Listy Biometryczne – Biometrical Letters
Vol. 29 (1992), No. 2, 45-58

Zastosowanie zmodyfikowanej metody REML do estymacji parametrów w układzie blokowym z losowymi efektami blokowymi

Krzysztof Kłaczyński, Anna Molińska i Krzysztof Moliński

Katedra Metod Matematycznych i Statystycznych
Akademii Rolniczej w Poznaniu

Streszczenie

W pracy rozważany jest problem estymacji komponentów wariancji i wektora parametrów obiektowych w mieszanym modelu blokowym, w którym efekty bloków są zmiennymi losowymi. W modelu tym przyjmuje się, że komponent wariancji związany z błędem jednostek doświadczalnych jest dodatni oraz że iloraz obu komponentów jest nie mniejszy od pewnej stałej. Dla uzyskania wartosci rozważanych estymatorów wykorzystano metodę REML oraz metodę programowania kwadratowego.

1. Wstęp

Rozważmy układ blokowy, w którym v obiektów rozmieszczono w b blokach, wylosowanych z nieskończonej populacji bloków, zgodnie z planem doświadczenia scharakteryzowanym $(v\times b)$-wymiarową macierzą incydencji $\mathbf{N}$. Niech $\mathbf{r} = (r_1, r_2, ..., r_v)'$ będzie v-wymiarowym wektorem replikacji obiektów, $\mathbf{k} = (k_1, k_2, ..., k_b)'$ b-wymiarowym wektorem pojemności blokowych, natomiast $n = \sum_{i=1}^{v} r_i = \sum_{i=1}^{b} k_i$ liczbą jednostek doświadczalnych. Model liniowy dla obserwacji pochodzących z doświadczenia założonego w takim układzie blokowym przyjmuje postać

$$\mathbf{y} = \mathbf{\Delta}'\boldsymbol{\tau} + \mathbf{D}'\boldsymbol{\beta} + \mathbf{e}\ , \tag{1.1}$$

Słowa kluczowe: mieszany model blokowy, komponenty wariancji, REML, (uogólniona) metoda najmniejszych kwadratów, zagadnienie programowania kwadratowego.

gdzie $\mathbf{y}$ jest n-wymiarowym wektorem obserwowalnych zmiennych losowych, $\mathbf{\Delta}'$ jest $(n \times v)$-wymiarową macierzą układu dla obiektów, $\mathbf{D}'$ jest $(n \times b)$-wymiarową macierzą układu dla bloków, $\boldsymbol{\tau}$ jest v-wymiarowym wektorem parametrów obiektowych, $\boldsymbol{\beta}$ jest b-wymiarowym wektorem efektów blokowych zaś $\mathbf{e}$ jest n-wymiarowym wektorem błędów eksperymentalnych.

O wektorach losowych $\mathbf{e}$ oraz $\boldsymbol{\beta}$ założymy, że są niezależne, oraz że $\mathbf{e} \sim N_n(\mathbf{0}, \sigma_e^2 \mathbf{I}_n)$, $\boldsymbol{\beta} \sim N_b(\mathbf{0}, \sigma_b^2 \mathbf{I}_b)$, gdzie $\sigma_e^2 > 0$ oraz $\sigma_b^2 \geq 0$ są tzw. komponentami wariancji, reprezentującymi odpowiednio wariancję błędów eksperymentalnych oraz wariancję bloków, $\mathbf{0}$ jest wektorem zerowym o odpowiednim wymiarze, zaś $\mathbf{I}_n$ oraz $\mathbf{I}_v$ są odpowiednio macierzami jednostkowymi n-tego oraz v-tego stopnia. W konsekwencji wektor losowy $\mathbf{y}$ posiada rozkład normalny z wartością oczekiwaną $E(\mathbf{y}) = \mathbf{\Delta}'\boldsymbol{\tau}$ oraz macierzą dyspersji

$$D(\mathbf{y}) = \sigma_e^2(\mathbf{D}'\,\mathbf{D}\,\gamma + \mathbf{I}_n) \equiv \mathbf{V}\ , \tag{1.2}$$

gdzie $\gamma = \sigma_b^2 / \sigma_e^2$ jest ilorazem komponentów wariancji.

Uwzględniając postać wartości oczekiwanej i dyspersji wektora $\mathbf{y}$ można model (1.1) zapisać w postaci

$$\left\{\ \mathbf{y},\ \mathbf{\Delta}'\boldsymbol{\tau},\ \sigma_b^2\mathbf{D}'\,\mathbf{D} + \sigma_e^2\mathbf{I}_n\ \right\}. \tag{1.3}$$

W pracy w istotny sposób wykorzystywane będzie założenie o dodatniej określoności macierzy $\mathbf{V}$. Należy zauważyć, że powyżej podane założenie modelowe $\sigma_e^2 > 0$, $\sigma_b^2 \geq 0$ jest wystarczające dla zapewnienia macierzy (1.2) tej własności. Należy jednak zwrócić uwagę na fakt iż ograniczenia dotyczące komponentów wariancji, pozwalające jednocześnie na uzyskanie pożądanej własności macierzy $\mathbf{V}$, można wyrazić ogólniej w postaci

$$\sigma_e^2 > 0 \ \text{ oraz } \ \gamma \geq d\ , \tag{1.4}$$

gdzie d reprezentuje liczbę nieujemną. W sytuacji, gdy d=0 uzyskujemy naturalne założenie dotyczące nieujemności komponentów wariancji, dla d>0 dostajemy inne ograniczenia, które nie są sprzeczne z ograniczeniami naturalnymi i dodatkowo zapewniają wykorzystanie posiadanej wiedzy a priori o komponentach.

Jednym z ważniejszych problemów związanych z analizą modelu (1.1) jest estymacja liniowych funkcji wektora parametrów obiektowych $\boldsymbol{\tau}$. Z uwagi na fakt, że macierz układu dla obiektów $\mathbf{\Delta}'$ jest pełnego rzędu kolumnowego, wszystkie funkcje parametryczne $\mathbf{l}'\boldsymbol{\tau}$ są w tym modelu estymowalne. Zatem dla rozwiązania interesującego nas problemu wystarczy wyznaczyć estymator wektora parametrów obiektowych $\boldsymbol{\tau}$ (patrz np. Baksalary, Kala, 1978).

