

Anmerkungen zur Frage „Blöcke fix oder zufällig“

Einleitung

Ausgehend von den Ausführungen von Frau RICHTER habe ich mich in den letzten Tagen noch einmal eingehend mit der Randomisationstheorie auseinandergesetzt und über die Konsequenzen für die Modellwahl zur Auswertung von Versuchen und Versuchsserien nachgedacht. Die nachfolgenden Ausführungen sind recht umfangreich. Daher vorab mein Fazit für unsere Diskussion.

Fazit für unsere Diskussion

- Es sind zwei gemischte Modelle zu unterscheiden: Das aus der Randomisationstheorie abgeleitete Modell, welches Summenrestriktionen und korrelierte Effekte impliziert, und das "übliche Modell", welches keine Summenrestriktionen enthält und unabhängige Effekte annimmt. Das übliche Modell ist dasjenige, welches in der Praxis bei einer REML Analyse verwendet wird (CLASS BLOCK BEH; MODEL Y=BEH; RANDOM BLOCK;).
- Die Randomisationstheorie erfordert separate Randomisationsschritte für Blöcke und Parzellen innerhalb Blöcken, wenn Blöcke als zufällig betrachtet werden.
- Zwar kann die Randomisationstheorie so erweitert werden, dass eine zufällige Stichprobennahme von Blöcken und von Parzellen in Blöcken zugelassen wird. Eine solche Stichprobennahme ist aber keinesfalls zwingend, und in vielen Fällen ist eine solche Zufallsauswahl nicht gegeben. Die Zufälligkeit von Blöcken und Parzelleneffekten kann (und muss oftmals) einzig und allein durch die Randomisation begründet werden (Fall $B = b$ und $K = k$ bei Calinski und Kageyama). Die Zufälligkeit von Blockeffekten im Randomisationsmodell hat daher eine grundsätzlich andere Begründung als dies im üblichen gemischten Modell der Fall ist, wo immer das Konstrukt der zufälligen Stichprobennahme bemüht werden muss. Dieses Konstrukt muss man bei der Randomisationstheorie nicht bemühen.
- Eine wesentlicher Grundgedanke für die Randomisationstheorie geht auf Neyman zurück. Er betrachtet als relevanten zu schätzenden wahren Wert einer Behandlung den mittleren Ertrag der Behandlung auf allen in einem konkreten Versuch verwendeten Parzellen, und nur auf diesen. Sofern Messfehler ausgeschlossen werden können, hat dies bei dem aus der Randomisation abgeleiteten Modell u.a. die interessante Konsequenz, dass Mittelwertschätzungen zwar eine Varianz aufweisen, dass aber die Varianz der Schätzung des Mittels über alle Behandlungen Null ist, und zwar auch bei zufälligen Blockeffekten! Dies liegt daran, dass sich diese Schätzung auf die Grundgesamtheit aller im Versuch verwendeten Parzellen bezieht, so dass hier in diesem Sinne eine Totalerhebung vorliegt. Dies ist fundamental anders im üblichen gemischten Modell, welches die Annahme impliziert, dass Blöcke und Parzellen eine Zufallsstichprobe aus einer größeren Grundgesamtheit darstellen, so dass die Summe der Mittelwerte immer eine positive Varianz hat.
- Randomisationstheorie und übliches Modell liefern grundsätzlich unterschiedliche Varianz-Kovarianz-Strukturen für Einzelwerte und Mittelwertschätzungen, und zwar sowohl bei Annahme zufälliger Effekte als auch bei Annahme fester Effekte.
- Die Strukturen sind allerdings jeweils äquivalent hinsichtlich der Schätzung von Kontrasten und deren Varianzen.
- Die Strukturen sind aber jeweils nicht äquivalent hinsichtlich der Schätzung von Varianzen von Mittelwerten.
- Mit Messfehlern weist die Varianz-Kovarianz-Struktur nach Randomisationstheorie eine

Überparametrisierung auf, welche die Nutzung in der Praxis einschränkt (siehe S. 11 f.). Im Randomisationsmodell kann die Varianz eines Mittelwertes nur geschätzt werden, wenn die Überparametrisierung aufgelöst wird, indem eine unabhängige Schätzung z.B. der Messfehlervarianz verwendet wird. Dies ist in den meisten Fällen nicht praktikabel.

