

MSE-SCHÄTZUNGEN FÜR DIE BESTE LINEARE ERWARTUNGSTREUE VORHERSAGE (BLUP) BEI GESCHÄTZTEN VARIANZKOMPONENTEN

Armin TUCHSCHERER^{1)*}, Paul Eberhard RUDOLPH¹⁾, Margret TUCHSCHERER¹⁾,
Bernd JÄGER²⁾

¹⁾ Forschungsinstitut für die Biologie landwirtschaftlicher Nutztiere Dummerstorf-Rostock,
Wilhelm-Stahl-Allee 2, D-18196 Dummerstorf

* *E-mail: atuchsch@fhn.uni-rostock.de*

²⁾ Ernst-Moritz-Arndt - Universität Greifswald, Institut für Biometrie u. Medizinische
Informatik, Sauerbruchstraße, D-17489 Greifswald

Abstract

In gemischten linearen Modellen werden bei bekannten Varianzkomponenten die zufälligen Effekte durch die BLUP (Best Linear Unbiased Prediction) vorhergesagt. Bei der praktischen Anwendung kann man in der Regel jedoch nicht davon ausgehen, daß die Varianzkomponenten bekannt sind. Man hilft sich damit, daß man anstelle der bekannten Varianzkomponenten Schätzwerte einsetzt. Die resultierende Vorhersage wird EBLUP (Estimated Best Linear Unbiased Prediction) genannt. SAS bietet mit der Prozedur `proc mixed` ein Werkzeug, mit dem die zufälligen Effekte mit BLUP bzw. EBLUP vorhergesagt werden können. Während man mit `proc mixed` für BLUP den korrekten MSE (Mean Squared Error) erhält wird für EBLUP nur eine 'naive' MSE-Berechnung angeboten, d.h., es werden die MSE-Formeln für BLUP mit bekannten Varianzkomponenten genutzt, die durch Schätzwerte ersetzt werden. Dadurch kann die Genauigkeit aber z. T. erheblich überschätzt werden.

Über Simulationen werden für vorgebbare Modellparameter und Versuchspläne Schätzungen für den wahren MSE bestimmt und die 'naive' MSE-Berechnung bewertet sowie der Einfluß der Modellparameter und des Versuchsplanes auf den MSE der BLUP bzw. EBLUP untersucht. Für die geplanten Simulationsuntersuchungen wurden SAS-Makros entwickelt.

Vorbemerkungen, Problemstellung

Es wird das gemischte lineare Modell $\underline{y} = X\underline{\beta} + Z\underline{u} + \underline{e}$ betrachtet, wobei \underline{y} ein N-dimensionaler Vektor der Beobachtungen, $\underline{\beta}$ ein b-dimensionaler Vektor der festen Effekte, \underline{u} ein a-dimensionaler Vektor der zufälligen vorherzusagenden Effekte, \underline{e} ein N-dimensionaler Vektor der zufälligen Resteffekte sowie X und Z bekannte Designmatrizen mit den Elementen 0 und 1 seien, mit den Voraussetzungen $E(\underline{u}) = 0$, $E(\underline{e}) = 0$, $\text{Var}(\underline{u}) = G$, $\text{Var}(\underline{e}) = R$, $\text{Cov}(\underline{u}, \underline{e}) = 0$ (d.h. $\text{Var}(\underline{y}) = V_y = ZGZ' + R$).

Unter den Voraussetzung, daß G und R bekannt sind, hat die beste lineare erwartungstreue Vorhersage (BLUP) für \underline{u} die Gestalt $\hat{\underline{u}} = GZV_y^{-1}(\underline{y} - X\hat{\underline{\beta}})$, wobei

$\hat{\underline{\beta}} = (\underline{X}'\underline{V}_y^{-1}\underline{X})^{-1} \underline{X}'\underline{V}_y^{-1}\underline{y}$ die BLUE (Best Linear Unbiased Estimation) für die fixen Effekte ist. Geläufiger und leichter berechenbar sind die identischen Lösungen des sogenannten Mixed-model-Gleichungssystem:

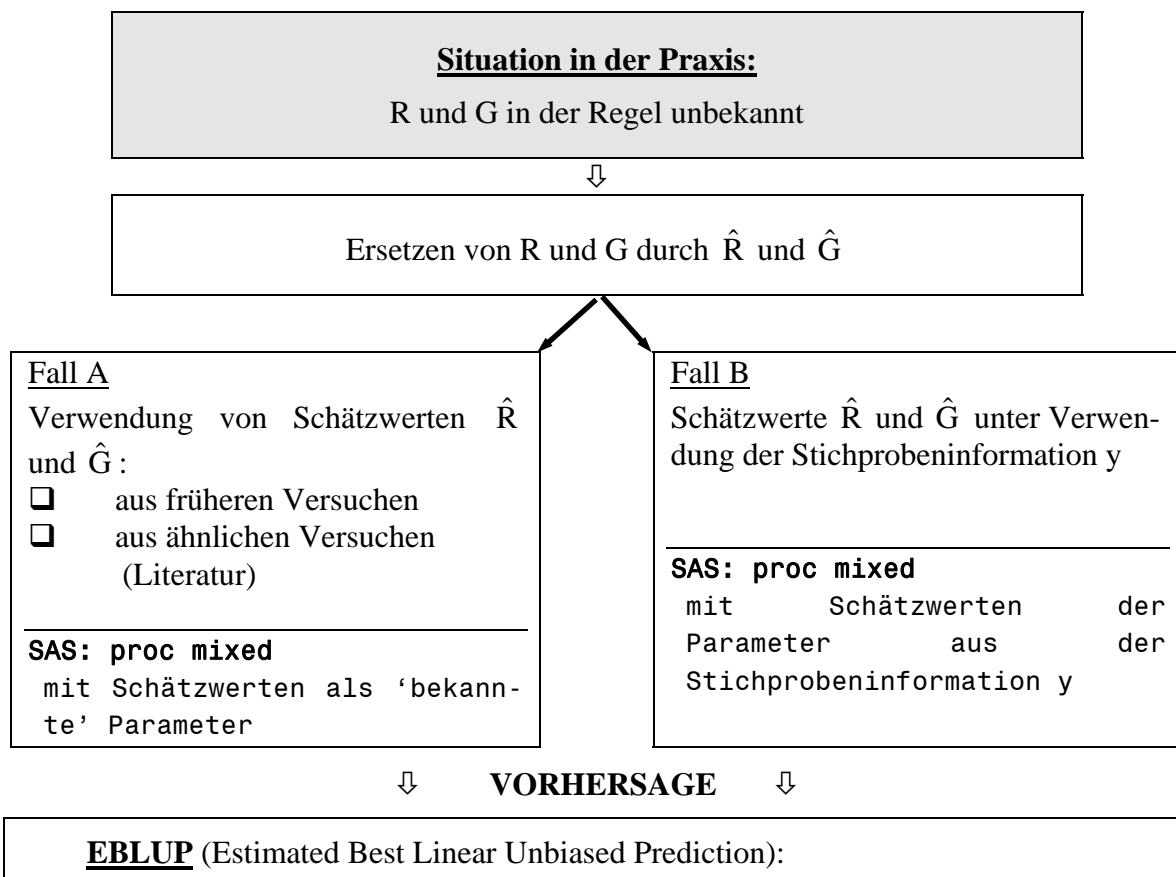
$$\begin{bmatrix} \underline{X}'\underline{R}^{-1}\underline{X}\underline{X}'\underline{R}^{-1}\underline{Z} \\ \underline{Z}'\underline{R}^{-1}\underline{X}\underline{Z}'\underline{R}^{-1}\underline{Z} + \underline{G}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\underline{\beta}} \\ \hat{\underline{u}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \underline{X}'\underline{R}^{-1}\underline{y} \\ \underline{Z}'\underline{R}^{-1}\underline{y} \end{bmatrix}$$