W pracy wykorzystano teorię estymacji w ogólnych modelach liniowych do wskazania możliwości uzyskania najlepszego liniowego nieobciążonego estymatora wektora $\boldsymbol{\tau}$. Okazuje się, że jest to możliwe w szczególnych przypadkach modelu (1.1), w których wyznaczenie estymatora wektora $\boldsymbol{\tau}$ nie zależy od komponentów wariancji σ_b^2 i σ_e^2. W sytuacji ogólniejszej zastosowano dwuetapową metodę estymacji REML (modyfikację metody największej wiarygodności ML). W jej pierwszym kroku wyznaczane są oceny nieznanych komponentów wariancji, które w etapie następnym wykorzystane są jako prawdziwe wartości komponentów wariancji w macierzy (1.2) do wyznaczenia estymatora wektora $\boldsymbol{\tau}$.

Z uwagi na fakt, że metoda REML nie gwarantuje uzyskania ocen komponentów wariancji spełniających ograniczenia (1.4), w pracy metodę tę zmodyfikowano dodatkowo w ten sposób, aby uzyskane oceny ograniczenia te spełniały. Modyfikacja ta polega na uzupełnieniu pierwszego etapu metody REML odpowiednio sformułowanym zagadnieniem programowania kwadratowego. Okazuje się, że wprowadzenie tej modyfikacji może być uzasadnione nie tylko względami teoretycznymi. W paragrafie ilustrującym zastosowanie metody zwrócono uwagę na korzyści numeryczne wynikające z jej zastosowania.

2. Estymacja parametrów obiektowych

Przy rozwiązywaniu zagadnienia estymacji funkcji parametrów stałych naturalnym żądaniem jest, aby uzyskany estymator był najlepszym liniowym estymatorem nieobciążonym. Stosując dla modelu (1.3) rezultaty ogólnej teorii modelu liniowego (patrz np. Kala, 1990, Suplement, lemat A i B) możemy stwierdzić, że z uwagi na macierz $\mathbf{I}$ występującą w macierzy dyspersji (1.2), warunek

$$\mathcal{R}(\mathbf{D}'\,\mathbf{D}\boldsymbol{\Delta}') \subset \mathcal{R}(\boldsymbol{\Delta}') \quad , \qquad (2.1)$$

jest konieczny i dostateczny na to aby jedynym estymatorem o wyżej wspomnianych własnościach był estymator najmniejszych kwadratów

$$\hat{\boldsymbol{\tau}} = (\boldsymbol{\Delta\Delta}')^{-1}\boldsymbol{\Delta}\mathbf{y} \quad ,$$

gdzie symbol $\mathcal{R}(\cdot)$ oznacza podprzestrzeń rozpiętą na kolumnach odpowiedniej macierzy.

Warunek (2.1) okazuje się być dość restryktywnym wymaganiem. Jak zauważyli np. Kala (1990), Caliński i Kageyama (1988), relacja (2.1) jest spełniona dla pewnych układów blokowych ortogonalnych.

W szerszej klasie modeli, tzn. w sytuacjach, gdy warunek (2.1) nie jest spełniony, powszechnie stosowaną metodą wyznaczania estymatora parametrów stałych jest uogólniona metoda najmniejszych kwadratów (patrz np. Aitken, 1935, Zyskind i Martin, 1969).

W wyniku rozwiązania układu równań normalnych właściwego dla modelu (1.1) uzyskujemy estymator

$$\hat{\boldsymbol{\tau}} = (\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^{-1}\boldsymbol{\Delta}')^{-1}\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y} \quad , \qquad (2.2)$$

który w zasadniczy sposób zależy od macierzy dyspersji $\mathbf{V}$ przedstawionej w (1.2). Macierz ta jest nieznana, z uwagi na obecność nieznanych komponentów wariancji σ_b^2 oraz σ_e^2. Zatem wyznaczenie estymatora (2.2) uzależnione jest od znajomości ocen tych komponentów. Oczywistym jest, że uzyskany tą drogą estymator wektora τ nie będzie najlepszym liniowym nieobciążonym estymatorem. Jak dowodzą Kackar i Harville (1981) estymator ten będzie nieobciążony o ile estymatory komponentów wariancji będą niezmienniczymi i parzystymi funkcjami $\mathbf{y}$.

3. Estymacja komponentów wariancji

Spośród wielu metod estymacji komponentów wariancji, wybrano w pracy modyfikację dobrze znanej metody największej wiarygodności (ML), zwaną metodą REML (patrz np. Patterson i Thompson, 1971, Corbeil i Searle, 1976). Stąd, uzasadnione jest przyjęcie we wstępie pracy założenia o normalności rozkładu zmiennej losowej $\mathbf{y}$. Modyfikacja metody ML, a tym samym zasada metody REML, polega na wydzieleniu w funkcji gęstości wielowymiarowego rozkładu normalnego dwóch czynników, z których jeden wystarcza dla estymacji komponentów wariancji (nie zależy od wektora parametrów stałych), drugi zaś zależy zarówno od wektora parametrów stałych jak i od komponentów wariancji.

W rozważanym w pracy modelu (1.1) proces ten daje się zapisać w postaci

$$g(\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma}, \tau) = g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma}) \cdot g_2(\mathbf{M}_2\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma}, \tau) \ ,$$

gdzie $g(\cdot \mid \cdot, \cdot)$, $g_1(\cdot \mid \cdot)$, $g_2(\cdot \mid \cdot, \cdot)$ oznaczają odpowiednio funkcję gęstości wielowymiarowego rozkładu normalnego oraz wymienione wyżej czynniki, na które tę funkcję daje się rozłożyć, przy czym macierz $\mathbf{M}_1$ jest podmacierzą pełnego rzędu wierszowego macierzy $\mathbf{I}_n - \boldsymbol{\Delta}'(\boldsymbol{\Delta}\boldsymbol{\Delta}')^{-1}\boldsymbol{\Delta}$, $\mathbf{M}_2 = \boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^{-1}$, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_b^2, \sigma_e^2)'$. Dalsze postępowanie w metodzie REML polega na niezależnej maksymalizacji funkcji $g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma})$ oraz $g_2(\mathbf{M}_2\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma}, \tau)$.

