$$\begin{aligned}\ell(\boldsymbol{\Theta}) &= \log\Big\{(2\pi)^{-np/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-n/2}\exp\big\{-\tfrac{1}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B})\big\}\Big\} \\ &= -\frac{np}{2}\log 2\pi - \frac{n}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}),\end{aligned}$$

donde

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}),$$

corresponde a la matriz de suma de productos cruzados (de errores).

Estimación ML en GMANOVA: caso no estructurado

Diferenciando con relación a $\boldsymbol{B}$, obtenemos:

$$\mathsf{d}_B\, \ell(\boldsymbol{\Theta}) = -\tfrac{1}{2} \operatorname{tr} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \, \mathsf{d}_B\, \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}),$$

por otro lado,

$$\mathsf{d}_B\, \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{\Theta}) = -\operatorname{tr}\Big\{(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top \boldsymbol{X}(\mathsf{d}\boldsymbol{B})\boldsymbol{Z} + \boldsymbol{Z}^\top(\mathsf{d}\boldsymbol{B})^\top \boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\Big\},$$

De este modo, recordando que $\operatorname{tr} \boldsymbol{A} = \operatorname{tr} \boldsymbol{A}^\top$, obtenemos

$$\mathsf{d}_B\, \ell(\boldsymbol{\Theta}) = \operatorname{tr} \boldsymbol{Z}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top \boldsymbol{X}\, \mathsf{d}\boldsymbol{B}.$$

Por tanto, la ecuación de estimación para $\boldsymbol{B}$ (obtenida desde $\mathsf{d}_B\, \ell(\boldsymbol{\Theta}) = 0$) asume la forma:

$$\boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top = \boldsymbol{0},$$

Estimación ML en GMANOVA: caso no estructurado

Ahora, diferenciando con relación a $\boldsymbol{\Sigma}$, obtenemos:

$$\begin{aligned}\mathsf{d}_{\Sigma}\,\ell(\boldsymbol{\Theta}) &= -\frac{n}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\,\mathsf{d}\boldsymbol{\Sigma} + \frac{1}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathsf{d}\boldsymbol{\Sigma})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) \\ &= -\frac{n}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\Big(\boldsymbol{\Sigma} - \frac{1}{n}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B})\Big)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\,\mathsf{d}\boldsymbol{\Sigma}.\end{aligned}$$

De este modo, la ecuación de estimación para $\boldsymbol{\Sigma}$ es dada por:

$$n\boldsymbol{\Sigma} - \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{0}.$$

Por tanto, los MLEs de $\boldsymbol{B}$ y $\boldsymbol{\Sigma}$ deben satisfacer el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\widehat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top = \boldsymbol{0} \\ &n\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} - \boldsymbol{Q}(\widehat{\boldsymbol{B}}) = \boldsymbol{0}. \end{aligned} \tag{1}$$

El siguiente resultado, presenta la solución $(\widehat{\boldsymbol{B}}, \widehat{\boldsymbol{\Sigma}})$ para las ecuaciones de verosimilitud anteriores.

Resultado 2 (MLE-UN en GMANOVA)

Para el modelo GMANOVA con matrices de diseño $\boldsymbol{X}$, $\boldsymbol{Z}$ de rango completo. Se tiene que la solución de la ecuación de verosimilitud en (1) es única y es dada por

$$\widehat{\boldsymbol{B}} = (\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{Y}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1},$$

y

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{n}(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{B}}\boldsymbol{Z})^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{B}}\boldsymbol{Z})$$

donde $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{Y}^\top(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{H}_X)\boldsymbol{Y}$ y $\boldsymbol{H}_X = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}$.