Vorhersagegenauigkeit für die BLUP kann durch ihren MSE

$$MSE(\hat{\underline{u}}) = E(\hat{\underline{u}} - \underline{u})'(\hat{\underline{u}} - \underline{u}) = Sp[V(\hat{\underline{u}} - \underline{u})] + E(\hat{\underline{u}} - \underline{u})'E(\hat{\underline{u}} - \underline{u}) = Sp[V(\hat{\underline{u}} - \underline{u})]$$

angegeben werden.

Die Situation in der Praxis sieht etwas anders aus und soll durch das folgende Schema veranschaulicht werden.



$$\tilde{\underline{u}} = \hat{G}Z\hat{V}_Y^{-1}(\underline{Y} - X\tilde{\underline{\beta}}), \text{ mit } \tilde{\underline{\beta}} = (X'\hat{V}_Y^{-1}X)^{-1}X'\hat{V}_Y^{-1}\underline{Y} \text{ und } \hat{V}_Y = Z\hat{G}Z' + \hat{R}$$

Die praktisch anwendbare Vorhersage wird also in der Regel nicht die BLUP sondern die EBLUP sein. Bleibt die Frage nach der Genauigkeit der EBLUP. Im Fall A ist es nicht möglich, die Genauigkeit (MSE) der EBLUP anzugeben, da man nicht weiß, ob die verwendeten Schätzwerte die Modellparameter hinreichend gut beschreiben. Bei dem in diesem Fall durch `proc mixed` ausgegebenen 'standard error of prediction' ist also Vorsicht geboten. Dieser Fall soll hier aber nicht weiter betrachtet werden.

Hier wird nur der Fall B betrachtet, d.h., es steht nur die Stichprobeninformation y zur Verfügung. Die unbekanntenen Varianzkomponenten werden demzufolge mit Hilfe der Stichprobeninformation geschätzt und anstelle der bekannten in die Vorhersage eingesetzt. Das resultierende Verfahren ist nur noch eine EBLUP. Eigenschaften wie „beste“ und „lineare“ gehen verloren, und die Berechnung der Vorhersagegenauigkeit (MSE) wird problematisch.

Kackar, R.N. und Harville, D.A. (1984) geben analytische Abschätzungen an, die aber wegen ihrer Kompliziertheit in SAS noch keine Anwendung gefunden haben. Wie üblich wird auch in der SAS-Prozedur `proc mixed` die Vorhersagegenauigkeit für diesen Fall durch eine Näherung angegeben, wobei man die geschätzten Varianzkomponenten anstelle der bekannten in die MSE-Formel der BLUP einsetzt.

Als sehr brauchbar hat sich die Schätzung der Vorhersagegenauigkeit von EBLUP mittels Simulation erwiesen (Tuchscherer u.a.; 1997, 1998). Durch wiederholte Erzeugung von Modelldaten mit entsprechend vorgegebenen Parametern und Versuchsplänen kann der MSE der EBLUP durch den *mittleren geschätzten MSE nach N_S Simulationsläufen* gemäß

$$\overline{\text{MSE}}(\tilde{\underline{u}}) = \sum_{i=1}^a \frac{1}{N_S} \sum_{j=1}^{N_S} (\tilde{u}_{ij} - u_{ij})^2$$

geschätzt werden, wobei die Anzahl der Simulationswiederholungen N_S so zu wählen ist, daß der MSE von einem symmetrischen Konfidenzintervall der erwarteten Breite $2d$ mit Wahrscheinlichkeit $1-\alpha$ überdeckt wird (Genauigkeit der Simulation).

Wählt man zum Beispiel die erwartete halbe Breite des Konfidenzintervalls relativ zur Standardabweichung von $\overline{\text{MSE}}$, z.B.: $d = 2\%$ der Standardabweichung von $\overline{\text{MSE}}$ und den Konfidenzkoeffizienten $1-\alpha = 0,95$, so sind mindestens $N_S = 9607$ Simulationswiederholungen notwendig, um diese Genauigkeit zu erreichen. Dies ist generell eine Möglichkeit der Versuchsplanung ($N_S=?$) bei Simulationsexperimenten (Tuchscherer u.a.; 1997).

Am Beispiel des einfachsten linearen gemischten Modells sollen folgende Schwerpunkte erläutert werden:

1. Bemerkungen zum Einfluß der Varianzkomponenten (bzw. ihres Verhältnisses) und des Versuchsplanes auf den MSE der BLUP

(SAS-Programm: MSE berechnet mit `proc mixed` bei Vorgabe der bekannten Varianzkomponenten),

2. Mittlerer geschätzter MSE durch Simulation (MSE_Sim)

- Möglichkeit zur relativ einfachen Abschätzung des tatsächlichen MSE (ohne komplizierte Berechnungen)
- (BLUP: MSE_berechnet \Leftrightarrow MSE_Sim)
- Genauigkeit über Anzahl der Simulationen regelbar

• EBLUP: Einfluß von Versuchsplan und Varianzkomponenten

(SAS-Programm: SAS-Simulations-Makro: Simulationsrahmenprogramm
 SAS-Vorhersage-Makro: Modellerzeugung mit proc iml, Vorhersage mit proc mixed bei bekannten und geschätzten Varianzkomponenten),

3. Beurteilung der naiven MSE-Approximation (MSE_naiv)

(SAS-Programm: SAS-Simulations-Makro: Simulationsrahmenprogramm
 SAS-Vorhersage-Makro: Modellerzeugung mit proc iml, Vorhersage mit proc mixed bei bekannten und geschätzten Varianzkomponenten).

Demonstration am Beispiel

Das einfachste lineare gemischte Modell hat die Gestalt $\underline{y} = \mathbf{1}_N \mu + \mathbf{Z}\underline{u} + \underline{e}$ wobei $\mathbf{1}$ ein N-dimensionaler Vektor von Einsen ist. Außerdem sei vorausgesetzt, daß $E(\underline{u}) = 0, E(\underline{e}) = 0$,

$\forall j, k, j=1, \dots, a; k=1, \dots, n_j; \sum_{j=1}^a n_j = N$ und $\text{var}(\underline{u}) = \sigma_u^2 \cdot \mathbf{I}_a, \text{var}(\underline{e}) = \sigma_e^2 \cdot \mathbf{I}_N$ sowie $\text{cov}(\underline{u}, \underline{e}) = \mathbf{0}_{a \times N}$. Sind die Varianzkomponenten σ_u^2 und σ_e^2 bzw. deren Verhältnis bekannt, so wird man \underline{u} durch die BLUP vorhersagen und im Falle aus der Stichprobeninformation y geschätzter Varianzkomponenten wird man \underline{u} durch EBLUP vorhersagen mit den entsprechenden Konsequenzen (siehe folgendes Schema).