Maksymalizacja pierwszej z nich prowadzi do wyznaczenia ocen składowych wektora $\boldsymbol{\sigma}$. Postępowanie to sprowadza się w rezultacie do rozwiązania układu równań nieliniowych.

$$\mathbf{S}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{q} \ , \tag{3.1}$$

w którym elementy s_{ij} macierzy $\mathbf{S}$ oraz q_i wektora $\mathbf{q}$ $(i, j = 1,2)$ mają następującą postać ogólną (zależną od nieznanych σ_b^2 i σ_e^2)

$$\begin{aligned} s_{ij} &= \mathrm{tr}\{\mathbf{P}\mathbf{V}_i\mathbf{P}\mathbf{V}_j\} \quad i, j = 1,2 \ , \\ q_i &= \mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{V}_i\mathbf{P}\mathbf{y} \ , \quad i = 1,2 \ , \end{aligned} \tag{3.2}$$

gdzie $\mathbf{V}_1=\mathbf{D}'\mathbf{D}$, $\mathbf{V}_2=\mathbf{I}_n$, $\mathbf{P}=\mathbf{V}^{-1}-\mathbf{V}^{-1}\boldsymbol{\Delta}'(\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^{-1}\boldsymbol{\Delta}')^{-1}\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^{-1}$, a $\mathrm{tr}\{\cdot\}$ oznacza ślad macierzy (patrz np. Searle, 1988). Zauważmy, że z uwagi na postać macierzy $\mathbf{V}_1$ i $\mathbf{V}_2$ oraz własności śladu macierzy nieujemnie określonych, elementy macierzy $\mathbf{S}$ oraz wektora $\mathbf{q}$ są nieujemne. Odnośnie macierzy $\mathbf{S}$ zakładamy za Pattersonem i Thompsonem (1971), że jest ona dodatnio określona. Założenie to wyklucza przypadek gdy $\boldsymbol{\Delta}'=\mathbf{I}_n$, kiedy to $\mathbf{P}$ jest macierzą zerową i w konsekwencji również $\mathbf{S}=\mathbf{0}$ oraz przypadek gdy $\mathcal{R}(\mathbf{D}')\subset\mathcal{R}(\boldsymbol{\Delta}')$, kiedy to $\mathbf{P}\mathbf{D}'=\mathbf{0}$ i w konsekwencji $s_{11}=s_{12}=0$. Ponadto można pokazać, że q_2 jest dodatnie wtedy i tylko wtedy, gdy $\mathbf{y}\notin\mathcal{R}(\boldsymbol{\Delta}')$ oraz że q_1 jest dodatnie, gdy $\mathbf{y}\notin\mathcal{R}(\boldsymbol{\Delta}')$ i $\mathcal{R}(\mathbf{D}')\not\subset\mathcal{R}(\boldsymbol{\Delta}')$.

Metoda REML jest metodą iteracyjną. W k-tym kroku iteracyjnym rozwiązuje się ze względu na $\boldsymbol{\sigma}$ układ równań liniowych

$$\dot{\mathbf{S}}_{(k-1)}\boldsymbol{\sigma}=\dot{\mathbf{q}}_{(k-1)}\ , \tag{3.3}$$

otrzymany z ogólnej postaci (3.1) poprzez zastąpienie w (3.2) nieznanych komponentów σ_b^2 i σ_e^2 rozwiązaniami $\dot{\sigma}_b^2$, $\dot{\sigma}_e^2$ uzyskanymi w kroku (k–1)-szym, przy czym w pierwszym kroku iteracyjnym przyjęte być muszą dla σ_b^2 i σ_e^2 pewne wartości początkowe. Rozwiązanie układu (3.3) w ostatnim, z uwagi na przyjętą dokładność, kroku iteracyjnym nazywamy wartością estymatora REML wektora komponentów wariancji o ile rozwiązanie to jest nieujemne (patrz Searle, 1988, str. 955).

W wyniku maksymalizacji drugiego czynnika funkcji gęstości, tzn. funkcji $g_2(\mathbf{M}_2\mathbf{y}\mid\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{\tau})$, uzyskujemy do rozwiązania układ równań

$$(\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^{-1}\boldsymbol{\Delta}')\boldsymbol{\tau}=\boldsymbol{\Delta}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y}\ ,$$

identyczny z układem równań normalnych w modelu (1.1). Zastępując w powyższym układzie nieznane komponenty wariancji (występujące w macierzy $\mathbf{V}$) ich ocenami uzyskanymi w pierwszym etapie metody REML, dostajemy ocenę estymatora REML wektora parametrów stałych $\boldsymbol{\tau}$

$$\hat{\boldsymbol{\tau}}=(\boldsymbol{\Delta}\dot{\mathbf{V}}^{-1}\boldsymbol{\Delta}')^{-1}\boldsymbol{\Delta}\dot{\mathbf{V}}^{-1}\mathbf{y}\ ,$$

identyczną z postacią (2.2) estymatora z uogólnionej metody najmniejszych kwadratów.

Wracając do problemu estymacji komponentów wariancji należy zwrócić uwagę na fakt, że zaprezentowana tu metoda nie zapewnia uzyskania dla nich ocen spełniających założenia przyjęte w modelu. Przedstawione w (1.4) założenia są ograniczeniami liniowymi postaci

$$\sigma_e^2>0 \text{ oraz } \mathbf{a}'\boldsymbol{\sigma}\geq 0, \text{ gdzie } \mathbf{a}'=(1,-d). \tag{3.4}$$

W rezultacie problem estymacji komponentów wariancji może być rozwiązany poprzez zastosowanie modyfikacji metody REML, polegającej w istocie (patrz Kłaczyński i inni, 1991) na zastąpieniu rozwiązywania układu (3.3) odpowiednio sformułowanym zagadnieniem programowania kwadratowego, w którym rozwiązania poszukuje się na obszarze wyznaczonym przez ograniczenia (3.4).