Demostración:

Considere

$$
\begin{aligned}
(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})
&= \{(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y})+(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\}^\top\{(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y})+(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\}\\
&= \boldsymbol{Y}^\top(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}_X)\boldsymbol{Y}+\boldsymbol{Y}^\top(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}_X)(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\\
&\quad+(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}_X)\boldsymbol{Y}+(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}),
\end{aligned}
$$

donde $\boldsymbol{H}_X = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top$ como $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}_X)\boldsymbol{H}_X = \boldsymbol{0}$[1], sigue que

$$
\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{Y}^\top(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}_X)\boldsymbol{Y}+(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}).
$$

Sea $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}$, luego podemos escribir la ecuación de verosimilitud $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B})$ $-n\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{0}$, como:

$$
n\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{S}+\boldsymbol{U}^\top\boldsymbol{U}, \qquad \boldsymbol{S} = \boldsymbol{Y}^\top(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}_X)\boldsymbol{Y}.
$$

[1] También, $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{H}_X)\boldsymbol{X} = \boldsymbol{0}$

Ahora

$$\frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = (\boldsymbol{S} + \boldsymbol{U}^\top\boldsymbol{U})^{-1} = \boldsymbol{S}^{-1} - \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top)^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}.$$

Notando que

$$\begin{aligned}
&[\boldsymbol{I} - (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top)^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}](\boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top) \\
&\quad = (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top)^{-1}[\boldsymbol{I} - \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top - \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top](\boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top) \\
&\quad = \boldsymbol{I},
\end{aligned}$$

de donde sigue que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{n}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{U}^\top &= \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top[\boldsymbol{I} - (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top)^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}] \\
&= \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top)^{-1}
\end{aligned}$$

Desde la ecuación de verosimulitud para $\boldsymbol{B}$, tenemos

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top &= \boldsymbol{0} \\
\boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top &= \boldsymbol{0} \\
\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top &= \boldsymbol{0} \\
n\boldsymbol{X}^\top(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top)^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top &= \boldsymbol{0}
\end{aligned}
$$

Sea $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{U}^\top$, de ahí que la ecuación de estimación puede ser escrita como:

$$
n\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top = \boldsymbol{0},
$$

o bien,

$$
\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top = \boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{H}_X\boldsymbol{Y}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top.
$$

Tenemos que $\boldsymbol{X}$ y $\boldsymbol{Z}$ son de rango (columna y fila) completo,

$$\begin{aligned}
\widehat{\boldsymbol{B}} &= (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{H}_X \boldsymbol{Y}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top (\boldsymbol{Z}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1} \\
&= (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{Y}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top (\boldsymbol{Z}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1} \\
&= (\boldsymbol{X}^\top\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{Y}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top (\boldsymbol{Z}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1},
\end{aligned}$$

donde

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{Y}^\top (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{H}_X)\boldsymbol{Y}.$$

De ahí que

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} = \frac{1}{n}\boldsymbol{Q}(\widehat{\boldsymbol{\Sigma}})$$

Comandos en R

```
## Supondremos que los datos 'x', 'y', 'z' estan cargados en
## nuestro directorio de trabajo.

# calculos en el modelo de regresion multivariado
xy <- crossprod(x, y)
r  <- y - x %*% solve(xx, xy)
S  <- crossprod(r)

# Salida
S
          [,1]      [,2]      [,3]      [,4]
[1,] 135.38636  67.92045  97.75568  67.75568
[2,]  67.92045 104.61932  73.17898  82.92898
[3,]  97.75568  73.17898 161.39347 103.26847
[4,]  67.75568  82.92898 103.26847 124.64347
```

Comandos en R

```
# construye estimador para B
zsz <- z %*% solve(S, t(z))
rhs <- solve(S, t(z) %*% solve(zsz))
B <- solve(xx, xy) %*% rhs

# Salida
B
        Intercept       age
Male     15.84229 0.8268033
Female   17.42537 0.4763647

# construye estimador para Sigma
res <- y - x %*% B %*% z
n <- nrow(y)
Sigma <- crossprod(res) / n

# Salida
Sigma
         [,1]     [,2]     [,3]     [,4]
[1,] 5.119199 2.440902 3.610510 2.522243
[2,] 2.440902 3.927948 2.717514 3.062349
[3,] 3.610510 2.717514 5.979798 3.823461
[4,] 2.522243 3.062349 3.823461 4.617984
```

¿Existe alguna condición en la que el estimador ML bajo el modelo GMANOVA

$$\widehat{\boldsymbol{B}}_S = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{Y} \boldsymbol{S}^{-1} \boldsymbol{Z}^\top (\boldsymbol{Z} \boldsymbol{S}^{-1} \boldsymbol{Z}^\top)^{-1},$$

coincida con el estimador LS?

$$\widehat{\boldsymbol{B}} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{Y} \boldsymbol{Z}^\top (\boldsymbol{Z} \boldsymbol{Z}^\top)^{-1},$$

Observación:

La respuesta a la pregunta anterior puede ser resuelto mediante modelar la estructura de covarianza.