BLUP	EBLUP
<p>Vorhersage:</p> $\hat{u}_j = \frac{\sigma_u^2}{\sigma_e^2 + n_j \sigma_u^2} \cdot \sum_{k=1}^{n_j} (y_{jk} - \hat{\mu})$ <p style="text-align: center;">mit</p> <div style="border: 1px dashed black; padding: 5px; width: fit-content; margin: auto;"> $\hat{\mu} = \frac{\sum_{j=1}^a \frac{y_j}{\sigma_e^2 + n_j \sigma_u^2}}{\sum_{j=1}^a \frac{n_j}{\sigma_e^2 + n_j \sigma_u^2}}$ </div>	<p>Vorhersage:</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: auto;"> $\tilde{u}_j = \frac{\hat{\sigma}_u^2}{\hat{\sigma}_e^2 + n_j \hat{\sigma}_u^2} \cdot \sum_{k=1}^{n_j} (y_{jk} - \tilde{\mu})$ </div> <p style="text-align: center;">mit</p> <div style="border: 1px solid black; padding: 5px; width: fit-content; margin: auto;"> $\tilde{\mu} = \frac{\sum_{j=1}^a \frac{y_j}{\hat{\sigma}_e^2 + n_j \hat{\sigma}_u^2}}{\sum_{j=1}^a \frac{n_j}{\hat{\sigma}_e^2 + n_j \hat{\sigma}_u^2}}$ </div>
<p>Vorhersagegenauigkeit der BLUP:</p> $\text{MSE}(\hat{u}) = \sigma_u^2 \left(a + \sigma_u^2 \left(\frac{\sum_{j=1}^a \left(\frac{n_j}{\sigma_e^2 + n_j \sigma_u^2} \right)^2}{\sum_{j=1}^a \frac{n_j}{\sigma_e^2 + n_j \sigma_u^2}} - \sum_{j=1}^a \frac{n_j}{\sigma_e^2 + n_j \sigma_u^2} \right) \right)$	<p>Naive Approximation der Vorhersagegenauigkeit der EBLUP:</p>

$$\underline{\text{MSE}}(\hat{u}) = \hat{\sigma}_u^2 \left(a + \hat{\sigma}_u^2 \left(\frac{\sum_{j=1}^a \left(\frac{n_j}{\hat{\sigma}_e^2 + n_j \hat{\sigma}_u^2} \right)^2}{\sum_{j=1}^a \frac{n_j}{\hat{\sigma}_e^2 + n_j \hat{\sigma}_u^2}} - \sum_{j=1}^a \frac{n_j}{\hat{\sigma}_e^2 + n_j \hat{\sigma}_u^2} \right) \right)$$

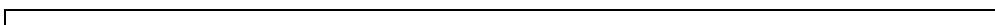
Der tatsächliche MSE der EBLUP wird durch den mittleren geschätzten MSE nach N_S Simulationsläufen gemäß $\overline{\text{MSE}}(\tilde{u}) = \sum_{i=1}^a \frac{1}{N_S} \sum_{j=1}^{N_S} (\tilde{u}_{ij} - \underline{u}_{ij})^2$ geschätzt, wobei $N_S=10000$ für die einzelnen Simulationsläufe gewählt wurde.

Tabelle 1: Versuchspläne ($a; n_i; N=100$) für ausgewählte Simulationsuntersuchungen

Versuchsplan	a	n_1	n_2	n_3	n_4	n_5	n_6	n_7	n_8	n_9	n_{10}
1	10	1	1	1	1	1	1	1	1	1	91
2	10	2	2	2	2	2	2	2	2	2	82
3	10	3	3	3	3	3	3	3	3	3	73
4	10	4	4	4	4	4	4	4	4	4	64
5	10	5	5	5	5	5	5	5	5	5	55
6	10	6	6	6	6	6	6	6	6	6	46
7	10	7	7	7	7	7	7	7	7	7	37
8	10	8	8	8	8	8	8	8	8	8	28
9	10	9	9	9	9	9	9	9	9	9	19
10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10

Einfluß von Modellparametern und Versuchsplan auf den MSE der BLUP

Zunächst soll der Einfluß der Varianzkomponenten (bzw. Ihres Verhältnisses) und des Versuchsplanes auf den MSE der BLUP beschrieben werden. In Abbildung 1 ist der mit proc mixed für bekannte Varianzkomponenten berechnete MSE der BLUP mit proc g3d in



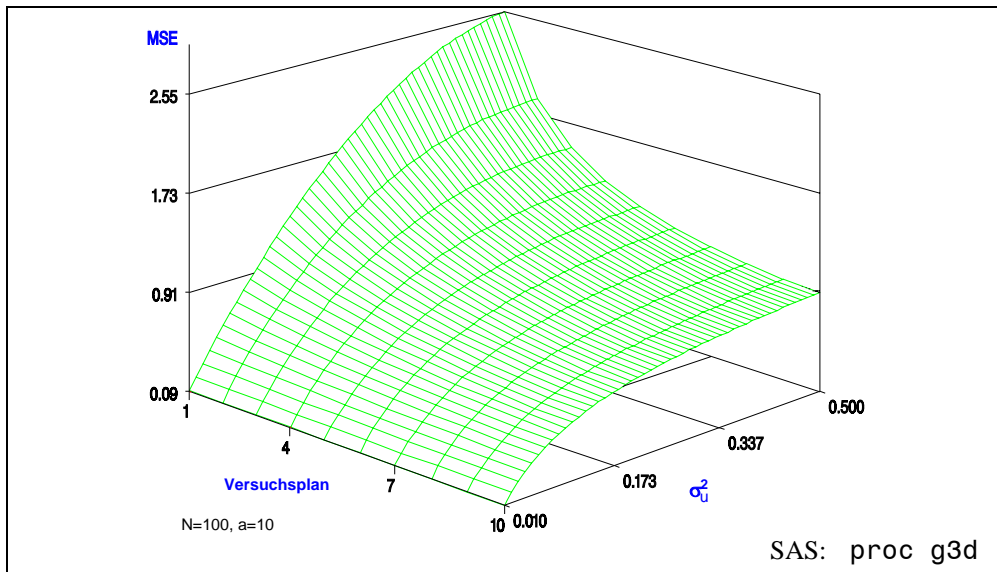


Abbildung 1: Berechneter MSE von BLUP in Abhängigkeit von der Balanciertheit des Versuchsplanes und σ_u^2 (Versuchspläne siehe Tabelle 1)

Abhängigkeit vom Versuchsplan (siehe Tabelle 1) und σ_u^2 dargestellt, wobei die Summe der Varianzkomponenten jeweils 1 beträgt. Man erkennt, daß bei festem Gesamtumfang N und fester Stufenanzahl a des zufälligen Faktors \underline{u} der MSE von BLUP mit steigender Unbalanciertheit des Versuchsplanes (höchste Unbalanciertheit bei Plan 1; balancierter Plan=Plan 10) und mit größerem Varianzkomponentenverhältnis entsprechend ansteigt.