Aplikacja tej metody do modelu (1.1) prowadzi do rozwiązywania w k-tym kroku iteracyjnym zagadnienia minimalizacji kwadratowej funkcji wypukłej przy ograniczeniach (3.4), tj.

$$\{\text{ minimalizacja } f(\boldsymbol{\sigma}) \;:\; \sigma_e^2 > 0,\ \mathbf{a}'\boldsymbol{\sigma} \geq 0\ \}\ , \tag{3.5}$$

gdzie

$$f(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma} - \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)})'\,\dot{\mathbf{S}}_{(k-1)}(\boldsymbol{\sigma} - \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{k})\ , \tag{3.6}$$

zaś

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} = \dot{\mathbf{S}}^{-1}_{(k-1)}\dot{\mathbf{q}}_{(k-1)}\ . \tag{3.7}$$

W analogii do rozwiązania układu (3.3) rozwiązanie zagadnienia (3.5) w ostatnim kroku iteracyjnym nazwiemy oceną estymatora REML z restrykcjami dla wektora komponentów wariancji.

Twierdzenie. Rozwiązaniem optymalnym zagadnienia (3.5) w k-tym kroku iteracyjnym jest wektor $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} = (\hat{\sigma}_{b(k)},\ \hat{\sigma}_{e(k)})'$ postaci

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} = \begin{cases} \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}\ , & \text{jeśli } \ \dot{\sigma}^2_{b(k)} \geq d\dot{\sigma}_{e(k)} \ \text{ oraz } \ \dot{\sigma}^2_{e(k)} > 0 \\ \begin{pmatrix} d\bar{\sigma}^2_{e(k)} \\ \bar{\sigma}^2_{e(k)} \end{pmatrix}, & \text{jeśli } \ \dot{\sigma}^2_{b(k)} < d\dot{\sigma}^2_{e(k)} \ \text{ oraz } \ \bar{\sigma}^2_{e(k)} > 0 \end{cases}\ , \tag{3.8}$$

gdzie

$$\bar{\sigma}^2_{e(k)} = \frac{d\dot{q}_{1(k-1)} + \dot{q}_{2(k-1)}}{\mathbf{a}'\dot{\mathbf{S}}^{-1}_{(k-1)}\mathbf{a}}\ , \tag{3.9}$$

natomiast $\dot{q}_{1(k-1)}$ oraz $\dot{q}_{2(k-1)}$ są elementami macierzy z układu (3.3).

Dla dowodu powyższego twierdzenia udowodnimy najpierw następujący

Lemat. Niech $\mathbf{A}$ będzie $(m\times 2)$-wymiarową macierzą o wierszach $\mathbf{a}'_1, \mathbf{a}'_2, ..., \mathbf{a}'_m$, $\mathbf{b}$ m-wymiarowym wektorem o składowych $b_1, b_2, ..., b_m$ natomiast $f(\boldsymbol{\sigma})$ niech oznacza funkcję określoną w (3.6). Przy założeniu, że $\overline{\mathbf{A}}_i$ jest $((m-1)\times 2)$-wymiarową podmacierzą macierzy $\mathbf{A}$ (po usunięciu z niej wiersza $\mathbf{a}'_i$) niech $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}$ będzie rozwiazaniem optymalnym zagadnienia

$$\{\text{minimalizacja } f(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{a}_i' \boldsymbol{\sigma} = b_i\} \tag{3.10}$$

takim, że

$$\overline{\mathbf{A}}_i \, \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} > b_i \ . \tag{3.11}$$

Niech ponadto wektor (3.7) spełnia warunek

$$\mathbf{a}_i' \, \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} < b_i \ . \tag{3.12}$$

Przy tych założeniach wektor $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}$ jest rozwiązaniem optymalnym zagadnienia

$$\{\text{ minimalizacja } f(\boldsymbol{\sigma}\ ) \ : \ \mathbf{A}\boldsymbol{\sigma} \geq \mathbf{b}\ \} \ . \tag{3.13}$$

Dowód. Adaptując twierdzenie 2 z pracy Kłaczyńskiego (1991) można pokazać, że wektor $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}$ spełniający założenie (3.11) jest rozwiązaniem optymalnym zagadnienia (3.13) wtedy i tylko wtedy, gdy spełniony jest warunek $(\mathbf{a}_i'\dot{\mathbf{S}}_{(k-1)}^{-1}\mathbf{a}_i)^{-1}(b_i - \mathbf{a}_i'\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}) \geq 0$, równoważny warunkowi $\mathbf{a}_i' \, \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} \leq b_i$. Wobec (3.12) warunek ten jest spełniony, co w konsekwencji kończy dowód lematu. ❑

Dowód twierdzenia. Adaptując lemat 2 zamieszczony w pracy Kłaczyńskiego (1991) do zagadnienia (3.5) można stwierdzić, że rozwiązaniem tego zagadnienia może być wektor $\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}$, jeżeli

$$\dot{\sigma}^2_{b(k)} \geq d \, \dot{\sigma}^2_{e(k)} \quad \text{oraz} \quad \dot{\sigma}^2_{e(k)} > 0 \tag{3.14}$$

lub rozwiązania tego problemu należy szukać w obszarze R^2_+, na brzegu stożka (o wierzchołku w początku układu współrzędnych) wyznaczonego równaniami prostych $\sigma_b^2 - d\sigma_e^2 = 0$ oraz $\sigma_e^2 = 0$. Z uwagi jednak na założenia modelu określone w (3.4) nie uwzględniamy rozwiązań leżących na brzegu opisanym równaniem $\sigma_e^2 = 0$, jak również rozwiązania leżącego w wierzchołku stożka . W rezultacie, w sytuacji gdy $\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}$ nie spełnia warunków (3.14) rozwiązaniem optymalnym zagadnienia (3.5) może być rozwiązanie optymalne zagadnienia

$$\{\text{ minimalizacja } f(\boldsymbol{\sigma}) \ : \ \mathbf{a}'\boldsymbol{\sigma} = 0\ \}, \text{ gdzie } \mathbf{a}' = (1, -d) \quad . \tag{3.15}$$