Definición 2 (Estructura de covarianza simple de Rao)

La estructura de covarianza simple de Rao (SCS) es dada por

$$\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{Z}^\top \boldsymbol{\Gamma} \boldsymbol{Z} + \boldsymbol{G}^\top \boldsymbol{\Phi} \boldsymbol{G},$$

donde $\boldsymbol{Z} \in \mathbb{R}^{q \times p}$ $(\mathrm{rg}(\boldsymbol{Z}) = q)$ y $\boldsymbol{G} \in \mathcal{Q}$, con

$$\mathcal{G} = \{\boldsymbol{G} : \boldsymbol{G} \in \mathbb{R}^{p \times (p-q)}, \boldsymbol{G}\boldsymbol{Z}^\top = \boldsymbol{0} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{G}^\top\}.$$

Resultado 3 (MLE-SCS en GMANOVA)

Para el modelo GMANOVA con estrutura de covarianza simple de Rao, los estimadores ML pueden ser expresados como:

$$\widehat{\boldsymbol{B}} = (\boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{X})^{-1} \boldsymbol{X}^\top \boldsymbol{Y} \boldsymbol{Z}^\top (\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}$$

$$\widehat{\boldsymbol{\Gamma}} = \frac{1}{n} (\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1} \boldsymbol{Z}\boldsymbol{S}\boldsymbol{Z}^\top (\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}$$

$$\widehat{\boldsymbol{\Phi}} = \frac{1}{n} (\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1} \boldsymbol{G}\boldsymbol{Y}^\top \boldsymbol{Y}\boldsymbol{G}^\top (\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}.$$

Estimación ML de los componentes de Σ en GMANOVA

Sea
$$\widetilde{\boldsymbol{Z}} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{Z} \\ \boldsymbol{G} \end{pmatrix}.$$
Note que $\boldsymbol{\Sigma} = |\boldsymbol{Z}^\top \boldsymbol{\Gamma} \boldsymbol{Z} + \boldsymbol{G}^\top \boldsymbol{\Phi} \boldsymbol{G}|$, puede ser escrito como
$$\begin{aligned}
|\boldsymbol{\Sigma}| &= \left| (\boldsymbol{Z}^\top, \boldsymbol{G}^\top) \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{\Phi} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{Z} \\ \boldsymbol{G} \end{pmatrix} \right| = \left| \begin{pmatrix} \boldsymbol{Z} \\ \boldsymbol{G} \end{pmatrix} (\boldsymbol{Z}^\top, \boldsymbol{G}^\top) \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{\Phi} \end{pmatrix} \right| \\
&= \begin{vmatrix} \boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \boldsymbol{\Gamma} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{\Phi} \end{vmatrix} = |\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top||\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top||\boldsymbol{\Gamma}||\boldsymbol{\Phi}|.
\end{aligned}$$
Por otro lado,
$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Sigma}^{-1} &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{Z} \\ \boldsymbol{G} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma}^{-1} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{\Phi}^{-1} \end{pmatrix} (\boldsymbol{Z}^\top, \boldsymbol{G}^\top)^{-1} \\
&= (\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}, \boldsymbol{G}^\top(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}) \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Gamma}^{-1} & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{\Phi}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{Z} \\ (\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{G} \end{pmatrix} \\
&= \boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{\Gamma}^{-1}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{Z} + \boldsymbol{G}^\top(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{-1}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{G}
\end{aligned}$$

Estimación ML en GMANOVA: estructura simple de Rao

Considere $\boldsymbol{\Theta} = (\boldsymbol{B}, \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\Phi})$, entonces la función de log-verosimilitud es dada por

$$\begin{aligned}\ell(\boldsymbol{\Theta}) &= \log \Big\{(2\pi)^{-np/2}|\boldsymbol{\Sigma}|^{-n/2} \exp\big\{ -\tfrac{1}{2} \operatorname{tr} \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B})\big\}\Big\} \\ &= -\frac{np}{2}\log 2\pi - \frac{n}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}| - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}),\end{aligned}$$

donde

$$\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z})^\top(\boldsymbol{Y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}).$$