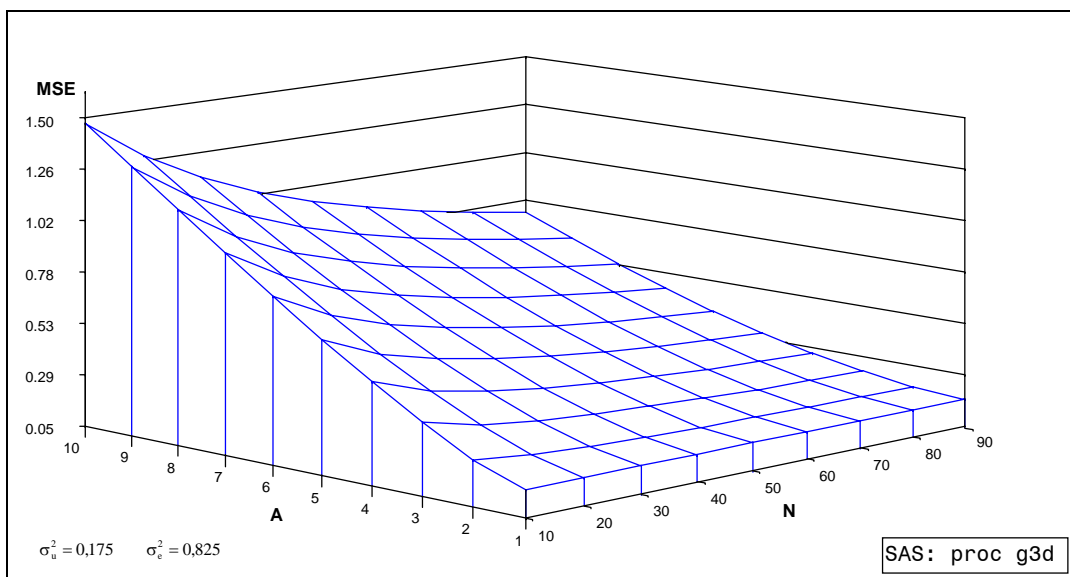


Abbildung 2: Berechneter MSE von BLUP bei balancierten Versuchsplänen in Abhängigkeit von a und $N = n \cdot a$

Während in Abbildung 1 N und a fest vorgegeben wurden, soll mit Abbildung 2 nun demonstriert werden, wie sich die Anzahl der Stufen a und der Gesamtumfang N bei festem Varianzkomponentenverhältnis und balanciertem Versuchsplan auf den berechneten MSE der BLUP auswirken. Dazu wurden die gleichen Hilfsmittel wie für Abbildung 1 verwendet. Es ergibt sich das erwartete Bild, nämlich daß bei Erhöhung der Anzahl der Stufen von \underline{u} der MSE der BLUP bei festem N steigt und mit Erhöhung von N fällt.

Relativer Genauigkeitsverlust von EBLUP in Beziehung zu BLUP und der MSE_SIM als gute Möglichkeit den MSE von EBLUP zu beurteilen

Sowohl die Genauigkeit der EBLUP und der BLUP als auch der relative Genauigkeitsverlust der EBLUP im Vergleich zur BLUP werden für das einfachste Modell in Abhängigkeit von der Balanciertheit des Versuchsplanes (bei festem Varianzkomponentenverhältnis) in Abbildung 3 und in Abhängigkeit vom Verhältnis der Varianzkomponenten (bei festem Versuchsplan) in Abbildung 4 dargestellt.

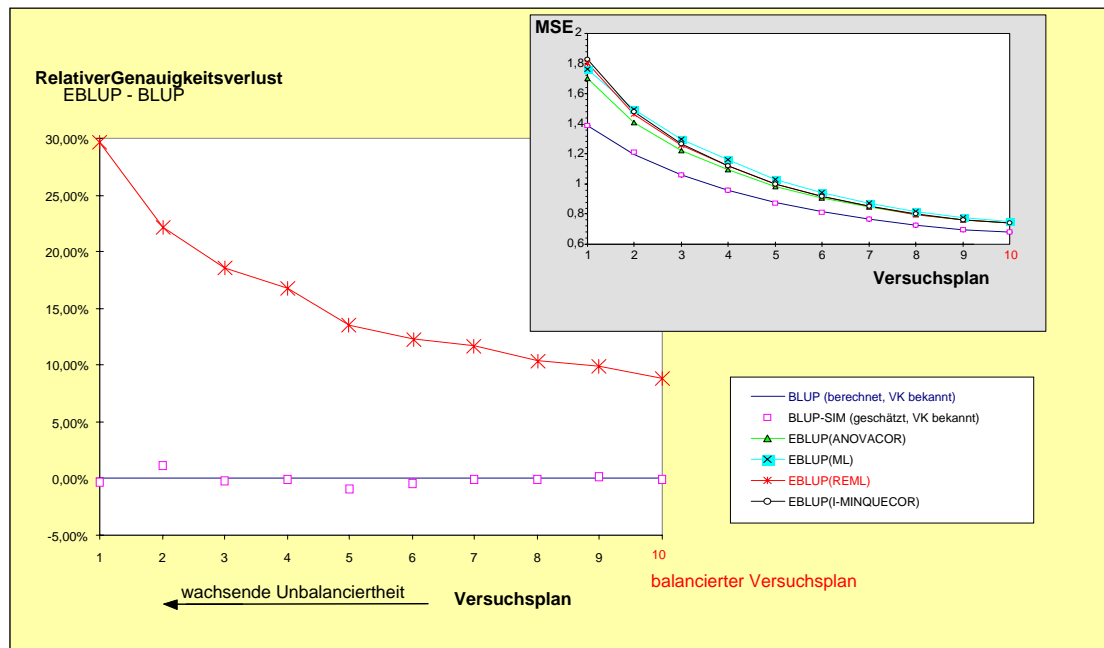


Abbildung 3: Relativer Genauigkeitsverlust (%) von EBLUP in Beziehung zu BLUP in Abhängigkeit von der Balanciertheit des Versuchsplanes (Tabelle 1); Normalverteilung; $\sigma_u^2 = 0,175$; $\sigma_e^2 = 0,825$

Die Genauigkeit (MSE) der EBLUP wurde dabei durch Simulation mit $N_S=10000$ Wiederholungen geschätzt. Für BLUP wurde der MSE sowohl über Simulation geschätzt als auch berechnet. In den Abbildungen 3 und 4 wird deutlich, daß sich der über Simulation geschätzte und der berechnete MSE der BLUP kaum unterscheiden, d.h. der über Simulation geschätzte MSE ist ein sehr brauchbares Maß für die Genauigkeit der EBLUP. Der Einfluß unterschiedlicher Varianzkomponentenschätzverfahren, die keine negativen Varianzkomponentenschätzwerte zulassen, auf den MSE der EBLUP ist im Vergleich zum Verlust an Genauigkeit gegenüber der BLUP relativ gering. Die entsprechenden Ergebnisse sind für ML-, REML-, ANOVACOR-Schätzer (negative ANOVA-Schätzwerte werden zu 0 gemacht) sowie I-MINQUECOR-Schätzer (iteratives MINQUE-Verfahren, bei dem negative Schätzwerte zu 0 gemacht werden) in den rechten oberen Ecken der Abbildungen 3 und 4 dargestellt. Wesentlich ist hier auch noch die Bemerkung, daß man auf keinen Fall negative Varianzschätzwerte verwenden sollte, da mit diesen der MSE nahezu ins Unermeßliche ansteigt.