Po podstawieniu $\mathbf{a}_i := \mathbf{a}$, $\overline{\mathbf{A}}_i := (0,1)$ oraz $b_1 = b_2 := 0$ do podanego wcześniej lematu wynika, że rozwiązanie $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}$ zagadnienia (3.15) będzie rozwiązaniem optymalnym zagadnienia (3.5), jeżeli spełnione będą warunki

$$(0,1)\, \hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} > 0 \text{ oraz } \dot{\sigma}^2_{b(k)} < d \, \dot{\sigma}^2_{e(k)} \ . \tag{3.16}$$

Jak wiadomo rozwiązanie zagadnienia (3.15) (porównaj Kłaczyński, 1991, str. 271 oraz Kłaczyński i inni, 1991, str. 265) wyraża się wzorem

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} = \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} - \dot{\mathbf{S}}^{-1}_{(k-1)}\mathbf{a}(\mathbf{a}'\dot{\mathbf{S}}^{-1}_{(k-1)}\mathbf{a})^{-1}\mathbf{a}'\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} \quad ,$$

skąd po uwzględnieniu $c = \det(\dot{\mathbf{S}}_{(k-1)})$ oraz

$$\dot{\mathbf{S}}^{-1}_{(k-1)} = \frac{1}{c}\begin{pmatrix} s_{22(k-1)} & -s_{12(k-1)} \\ -s_{12(k-1)} & s_{11(k-1)} \end{pmatrix}$$

można uzyskać

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} = \begin{pmatrix} d\overline{\sigma}^2_{e(k)} \\ \overline{\sigma}^2_{e(k)} \end{pmatrix},$$

gdzie $\overline{\sigma}^2_{e(k)}$ jest określone w (3.9). Ostatnia postać rozwiązania zagadnienia (3.15) w połączeniu z warunkami (3.16) kompletuje dowód twierdzenia. ❑

Warto zaznaczyć, że wektor $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}$ określony w (3.8) i (3.9), wobec postaci elementów wektora $\mathbf{q}$ i macierzy $\mathbf{S}$ (patrz (3.2)), jest niezmienniczą i parzystą funkcją wektora $\mathbf{y}$. Ponadto wektor $\mathbf{y}$, podlegając rozkładowi normalnemu, spełnia założenie o symetryczności rozkładu względem swej wartości oczekiwanej. A zatem (patrz Kackar i Harville, 1981) użycie wektora $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}$ w formule $\hat{\tau}$ zapewnia jej nieobciążoność.

Szczególnie interesująca jest sytuacja, gdy nasze wymagania odnośnie komponentów wariancji ograniczają się jedynie do naturalnych wymagań, tj. do ich nieujemności. Wówczas przyjmując w twierdzeniu $d = 0$ uzyskujemy

Wniosek 1. Rozwiązaniem zagadnienia

$$\{ \text{minimalizacja } f(\boldsymbol{\sigma}) \ : \ \sigma^2_b \geq 0, \ \ \sigma^2_e > 0 \ \} \ , \tag{3.17}$$

w k-tym kroku iteracyjnym jest wektor

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)} = \begin{cases} \dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(k)}\,, & \text{jeśli} \quad \dot{\sigma}^2_{b(k)} \geq 0 \quad \text{oraz} \quad \dot{\sigma}_{e(k)} > 0 \\ \begin{pmatrix} 0 \\ \overline{\sigma}^2_{e(k)} \end{pmatrix}, & \text{jeśli} \quad \dot{\sigma}^2_{b(k)} < 0 \quad \text{oraz} \quad \overline{\sigma}^2_{e(k)} > 0 \end{cases} \tag{3.18}$$

gdzie

$$\overline{\sigma}^2_{e(k)} = \frac{\dot{q}_{2(k-1)}}{\dot{s}_{22(k-1)}}\ , \tag{3.19}$$

natomiast $\dot{q}_{2(k-1)}$ oraz $\dot{s}_{22(k-1)}$ są odpowiednio elementami wektora $\dot{\mathbf{q}}_{(k-1)}$ oraz macierzy $\dot{\mathbf{S}}_{(k-1)}$.

Kolejny wniosek dotyczy sytuacji, w której za ocenę komponentu wariancji dla bloków przyjmuje się zero.

Wniosek 2. Jeżeli w układzie (3.3) w macierzy $\dot{\mathbf{S}}_{(k-1)}$ oraz w wektorze $\dot{\mathbf{q}}_{(k-1)}$ przyjęto $\sigma_b^2 = 0$ wówczas wielkość określona w (3.19) przyjmuje postać

$$\overline{\sigma}^2_{e(k)} = \mathbf{y}'(\mathbf{I}_n - \Delta'(\Delta\Delta')^{-1}\Delta)\mathbf{y} / (n-v) \;, \tag{3.20}$$

a więc jest średnim kwadratem dla błędu (MSE) w modelu stałym klasyfikacji pojedynczej $\{\mathbf{y}\ ,\ \Delta'\boldsymbol{\tau}\ ,\ \sigma_e^2\mathbf{I}_n\}$.