- Aus diesem Grund ist man in der Praxis mehr oder weniger gezwungen, auf das übliche Modell zurückzugreifen. Die für mich einzig überzeugende Begründung für die Verwendung des üblichen Modells anstelle des Randomisationsmodells ist ganz pragmatisch: Beide Modelle liefern immer exakt dieselben Resultate hinsichtlich der Schätzung (BLUE oder empirische BLUE) von Kontrasten und deren Standardfehlern. Die Konstruktion von anderen Begründungen, welche eine Zufälligkeit der Stichprobennahme bei der Wahl der Blöcke oder Parzellen anführen, erscheinen mir sehr künstlich und unrealistisch.
- Da sich die Äquivalenz von Randomisationsmodell und üblichem Modell auf Kontrastschätzungen beschränkt, sollte man sich bei der Verwendung des üblichen Modells auf eben diese Kontraste beschränken. Da beide Modelle insbesondere nicht dieselben Resultate hinsichtlich der Standardfehler von Mittelwertschätzungen liefern (das Randomisationsmodell liefert gar nichts ohne unabhängige Information über Varianzkomponenten), sollte man auf die Interpretation von Standardfehlern der Mittelwerte verzichten.
- Der Randomisationsschritt der zufälligen Anordnung der Blöcke sollte bei unvollständigen Blöcken immer erfolgen. Bei vollständigen Blöcken kann er implizit immer unterstellt werden. In diesen Fällen ist die Annahme zufälliger Blöcke immer gerechtfertigt.
- Bei vollständigen Blöcken sollte immer zugelassen werden, dass die Blockvarianz negativ werden kann (NOBOUND in MIXED). Andernfalls findet eine automatische und implizite Modellreduktion statt, sobald die REML Schätzung gegen Null konvergiert. Dies führt zu einer invaliden Auswertung (Nelder, 1954). Eine äquivalente Lösung besteht bei vollständigen Blöcken darin, auf feste Blockeffekte zurückzufallen. Diese Lösung scheint mir am einfachsten zu sein.
- Bei unvollständigen Blöcken ist es wichtig, eine gute Varianzschätzung für die Blockeffekte zu erhalten, um die Inter-Block-Information effizient zu nutzen. Ein Rückfall auf ein Modell mit festen Blockeffekten ist dann gerechtfertigt, wenn die Zahl der Blöcke zu klein ist, um die Varianz verlässlich zu schätzen ($b \leq 10$ Blöcke). Außerdem würde ich immer auf die Annahme fester Blockeffekte zurückfallen, wenn eine REML Schätzung der Blockvarianz Null oder negativ wird. Bei unvollständigen Blöcken kann die NOBOUND Option in MIXED zu Konvergenzproblemen führen, wenn die Blockvarianz negativ wird. Ansonsten kann m.E. immer mit zufälligen Blöcken gearbeitet werden. Bei unvollständigen Blöcken wird man auf diese Weise in der Regel die effizientere Auswertung bekommen, weil so die Inter-Block-Information genutzt wird.
- Die Modellwahl bei der Auswertung des Einzelversuchs hat Konsequenzen für die Serienauswertung. Dies trifft insbesondere für eine Zweischrittanalyse zu, bei der im ersten Schritt die Einzelversuche ausgewertet werden, während im zweiten Schritt die Mittelwerte der Einzelversuche in einer Serienauswertung zusammen weiterverrechnet werden. Hierbei ist es geboten, die Schätzgenauigkeit aus der ersten Stufe für eine Gewichtung in der zweiten Stufe zu berücksichtigen. Wegen der vorrangigen Bedeutung der Kontraste, insbesondere der paarweisen Vergleiche, sollten die Gewichte so gewählt werden, dass die Varianzen einer Differenz möglichst optimal abgebildet werden. Dies bedeutet insbesondere, dass die Varianzen der Mittelwerte bei Modellen mit zufälligen Blöcken nicht die richtigen Gewichte liefern. Ein Vorschlag von Smith et al. (2001) ist, als Gewichte die Diagonalelemente der Inversen der Varianz-Kovarianz-Matrix der Mittelwertschätzungen eines Versuchs zu verwenden. Diese Gewichte bilden bei vollständigen Blockanlagen mit zufälligen Blöcken die Varianzen der Differenzen nur approximativ richtig ab. Es gibt eine Reihe alternativer Ansätze zur Bestimmung der Gewichte, die derzeit untersucht und entwickelt werden (Möhring et al., 2006). Einige dieser Ansätze bilden im Fall einer vollständigen Blockanlage die Varianzen der Differenzen exakt ab und versprechen deshalb Vorteile.

Empfehlung für die Praxis:

- (1) Blöcke generell zufällig nehmen, mit zwei Ausnahmen:
 - (a) $b \leq 10$ Blöcke
 - (b) REML Schätzung bei zufälligen Blöcken wird Null (oder negativ)
In diesen Fällen auf feste Blöcke zurückschalten.
- (2) Standardfehler eines Mittelwertes generell ignorieren. Nur Standardfehler von Mittelwertdifferenzen und anderen Kontrasten verwenden.
- (3) Bei Serienauswertungen Gewichte so wählen, dass Standardfehler einer Differenz je Versuch optimal approximiert werden.

Rekapitulation der bisherigen Diskussion in bezug auf die Randomisationstheorie

In der bisherigen Diskussion wurde von Frau Richter auf Details der Randomisationstheorie hingewiesen (Calinski und Kageyama, 2003). Die aus der Randomisationstheorie folgende Varianz-Kovarianz-Struktur hat eine etwas andere Form als die der üblichen modellbasierten Analyse mit REML entsprechende Varianz-Kovarianz-Struktur. Frau Richter macht hierzu unter anderem die folgenden Aussagen (hier einfach nur wiedergegeben: Zur genauen Erklärung muss man auf frühere Dokumente zurückgreifen).