Aus den Abbildungen 3 und 4 wird auch ersichtlich, daß beim praktikablen Verfahren EBLUP in Abhängigkeit vom Versuchsplan und den Modellparametern gerade bei kleineren Versuchsumfängen (N) zum Teil mit erheblichen Genauigkeitseinbußen gegenüber der BLUP gerechnet werden muß.

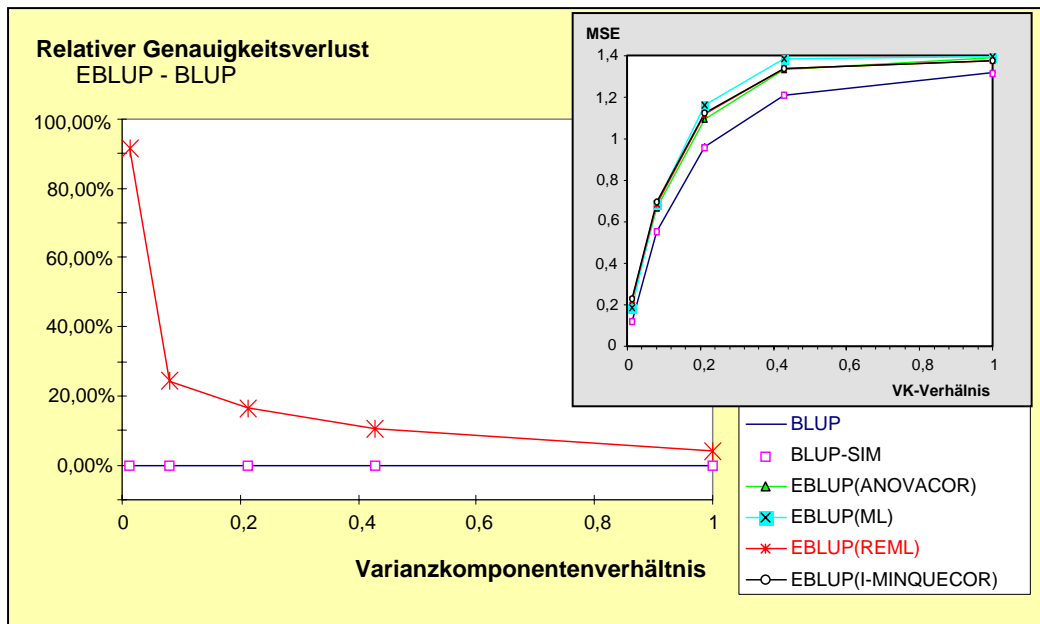


Abbildung 4: Relativer Genauigkeitsverlust (%) von EBLUP in Beziehung zu BLUP in Abhängigkeit vom Varianzkomponentenverhältnis σ_u^2/σ_e^2 Normalverteilung; VP = 4 (Tabelle 1)

Auf die Abhängigkeit des MSE der EBLUP von der Verteilung von \underline{u} und \underline{e} soll hier nicht eingegangen werden. Die erstellten SAS-Makros zur Schätzung des MSE der EBLUP mittels geplanter Computersimulation, die Bestandteil des SAS-Programmes sind, mit dem die in diesen und im folgenden Abschnitt dargestellten Ergebnisse bestimmt wurden, bieten natürlich die Möglichkeit, nichtnormale Verteilungen für \underline{u} und \underline{e} , die durch Schiefe und Exzeß charakterisiert werden, mittels Fleishman-Transformation (Fleishman; 1978) aus normalverteilten Pseudozufallszahlen zu erzeugen.

Beurteilung der naiven MSE-Approximation für EBLUP (MSE_NAIV) von proc mixed

Betrachtet man zunächst einmal eine Grundgesamtheit mit Varianzkomponenten $\sigma_u^2 = 0,3$ und $\sigma_e^2 = 0,7$. Es werden nun wiederholt Stichproben vom Umfang $N=100$ gemäß einem balancierten Versuchsplan mit $a=10$ und $n_i = n = 10$ gezogen und die Varianzkomponenten mittels REML geschätzt sowie die \underline{u}_i mittels EBLUP vorhergesagt und der zugehörige MSE der EBLUP durch MSE_NAIV approximiert. Stoppt man z.B. nach 1836 Wiederholungen und betrachtet zunächst die Häufigkeiten, mit der die entsprechenden Varianzkomponenten-

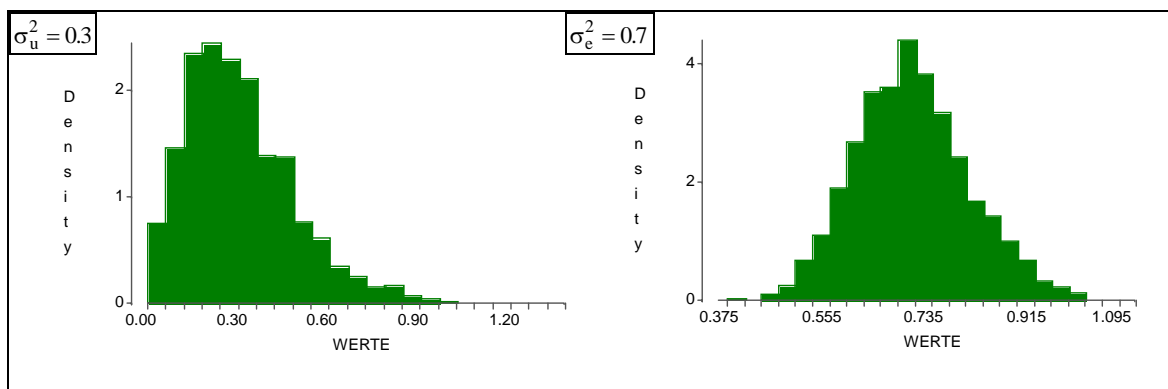


Abbildung 5: Density Plot für die REML-Varianzkomponentenschätzer $\hat{\sigma}_u^2$ und $\hat{\sigma}_e^2$ mit SAS/ INSIGHT

schätzwerte für σ_u^2 und σ_e^2 auftreten (Abbildung 5), so wird klar, daß zwar im Mittel die vorgegebenen Parameter näherungsweise erreicht werden, aber im Einzelfall doch recht deutliche Abweichungen auftreten können.

Moments				Moments			
N	1836.0000	Sum Wgts	1836.0000	N	1836.0000	Sum Wgts	1836.0000
Mean	0.3032	Sum	556.6971	Mean	0.6988	Sum	1283.0185
Std Dev	0.1796	Variance	0.0323	Std Dev	0.1012	Variance	0.0102
Skewness	0.9699	Kurtosis	1.3330	Skewness	0.2850	Kurtosis	0.0761
USS	227.9918	CSS	59.1946	USS	915.3757	CSS	18.7872
CV	59.2348	Std Mean	0.0042	CV	14.4795	Std Mean	0.0024

Es ist offensichtlich, daß sich damit für die naive MSE-Approximation ein ähnliches Bild ergibt (Abbildung 6). Die BOX-Plots verdeutlichen, daß ein balancierter Versuchsplan verwendet wurde.