Dowód. Macierze: $\mathbf{V}$ oraz $\mathbf{P}$, określone odpowiednio w (1.2) i (3.2), po podstawieniu $\sigma_b^2 = 0$ oraz $\sigma_e^2 = g$, upraszczają się do postaci $\mathbf{V} = g\mathbf{I}_n$ oraz $\mathbf{P} = (\mathbf{I}_n - \Delta'(\Delta\Delta')^{-1}\Delta)\ /g$. Stąd wobec (3.2) oraz idempotentności macierzy $\mathbf{I}_n - \Delta'(\Delta\Delta')^{-1}\Delta$ elementy: $\dot{s}_{22(k-1)}$ macierzy $\dot{\mathbf{S}}_{(k-1)}$ oraz $\dot{q}_{2(k-1)}$ wektora $\dot{\mathbf{q}}_{(k-1)}$ w układzie (3.3) sprowadzają się odpowiednio do postaci

$$\dot{s}_{22(k-1)} = (1/g^2)\mathrm{tr}(\mathbf{I}_n - \Delta'(\Delta\Delta')^{-1}\Delta = (n-v)\ /g^2$$

oraz

$$\dot{q}_{2(k-1)} = \mathbf{y}'(\mathbf{I}_n - \Delta'(\Delta\Delta')^{-1}\Delta)\mathbf{y}\ \ /g^2 \;.$$

W rezultacie iloraz w (3.19) przyjmuje postać (3.20), co kończy dowód wniosku.

□

Jak łatwo zauważyć formuła w (3.20) określa jednocześnie kwadratowy, nieobciążony o minimalnej wariancji estymator parametru σ_e^2 w modelu $\{\mathbf{y}\ ,\ \Delta'\boldsymbol{\tau}\ ,\ \sigma_e^2\mathbf{I}_n\}$.

Warunek $\mathbf{y} \notin \mathcal{R}(\Delta')$, przy którym element q_2 wektora $\mathbf{q}$ określonego w (3.2) jest dodatni, przenosi się na element $\dot{q}_{2(k-1)}$ wektora $\dot{\mathbf{q}}_{(k-1)}$. Konsekwencją tego jest następująca

Uwaga 1. Jeżeli $\mathbf{y} \notin \mathcal{R}(\Delta')$ wówczas wyrażenia określone w (3.9) oraz w (3.19) są dodatnie. Zatem w formułach (3.8) oraz (3.18) warunek $\overline{\sigma}^2_{e(k)} > 0$ może być pominięty.

Kolejna uwaga dotyczy rozwiązania zagadnienia (3.17), gdy spełnione są warunki $\dot{\sigma}^2_{b(k)} < 0$ oraz $\overline{\sigma}^2_{e(k)} > 0$. Dla tego przypadku rozwiązania daje się pokazać, że funkcja

$$-\ln g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2}\ln 2\pi + \frac{1}{2}\ln|\mathbf{M}_1\mathbf{V}\mathbf{M}_1| + \frac{1}{2}\mathbf{y}'\mathbf{P}\mathbf{y}$$

przyjmuje wartość minimalną (jak wiadomo funkcja $g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma})$ przyjmuje wtedy wartość maksymalną). Mianowicie, przy $\sigma_b^2 = 0$ funkcja ta redukuje się do postaci

$$-\ln g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{2}\ln 2\pi + \frac{1}{2}(n-v)\ln \sigma_e^2 + \frac{1}{2}\mathbf{y}'(\mathbf{I}_n - \Delta'(\Delta\Delta')^{-1}\Delta)\mathbf{y} \ ,$$

której pochodna przyjmuje wartość zero wtedy i tylko wtedy, gdy $\sigma_e^2 = \mathrm{MSE}$, gdzie MSE jest określone we wniosku 2. Można sformułować następującą uwagę.

Uwaga 2. Zakładając, że $\sigma_b^2 = 0$ funkcja $g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma})$ osiąga maksimum dla $\sigma_e^2 = \mathrm{MSE}$.

Z uwagi tej wynika np., że rozwiązanie postaci $(0, \dot{\sigma}^2_{e(k)})'$ stosowane w praktyce, gdy składowa $\dot{\sigma}^2_{b(k)}$ jest ujemna , jest gorsze, w sensie wartości funkcji $g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma})$, od zaproponowanego w tej pracy (patrz także Kłaczyński i inni, 1991, twierdzenie 2).

Na zakończenie warto zwrócić uwagę na to, że rozwiązanie zagadnienia (3.5) pokrywa się z rozwiązaniem zagadnienia

$$\{ \text{ minimalizacja } g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma}) \ : \ \sigma_b^2 \geq 0, \ \mathbf{a}'\boldsymbol{\sigma} \geq 0 \ \} \ .$$

Zauważmy bowiem (patrz Hocking, 1985, str.246-249), że układ (3.1) jest przyrównanym do zera gradientem funkcji $g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma})$. Można ponadto pokazać, opierając się na metodzie mnożników Lagrange (patrz np. Hocking, 1985, str. 365 i 241), że w zagadnieniu maksymalizacji $g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma})$ przy ograniczeniach $\mathbf{a}'\boldsymbol{\sigma} = 0$ przyrównany do zera gradient funkcji Lagrange ($L(\boldsymbol{\sigma}, \lambda) = g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma}) + \lambda\mathbf{a}'\boldsymbol{\sigma}$, gdzie λ jest mnożnikiem Lagrange), przyjmuje taką postać, z której po wstawieniu w macierzy $\mathbf{S}$ oraz wektorze $\mathbf{q}$ w miejsce σ_i^2 składowych wektora $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_{(k-1)}$ otrzymujemy rozwiązanie równoważne rozwązaniu zagadnienia (3.10). Stosowanie funkcji $f(\boldsymbol{\sigma})$ zamiast $g_1(\mathbf{M}_1\mathbf{y} \mid \boldsymbol{\sigma})$ zostało podyktowane jej prostszą postacią oraz własnościami umożliwiającymi zastosowanie metod programowania kwadratowego wypukłego.

Wreszcie warto podkreślić, że jak zauważyli po raz pierwszy Hocking i Kutner (1975) (patrz także Searle, 1988), estymator uzyskany po pierwszej iteracji metody REML jest estymatorem typu MINQUE (patrz np. Rao 1970, 1971 a, b, 1972). Z uwagi na wprowadzoną w pracy modyfikację metody REML prowadzącą do uzyskania ocen komponentów spełniających określone restrykcje, możemy stwierdzić, że w sytuacji gdy proces iteracyjny zostanie ograniczony do pierwszego kroku, otrzymany estymator będzie typu MINQUE, dodatkowo spełniający określone restrykcje.