Note que

$$\log|\boldsymbol{\Sigma}| = \log|\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top| + \log|\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top| + \log|\boldsymbol{\Gamma}| + \log|\boldsymbol{\Phi}|.$$

Por otro lado,

$$\begin{aligned}
\operatorname{tr}\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) &= \operatorname{tr}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{\Gamma}^{-1}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) \\
&\quad + \operatorname{tr}\boldsymbol{G}^\top(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{-1}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{B}) \\
&= \operatorname{tr}\boldsymbol{\Gamma}^{-1}(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B})^\top(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}) \\
&\quad + \operatorname{tr}\boldsymbol{\Phi}^{-1}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Y}^\top\boldsymbol{Y}\boldsymbol{G}^\top(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}
\end{aligned}$$

Finalmente, la función de log-verosimilitud para $\boldsymbol{\Theta} = (\boldsymbol{B}, \boldsymbol{\Gamma}, \boldsymbol{\Phi})$ asume la forma

$$\begin{aligned}
\ell(\boldsymbol{\Theta}) = &-\frac{np}{2}\log 2\pi - \frac{n}{2}\log|\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top| - \frac{n}{2}\log|\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top| \\
&- \frac{n}{2}\log|\boldsymbol{\Gamma}| - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{\Gamma}^{-1}(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B})^\top(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}) \\
&- \frac{n}{2}\log|\boldsymbol{\Phi}| - \frac{1}{2}\operatorname{tr}\boldsymbol{\Phi}^{-1}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Y}^\top\boldsymbol{Y}\boldsymbol{G}^\top(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}.
\end{aligned}$$

De este modo, diferenciando con relación a $\mathbf{\Gamma}$, obtenemos:

$$\begin{aligned}\mathsf{d}_{\Gamma}\,\ell(\mathbf{\Theta}) &= -\frac{n}{2}\operatorname{tr}\mathbf{\Gamma}^{-1}\,\mathrm{d}\mathbf{\Gamma} \\ &\quad + \frac{1}{2}\operatorname{tr}\mathbf{\Gamma}^{-1}(\mathrm{d}\mathbf{\Gamma})\mathbf{\Gamma}^{-1}(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^{\top}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{\top})^{-1}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B})^{\top}(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^{\top}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{\top})^{-1}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}) \\ &= -\frac{n}{2}\operatorname{tr}\mathbf{\Gamma}^{-1}\Big\{\mathbf{\Gamma}-\frac{1}{n}(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^{\top}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{\top})^{-1}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B})^{\top}(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^{\top}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{\top})^{-1}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{B})\Big\}\mathbf{\Gamma}^{-1}\,\mathrm{d}\mathbf{\Gamma}.\end{aligned}$$

Por tanto el estimador ML para $\mathbf{\Gamma}$ es dado por:

$$\begin{aligned}\widehat{\mathbf{\Gamma}} &= \frac{1}{n}(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^{\top}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{\top})^{-1}-\boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{B}})^{\top}(\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Z}^{\top}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{\top})^{-1}-\boldsymbol{X}\widehat{\boldsymbol{B}}) \\ &= \frac{1}{n}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{\top})^{-1}\boldsymbol{Z}\boldsymbol{S}\boldsymbol{Z}^{\top}(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^{\top})^{-1}\end{aligned}$$

De este modo, diferenciando con relación a $\mathbf{\Phi}$, obtenemos:

$$
\begin{aligned}
\mathsf{d}_{\Phi}\,\ell(\mathbf{\Theta}) &= -\frac{n}{2}\operatorname{tr}\mathbf{\Phi}^{-1}\,\mathsf{d}\mathbf{\Phi} + \frac{1}{2}\operatorname{tr}\mathbf{\Phi}^{-1}(\mathsf{d}\mathbf{\Phi})\mathbf{\Phi}^{-1}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\top})^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Y}^{\top}\boldsymbol{Y}\boldsymbol{G}^{\top}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\top})^{-1} \\
&= -\frac{n}{2}\operatorname{tr}\mathbf{\Phi}^{-1}\Big\{\mathbf{\Phi} - \frac{1}{n}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\top})^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Y}^{\top}\boldsymbol{Y}\boldsymbol{G}^{\top}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\top})^{-1}\Big\}\mathbf{\Phi}^{-1}\,\mathsf{d}\mathbf{\Phi}.
\end{aligned}
$$