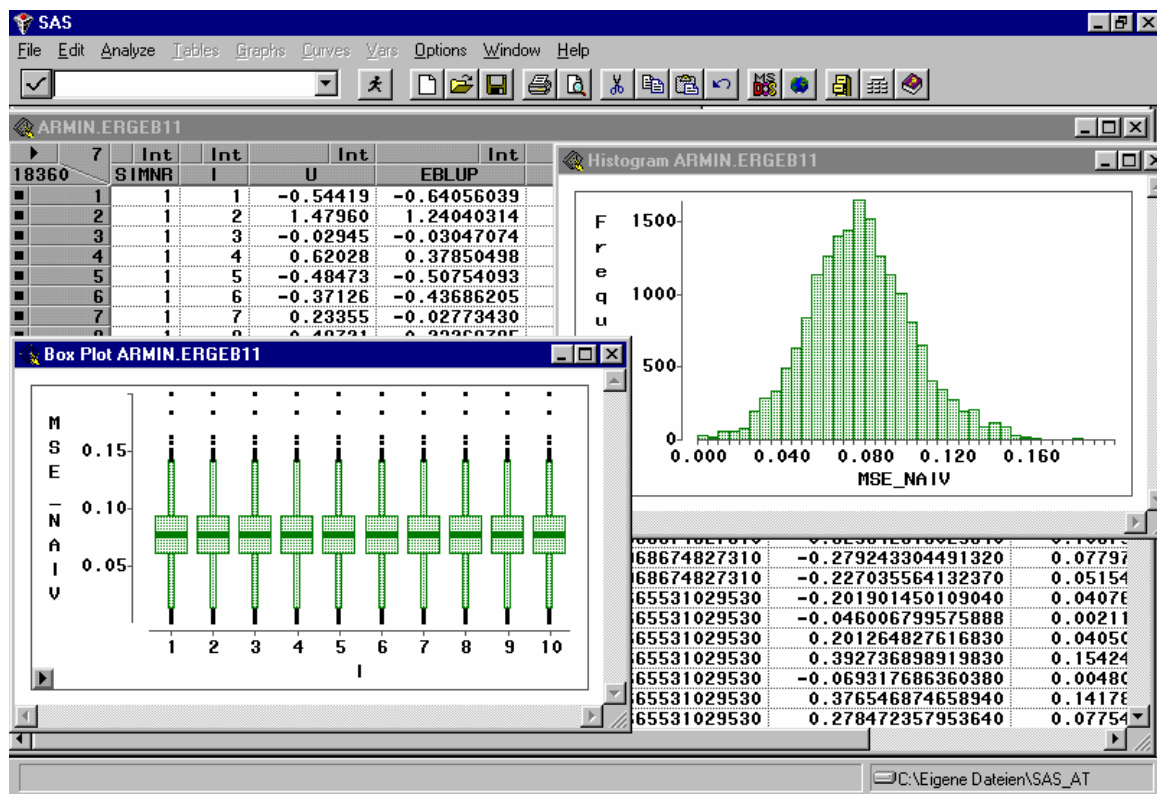


Abbildung 6: Histogramm für den durch proc mixed ausgegebenen naiven MSE von EBLUP bei geschätzten Varianzkomponenten (REML) und Box-Plots für den naiven MSE der Komponenten \underline{u}_i ($i=1, \dots, 10$) mit SAS/ INSIGHT

Fazit: Die naive MSE-Approximation für EBLUP (MSE_NAIV) von proc mixed ist keine feste Größe wie der MSE der BLUP, der nur vom Versuchsplan und den bekannten Varianzkomponenten und nicht von \underline{y} abhängt, sondern eine Zufallsvariable, die über die Varianzkomponentenschätzer von der Stichprobeninformation \underline{y} abhängt. Man kann also für Stichproben der gleichen Struktur und des gleichen Umfanges aus der gleichen Grundgesamtheit recht unterschiedliche Genauigkeitsangaben für die EBLUP bei gleichem Varianzkomponentenschätzverfahren bekommen.

Entsprechend den theoretischen Überlegungen von Kackar, R.N. und Harville, D.A. (1984) gilt im Mittel: $MSE_NAIV \leq$ tatsächlicher MSE von EBLUP, d.h. mit dem MSE_NAIV er-

hält man im Mittel immer eine Unterschätzung des MSE, d.h. eine Überschätzung der erzielbaren Vorhersagegenauigkeit der EBLUP. Es bleibt die Frage nach der Höhe der Überschätzung offen. Nach 8962 Simulationswiederholungen erhält man zum Beispiel für den MSE_NAIV

Variable	N	Minimum	Maximum	Mean	Std Dev
MSE_NAIV	8962	0.000113758	0.2008505		<u>0.0778330</u>
				0.0249864	

und als sehr guten Schätzwert für den tatsächlicher MSE über die 8962 Simulationswiederholungen den mittleren geschätzten MSE: **MSE_SIM = 0.0848267**.

Der **MSE_NAIV** führt bei diesem Beispiel im Mittel zu einer relativen Unterschätzung des tatsächlichen MSE von ca. 8,24 %, d.h., zur Ausgabe einer zu hohen Vorhersagegenauigkeit durch `proc mixed`.

In der Abbildung 7 wird die relative Unterschätzung des MSE der EBLUP durch die naive MSE-Approximation von `proc mixed` im Verhältnis zum tatsächlichen, durch Simulation geschätzten MSE der EBLUP für die Versuchspläne aus Tabelle 1 dargestellt.