4. Omówienie przykładu

Dla ilustracji rozważań przedstawionych w poprzednich paragrafach wykorzystano przykład liczbowy dotyczący doświadczenia założonego w układzie blokowym. W doświadczeniu tym $v = 25$ obiektów rozlosowano w $b = 9$ blokach, przy czym przyjęto założenie, że bloki zostały wylosowane z nieskończonej ich populacji oraz że n-wymiarowy wektor obserwacji ($n = 43$) pochodzi z populacji o rozkładzie normalnym.

Wartości składowych wektora obserwacji zamieszczono w Tabeli 1, która została przedstawiona jako tablica o 25 wierszach i 9 kolumnach, po to aby jednocześnie dało się odczytać, że element występujący na przecięciu i-tego wiersza i j-tej kolumny jest wartością dotyczącą i-tego obiektu w j-tym bloku. Dodatkowo tablica ta odzwierciedla jasno plan doświadczenia, zważywszy na jej podobieństwo do macierzy incydencji, która zawiera jedynki w miejscu występujących tutaj zaobserwowanych wartości.

Rozważany w tej pracy przykład dotyczy planu doświadczenia, który często wykorzystywany jest do opisu eksperymentów rolniczych na terenie Włoch. Dane zamieszczone są w Tabeli 1. Ze wstępnej ich analizy wynika, że zmienność między

Tabela 1.
43 obserwacje, 25 obiektów, 9 bloków

Obiekty	Bloki								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	6			20			12		
2		7		14					26
3			8	9				11	
4	9				9			23	
5		14			11		19		
6			9		21				10
7	11					9			11
8		9				10		10	
9			20			17	25		
10				11					
11				17					
12					21				
13					16				
14						20			
15						24			
16	13								
17	17								
18		11							
19		18							
20			13						
21							12		
22								25	
23									19
24								29	
25									28

blokami jest bardzo mała przy dość dużej zmienności między jednostkami eksperymentalnymi. Ten fakt wskazuje na to, że należy spodziewać się bardzo małej wariancji dla bloków. Z tej to przyczyny możemy zastosować opisaną wyżej metodę co najwyżej z ograniczeniami naturalnymi dla komponentów wariancji tj. dotyczącymi ich nieujemności.

Jak podkreślono w paragrafach poprzednich, podstawowym celem jest uzyskanie oceny wektora parametrów obiektowych $\boldsymbol{\tau}$. Z uwagi na fakt, że relacja (2.1) nie jest tutaj spełniona, interesująca nas ocena będzie wyznaczana zgodnie z metodą estymacji REML. Dla realizacji pierwszego etapu tej metody tzn. znalezienia ocen komponentów wariancji σ_b^2 oraz σ_e^2, przyjęto jako punkt startowy $\sigma_{b(0)}^2 = 1.0$ oraz $\sigma_{e(0)}^2 = 1.0$. Przy tych wartościach przystąpiono do realizacji pierwszego kroku iteracyjnego, w którym znaleziono elementy macierzy $\dot{\mathbf{S}}_{(0)}$, wektora $\dot{\mathbf{q}}_{(0)}$ oraz wektor $\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(1)}$ zgodnie ze wzorem $\dot{\boldsymbol{\sigma}}_{(1)} = \dot{\mathbf{S}}_{(0)}^{-1}\,\dot{\mathbf{q}}_{(0)}$. Składowe tego wektora okazały się następujące $\dot{\sigma}_{b(1)}^2$=−6.8448, $\dot{\sigma}_{e(1)}^2$=37.5109. Z uwagi na ujemną wartość pierwszej składowej, zastosowano modyfikację metody opisaną w (3.5) i zgodnie z (3.7) wyliczono nieujemne oceny komponentów wariancji w tym kroku. Otrzymano $\hat{\sigma}_{b(1)}^2$=0.0, $\hat{\sigma}_{e(1)}^2$=36.4274 i przyjęto te wartości jako punkt startowy dla iteracji drugiej.

Po powtórzeniu postępowania, opisanego szczegółowo dla iteracji pierwszej, w iteracji drugiej otrzymano $\dot{\sigma}_{b(2)}^2$=−0.8426, $\dot{\sigma}_{e(2)}^2$=32.8426, a po zastosowaniu modyfikacji metody dla uzyskania ocen nieujemnych otrzymano $\hat{\sigma}_{b(2)}^2$=0.0, $\hat{\sigma}_{e(2)}^2$=32.00. Trzeci krok iteracyjny, w którym uzyskano $\dot{\sigma}_{b(3)}^2$=−0.8426, $\dot{\sigma}_{e(3)}^2$=32.8426 oraz $\hat{\sigma}_{b(3)}^2$=0.0, $\hat{\sigma}_{e(3)}^2$=32.0 zakończył obliczenia, z uwagi na założoną dokładność.

Uzyskane w ostatnim kroku nieujemne oceny komponentów wariancji przyjęto jako prawdziwe wartości komponentów wariancji σ_b^2 oraz σ_e^2 dla wyznaczenia macierzy $\mathbf{V}$ zgodnie ze wzorem (1.2) i następnie dla wyznaczenia oceny wektora parametrów obiektowych. W wyniku zastosowania wzoru (2.2) uzyskano τ = (12.6667, 15.6667, 9.3333, 13.6667, 14.6667, 13.3333, 10.3333, 9.6667, 20.6667, 11.0, 17.0, 21.0, 16.0, 20.0, 24.0, 13.0, 17.0, 11.0, 18.0, 13.0, 12.0, 25.0, 19.0, 29.0, 28.0)'.