Así, el estimador ML para $\mathbf{\Phi}$ resulta:

$$
\widehat{\mathbf{\Phi}} = \frac{1}{n}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\top})^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Y}^{\top}\boldsymbol{Y}\boldsymbol{G}^{\top}(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\top})^{-1}.
$$

Finalmente, note que

$$\boldsymbol{G}^\top(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{G} = \boldsymbol{I}_q - \boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{Z}.$$

Esto permite construir una matriz asociada a $\boldsymbol{G}$ tal que $\boldsymbol{G}\boldsymbol{Z}^\top = \boldsymbol{0}$ y que además

$$\widehat{\boldsymbol{\Sigma}} = \boldsymbol{Z}^\top\widehat{\boldsymbol{\Gamma}}\boldsymbol{Z} + \boldsymbol{G}^\top\widehat{\boldsymbol{\Phi}}\boldsymbol{G}.$$

Basta apreciar que

$$\begin{aligned}\boldsymbol{G}^\top\widehat{\boldsymbol{\Phi}}\boldsymbol{G} &= \frac{1}{n}\boldsymbol{G}^\top(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{G}\boldsymbol{Y}^\top\boldsymbol{Y}\boldsymbol{G}^\top(\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^\top)^{-1}\boldsymbol{G} \\ &= \frac{1}{n}(\boldsymbol{I}_q - \boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{Z})\boldsymbol{Y}^\top\boldsymbol{Y}(\boldsymbol{I}_q - \boldsymbol{Z}^\top(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{Z}^\top)^{-1}\boldsymbol{Z}).\end{aligned}$$

```
## Supondremos que los datos 'x', 'y', 'z' estan cargados en
## nuestro directorio de trabajo.

# calculos en el modelo de regresion multivariado
xy <- crossprod(x, y)
r  <- y - x %*% solve(xx, xy)
S  <- crossprod(r)

# Salida
S
          [,1]      [,2]      [,3]      [,4]
[1,] 135.38636  67.92045  97.75568  67.75568
[2,]  67.92045 104.61932  73.17898  82.92898
[3,]  97.75568  73.17898 161.39347 103.26847
[4,]  67.75568  82.92898 103.26847 124.64347
```

Comandos en R

```
# contruye estimador para B
xx <- crossprod(x)
zz <- crossprod(t(z))
xyz <- crossprod(x, y %*% t(z))
B <- solve(xx, xyz %*% solve(zz))

# Salida
B
       Intercept       age
Male    16.34063 0.7843750
Female  17.37273 0.4795455

# construye estimador para Gamma
zsz <- z %*% S %*% t(z)
Gamma <- solve(zz, zsz %*% solve(zz)) / n

# Salida
Gamma
          [,1]       [,2]
[1,] 15.368997 -1.1421659
[2,] -1.142166  0.1095691
```

Comandos en R

```
p <- ncol(z)
res <- diag(p) - t(z) %*% solve(zz, z)
res
     [,1] [,2] [,3] [,4]
[1,]  0.3 -0.4 -0.1  0.2
[2,] -0.4  0.7 -0.2 -0.1
[3,] -0.1 -0.2  0.7 -0.4
[4,]  0.2 -0.1 -0.4  0.3

yy <- crossprod(y)
gg <- res %*% yy %*% res /n
gg
           [,1]        [,2]       [,3]        [,4]
[1,]  0.4084259 -0.66972222  0.1141667  0.14712963
[2,] -0.6697222  1.40500000 -0.8008333  0.06555556
[3,]  0.1141667 -0.80083333  1.2591667 -0.57250000
[4,]  0.1471296  0.06555556 -0.5725000  0.35981481

# construye estimador para Sigma
Sigma <- crossprod(z, Gamma %*% z) + gg

# Salida
Sigma
         [,1]     [,2]     [,3]     [,4]
[1,] 4.515192 2.905818 3.158481 2.660218
[2,] 2.905818 4.887591 2.588808 3.362248
[3,] 3.158481 2.588808 4.994136 3.507796
[4,] 2.660218 3.362248 3.507796 5.223715
```