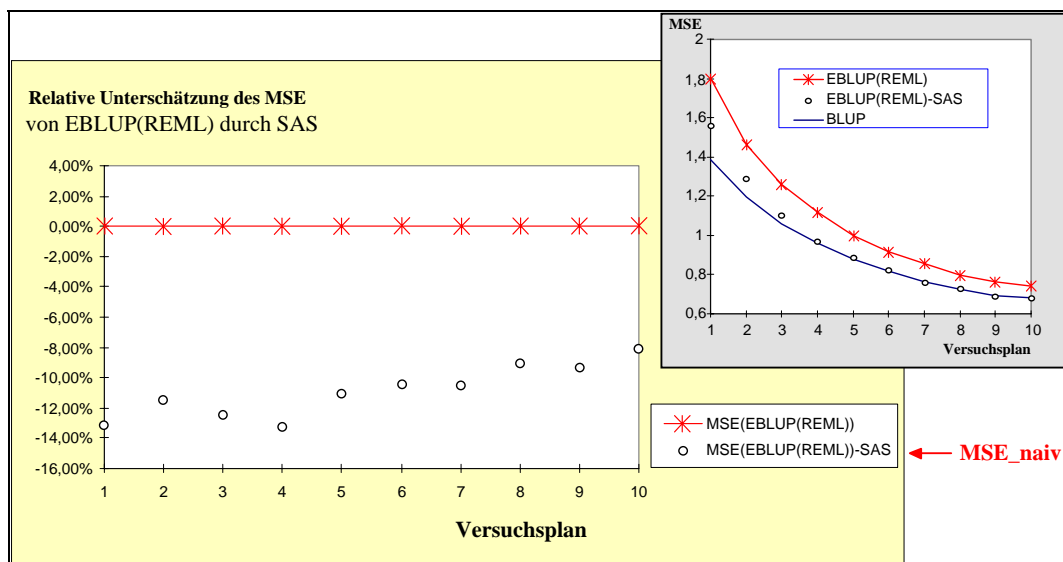
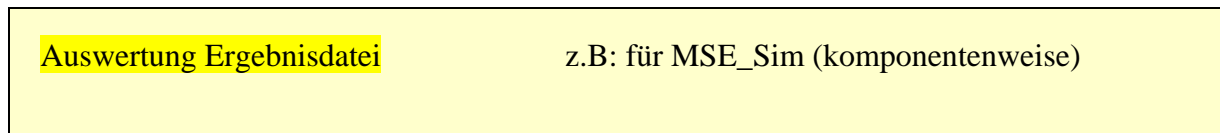
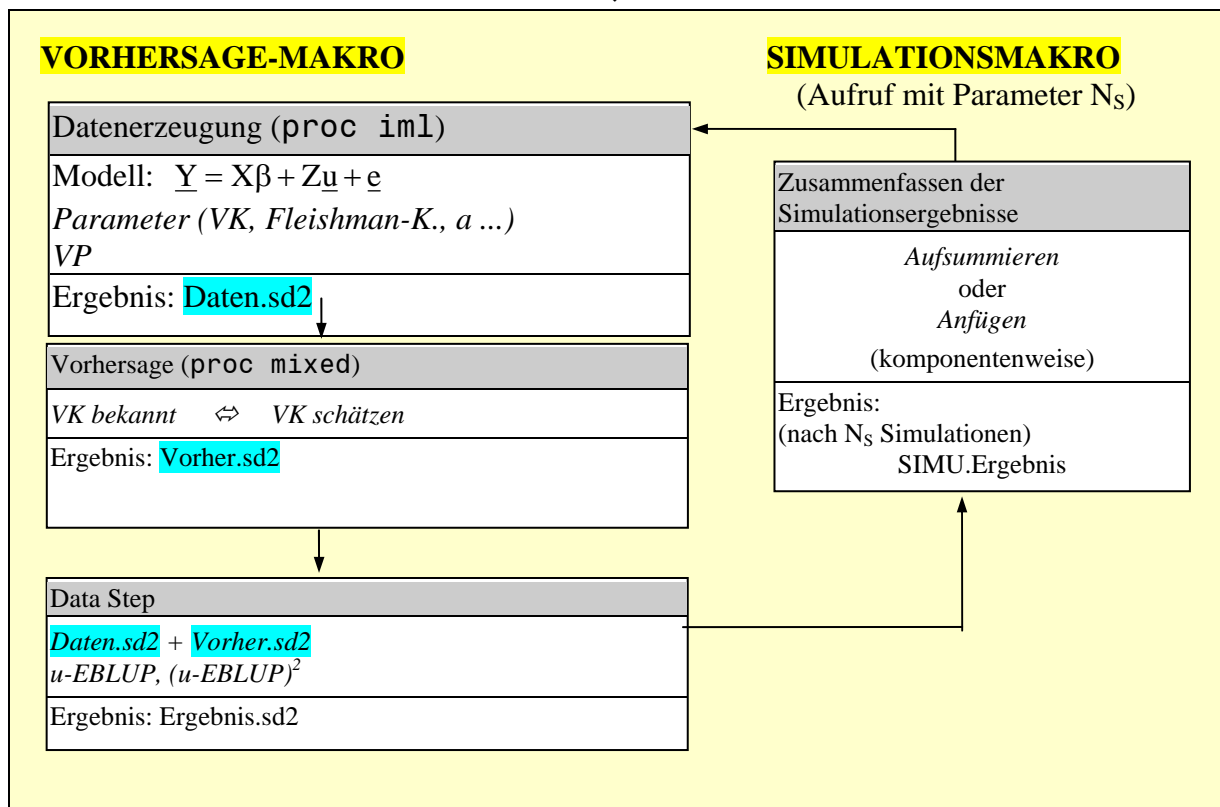
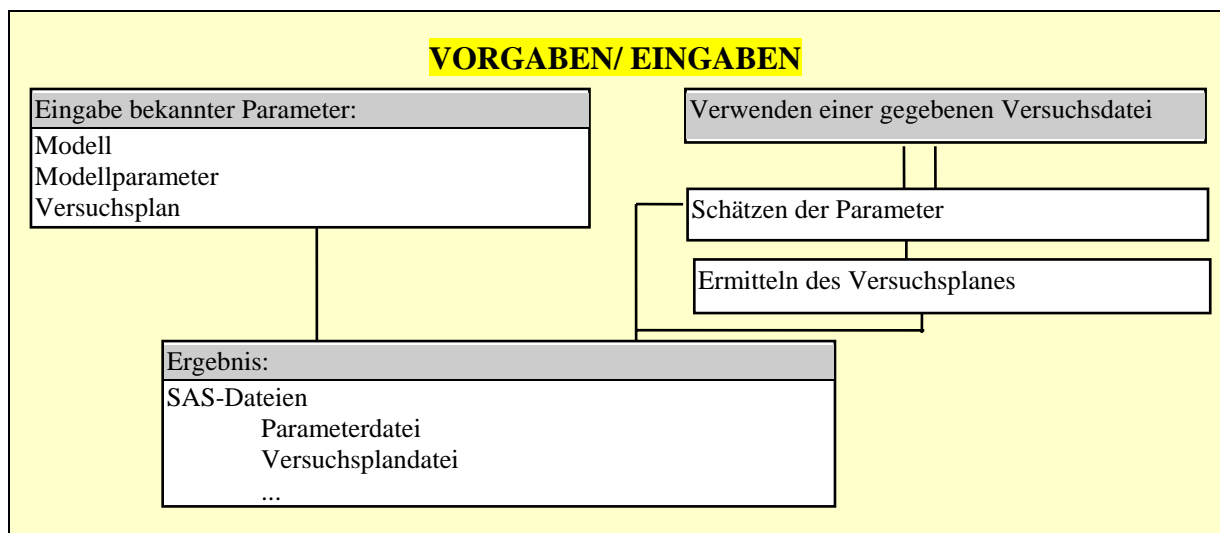


Abbildung 7: Relative Unterschätzung des MSE (%) von EBLUP durch die naive MSE-Approximation von `proc mixed` im Vergleich zum tatsächlichen MSE von EBLUP; Normalverteilung für \underline{u} und \underline{e} ; $\sigma_u^2 = 0,175$; $\sigma_e^2 = 0,825$

Generell muß man sagen, daß für relativ kleine Umfänge N auch im Hinblick auf eventuelle nichtnormale Verteilungen von \underline{u} Vorsicht bei Verwendung der naiven MSE-Approximation angebracht ist. Bei hinreichend großem N wird der Unterschied von der BLUP zur EBLUP wegen der genaueren Varianzkomponentenschätzung und der damit verbundene Unterschied durch die Unterschätzung des MSE der EBLUP im Vergleich zum tatsächlichen MSE geringer.