Dla sprawdzenia efektywności zaproponowanej przez autorów metody wyliczono dodatkowo oceny komponentów wariancji metodą REML z zastosowaniem modyfikacji (3.5) dopiero po zakończeniu procesu iteracyjnego. Uzyskano po 56 iteracjach $\dot{\sigma}_b^2$=−0.4637, $\dot{\sigma}_e^2$=32.4599 a po zastosowaniu modyfikacji (3.5) $\hat{\sigma}_b^2$=0.0, $\hat{\sigma}_e^2$=31.99. Obliczono także MSE (patrz wniosek 2) w modelu klasyfikacji pojedynczej $\{\mathbf{y}\,,\ \boldsymbol{\Delta}'\boldsymbol{\tau}\,,\ \sigma_e^2\mathbf{I}_n\}$. Obliczona wartość wyniosła 32. Obliczenia wykonano przy pomocy skonstruowanego przez autorów programu w języku PASCAL 5.0 na mikrokomputerze typu IBM PC/AT. W programie tym wykorzystano numeryczną procedurę W-transformacji Hemmerle i Hartleya (1973) oraz procedurę "sweep operator" Goodnighta (1978) (patrz także Giesbrecht, 1986), służące do obliczania elementów macierzy $\dot{\mathbf{S}}$ oraz wektora $\dot{\mathbf{q}}$ układu (3.3). W trakcie obliczeń stwierdzono, że z uwagi na zbieżność metody REML, dobór punktu startowego ma wpływ jedynie na liczbę iteracji koniecznych do uzyskania końcowego wyniku. Ponadto przekonano się, że wprowadzenie modyfikacji (3.5) na każdym kroku iteracyjnym jest korzystniejsze z numerycznego punktu widzenia w stosunku do metody polegającej na wprowadzeniu tej modyfikacji dopiero po wykonaniu ostatniego kroku iteracyjnego metody REML. Jednak z teoretycznego punktu widzenia autorom nie jest wiadome, czy oba postępowania są równoważne.

LITERATURA

Aitken A.C. (1935). On least squares and linear combination of observations. *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh* **55** (1935), 42 48.

Baksalary J.K., Kala R. (1978). Estymowalność liniowych funkcji parametrycznych w jednowymiarowym modelu liniowym. *Matematyka Stosowana* **12**, 133-144.

Caliński T., Kageyama S. (1988). A randomization theory of intrablock and interblock estimation. Technical Report No.230, Statistical Research Group, Hiroshima University, Hiroshima, Japan.

Corbeil R.R., Searle S.R. (1976). Restricted Maximum Likelihood estimation of variance components in the mixed model. *Technometrics* **18**, 31-38.

Giesbrecht F.G. (1986). Analysis of data from incomplete block designs. *Biometrics* **42**, 437-448.

Goodnight J.H. (1978). The sweep operator: Its importance in statistical computing. In *Procedings, Computer Science and Statistics: Eleventh Annual Symposium on the Inference,* Raleigh, North Carolina: Institute of Statistics, North Carolina State University, 218-229.

Hemmerle W.J., Hartley H.O. (1973). Computing maximum likelihood estimates for the mixed A.O.V. model using the W transformation. *Technometrics* **15**, 819-831.

Herbach L.H. (1959). Properties of model II type analysis of variance tests. A: optimum nature of F-test for Model II in the balanced case. *Annals of Mathematical Statistics* **30**, 939-959.

Hocking R.R. (1985). *The analysis of linear models*. California, Brooks/Cole Publishing Company.

Hocking R.R., Kutner M.H. (1975). Some analitical and numerical comparisons of estimators for the mixed A.O.V. model. *Biometrics* **31**, 19 28.

Kackar R.N. and Harville D.A. (1981). Unbiasedness of two stage estimation and prediction procedures for mixed linear models. *Commun. Statist. - Theory Meth.* **10**, 1249-1261.

Kala R. (1990). Elementy teorii randomizacji II. Modelowanie doświadczeń prostych. *Listy Biometryczne - Biometrical Letters* **27**, 31-45.

Kłaczyński K. (1991). O estymacji najmniejszych kwadratów w modelu liniowym z restrykcjami liniowymi nierównościowymi. *XXI Colloquium Metodologiczne z Agrobiometrii*, PAN, 269-280.

Kłaczyński K., Molińska A., Moliński K. (1991). O nieujemnej estymacji komponentów wariancji w metodach REML i MINQUE. *XXI Colloquium Metodologiczne z Agrobiometrii*, PAN, 260-268.

Patterson H.D., Thompson R. (1971). Reccovery of inter-block information when block sizes are unequal. *Biometrika* **58**, 545-554.

Rao C.R. (1970). Estimation of heteroscedastic variances in linear models. *J. Amer. Statist. Assoc.* **65**, 161-172.

Rao C.R. (1971a). Estimation of variance and covariance components. *Journal of Multivariate Analysis* **1**, 257-275.

Rao C.R. (1971b). Minimum variance quadratic unbiased estimation of variance components. *Journal of Multivariate Analysis* **1**, 445-456.

Rao C.R. (1972). Estimation of variance and covariance components in linear models. *J. Amer. Statist. Assoc.* **67**, 112-115.

Searle S.R. (1988). Mixed models and unbalanced data: wherefrom, whereat and whereto? *Commun. Statist. - Theory Meth.* **17**, 935-968.

Waterman M.S. (1974). A restricted least squares problem. *Technometrics* **16**, 135-136.

Zyskind C., Martin F.B. (1969). On best linear estimation and a general Gauss-Markoff theorem in linear models with arbitrary nonnegative covariance structure. *SIAM J. Appl. Math.* **17**, 1190-1202.

Praca wpłynęła 24 kwietnia 1992;
w wersji ostatecznej 2 grudnia 1992

On modified REML method and its application to estimation of parameters in block design with random block effects

SUMMARY

In the paper we show how to estimate variance components and treatment parameters in the mixed linear model in which block effects are random. In this model we assume that the variance component related to the experimental error is positive and that the ratio of variance components is not less than a given scalar. To obtain the estimators the REML and quadratic programming methods are used.

Key words: mixed model with reference to block design, variance components, REML, (generalized) least squares method, quadratic programming problem.