Das SAS-Simulationsprogramm zur Schätzung des tatsächlichen MSE, zur Bewertung der naiven MSE-Approximation von `proc mixed` und zur Untersuchung des Einflusses von Modellparametern und Versuchsplänen

Durch das folgende Schema soll das SAS-Simulationsprogramm, mit dessen Hilfe die hier vorgestellten Ergebnisse erzielt wurden kurz beschrieben werden. Es bietet die Möglichkeit, sowohl für vorgegebene Modelle, Modellparameter und Versuchspläne als auch aus



7	Int	Int	Int	Int	Int	Int	Int				
10	STUFE	ANZ	SIM	MSE	MEAN	MSE	VAR	MSE	SD	LOWERCL	UPPERCL
1	1	9005	0.0830	0.0141	0.1188	0.0805	0.0854				
2	2	9005	0.0856	0.0153	0.1236	0.0830	0.0881				
3	3	9005	0.0858	0.0141	0.1186	0.0833	0.0882				
4	4	9005	0.0855	0.0146	0.1207	0.0831	0.0880				
5	5	9005	0.0858	0.0142	0.1193	0.0833	0.0882				
6	6	9005	0.0835	0.0141	0.1188	0.0810	0.0860				
7	7	9005	0.0868	0.0155	0.1243	0.0843	0.0894				
8	8	9005	0.0839	0.0134	0.1159	0.0815	0.0863				
9	9	9005	0.0844	0.0145	0.1203	0.0819	0.0869				
10	10	9005	0.0852	0.0146	0.1207	0.0827	0.0877				

vorhandenen Daten geschätzten Parametern und ermittelten Versuchsplänen Simulationsuntersuchungen mit planbarer Genauigkeit durchzuführen.

Auf die folgenden Besonderheiten soll noch hingewiesen werden:

- Unterdrücken von Schreiben in das LOG-Fenster**
 Um bei der Simulation ein Überlaufen des LOG-Fensters zu verhindern, sind in SAS in den General Options: Source und Notes für LOG zu deaktivieren und das Schreiben von Fehler- und anderen Ausschriften in eine Datei umzuleiten, die mit jedem Aufruf des Simulations-Makros wieder überschrieben wird.
- Unterdrücken von Schreiben in das OUTPUT-Fenster**
 Um bei der Simulation ein Überlaufen des OUTPUT-Fensters zu verhindern, werden nicht unterdrückbare Ergebnisausschriften in eine Datei umgeleitet, die ebenfalls mit jedem Aufruf des Simulations-Makros wieder überschrieben wird.
- Probleme mit WINDOWS '95**
 Für Nutzer von Windows '95 sei der Hinweis gestattet, daß es bei diesem 'Betriebssystem' häufig zu unkontrollierten Abstürzen durch Systemfehler kommen kann.

Zusammenfassung

Die vorliegenden Betrachtungen wurden hier nur an einem sehr einfachen Modell demonstriert. Je komplexer aber das Modell wird, um so größer ist auch die Fehlerwahrscheinlichkeit bei Schätzung bzw. Vorhersage, d.h., die Differenz zwischen MSE von EBLUP und BLUP steigt bei festem Umfang N. Gleiches gilt auch für die naive MSE-Approximation von proc mixed. Die naive MSE-Approximation ist nur für hinreichend großes N zu empfehlen (in Abhängigkeit vom Modell, den Modellparametern, der Balanciertheit des Versuchsplanes). Bei kleinem N kann der MSE der EBLUP zum Teil erheblich durch die naive MSE-Approximation von proc mixed unterschätzt werden, d.h., die ausgegebene Genauigkeit kann erheblich über der tatsächlich erreichbaren Genauigkeit liegen.

Die Schätzung des MSE von EBLUP mittels Simulation ist dagegen eine brauchbare Methode. Die Genauigkeit dieser Methode ist über eine Versuchsplanung zum Simulationsumfang N_S regelbar.

SAS bietet ohne großen Programmieraufwand Werkzeuge, die geeignet sind, auch kompliziertere Computersimulationen durchzuführen, wobei aufwendiges Austesten der Programme entfällt, da geprüfte SAS-Prozeduren (wie z.B. proc mixed) zur Verfügung stehen. Durch die Komplexität der SAS-Prozeduren und die für aufwendige Simulationen nicht optimale

Verarbeitung muß man einen entsprechenden Schnelligkeitsnachteil gegenüber herkömmlichen Fortran-Simulationsprogrammen in Kauf nehmen. Dies ist aber kein echtes Problem, da derartige Simulationen unabhängig vom Bearbeiter auch in der dienstfreien Zeit laufen können. Um das Simulationsprogramm anwenderfreundlich zu gestalten, ist vorgesehen, eine entsprechende SAS/AF Applikation zu erstellen, mit der über MSE-Schätzung mittels Simulation für die EBLUP sowohl eine Beurteilung von Versuchsplänen und von Varianzkomponentenschätzern als auch eine Beurteilung von Modellen möglich ist. Dabei können auch Abweichungen von der Normalverteilung zugelassen werden.

Literatur

- Fleishman, A.L. (1978): A method for simulating non-normal distributions. *Psychometrika* 43, 521-532
- Henderson, C.R. (1974): General flexibility of linear model techniques for sire evaluation. *J. Dairy Sci.* 57, 963-972
- Herrendörfer, G.; Tuchscherer, A. (1996): Selection and breeding. *Journal of Statistical Planning and Inference* vol. 54, N° 3, 307 - 321
- Kackar, R.N. and Harville, D.A. (1984): Approximations for Standard Errors of Estimators of Fixed and Random Effects in Mixed Linear Models. *J. Amer. Stat. Assoc.* 79: 853-862.
- Tuchscherer, A.; Herrendörfer, G.; Tuchscherer, M. (1996): Investigations on Robustness of the Prediction in Mixed Linear Models. Abstract, XVIIIth International Biometric Conference, 01.-05. 07. 1996, Amsterdam, The Netherlands, p. 215.
- Tuchscherer, A. 1987: Die beste lineare erwartungstreue Vorhersage und ihre Anwendung für die Zuchtwertvorhersage. Dummerstorf; AdL Berlin, FZ für Tierproduktion, (Schriftenreihe: Probleme der angewandten Statistik, Heft 23)
- Tuchscherer, A. (1988): Some remarks on the prediction of breeding values by BLUP. in: Rasch; D.; Pirchner, F.; Adam, J.(eds): Proceedings of the International Conference on Population Mathematics in Schwerin, Part II, Dummerstorf; AdL Berlin, FZ für Tierproduktion, 120 - 133 (Schriftenreihe: Probleme der angewandten Statistik, Heft 25)
- Tuchscherer, A.; Rudolph, P.E.; Herrendörfer, G. (1997): Simulationsuntersuchungen zum Genauigkeitsverlust der besten linearen erwartungstreuen Vorhersage (BLUP) bei unbekanntem Varianzkomponenten in gemischten linearen Modellen mit SAS. Proceedings der 1. Konferenz der SAS-Benutzer in Forschung und Entwicklung (KSFE), 20. - 21. 02. 1997, in Berlin, Deutschland, 56 - 67.
(<http://www.hu-berlin.de/inside/rz/ksfe/>)
- Tuchscherer, A.; Herrendörfer, G. (1998): Evaluation of estimated BLUP in mixed linear models by a designed computer simulation. Proceedings of the 6th World Congress on Genetics Applied to Livestock Production, 12.01.-16.01. 1998, Armidale, NSW, Australia, vol. 25: 585-588, ISBN 1 86389 454 3