Übliches Modell:

„Blocks zufällig:
$$\underline{y}_{si} = \mu + \alpha_s + \underline{\beta}_i + \underline{\varepsilon}_{si}$$

Voraussetzungen bzgl. $\underline{\varepsilon}_{si}$ wie oben

sowie $E(\underline{\beta}_i) = 0$, $\text{Var}(\underline{\beta}_i) = \sigma_B^2$ für jedes i und $\text{Cov}(\underline{\beta}_i, \underline{\beta}_{i'}) = 0$ für $i \neq i'$ (2)

sowie $\text{Cov}(\underline{\varepsilon}_{si}, \underline{\beta}_{i'}) = 0$ für jedes s und i, i' beliebig

$$\Rightarrow E(\underline{y}_{si}) = \mu + \alpha_s \text{ und } \text{Var}(\underline{y}_{si}) = \text{Var}(\underline{\beta}_i + \underline{\varepsilon}_{si}) = \sigma_B^2 + \sigma^2 \text{ für jedes } s \text{ und } i,$$

$$\text{sowie } \text{Cov}(\underline{y}_{si}, \underline{y}_{s'i'}) = \begin{cases} \sigma_B^2 & s \neq s', i = i' \\ 0 & s \neq s', i \neq i' \end{cases}$$

„

Randomisationstheorie:

„Wird (a) und (b) berücksichtigt, so erhält man wieder bei zusätzlichen Additivitätsannahmen für den zufälligen Beobachtungswert $\underline{y}_{ij(s)}$ des s -ten Prüfglieds im i -ten Block auf der j -ten

Parzelle:

$$\underline{y}_{ij(s)} = \mu + \alpha_{ij(s)} + \underline{\beta}_i + \underline{\eta}_{ij} + \underline{e}_{ij} \quad (4)$$

mit
$$\text{Cov}(\underline{y}_{ij(s)}, \underline{y}_{i'j'(s)}) = \begin{cases} \sigma_B^2 + \sigma_\eta^2 + \sigma_e^2 & i = i', j = j' \\ \sigma_B^2 + \frac{-1}{(K-1)} \sigma_\eta^2 & i = i', j \neq j' \\ \frac{-1}{(B-1)} \sigma_B^2 & i \neq i' \end{cases}$$

Für $K \rightarrow \infty$ (Zahl der Parzellen in Grundgesamtheit) und $B \rightarrow \infty$ (Zahl Blöcke in Grundgesamtheit) erhält man (2). Das bedeutet, zu (2) gelangt man im Randomisationsmodell nur dann, wenn davon ausgegangen wird, dass die im Versuch genutzten Parzellen eine zufällige Stichprobe aus der Menge aller Parzellen der denkbaren Blocks und die Blocks eine zufällige Stichprobe aus der Menge aller Blocks einer definierten Grundgesamtheit sind.“

Es ist m.E. wichtig darauf hinzuweisen, dass die Blockeffekte in den Modellen (2) und (4) nicht identisch definiert sind. Hierauf möchte ich im Folgenden näher eingehen und zeigen, dass zwischen beiden Modellen ansonsten durchaus ein hohes Maß an Äquivalenz besteht. Der Einfachheit halber und wegen der besonderen Bedeutung beschränke ich mich auf den Fall $B = b$ und $K = k$. Es wird also angenommen, dass nur die im Versuch verwendeten Blöcke zur Auswahl stehen sowie die in diesen Blöcken enthaltenen Parzellen. Hierbei wird also im Rahmen der Randomisationstheorie nicht davon ausgegangen, dass die verwendeten Blöcke und Parzellen eine Zufallsstichprobe aus einer größeren Grundgesamtheit darstellen, eine Annahme, die m.E. in der Regel schwer zu rechtfertigen ist. Diese Sichtweise deckt sich ganz wesentlich mit der von Neyman. Eine Erweiterung der nun folgenden Ableitungen auf den Fall $B > b$ und $K > k$ ist jedoch ohne weiteres möglich. Die Beschränkung auf den Fall $B = b$ und $K = k$ ermöglicht es, zu zeigen, dass man im Randomisationsmodell "fast vollständig" von (4) zu (2) gelangen kann, ohne dass „davon ausgegangen wird, dass die im Versuch genutzten Parzellen eine zufällige Stichprobe aus der Menge aller Parzellen der denkbaren Blocks und die Blocks eine zufällige Stichprobe aus der Menge aller Blocks einer definierten Grundgesamtheit sind.“ Außerdem möchte ich auf die interessante Tatsache hinweisen, dass die Modelle (2) und (4) äquivalent sind, wenn man in Modell (2) auf das "Mittel aller wahren Parzellenwerte" bedingt.

Varianz-Kovarianz-Struktur nach Randomisationstheorie

Ich beziehe mich hier zunächst weitgehend auf Calinski und Kageyama (2003). Es seien im folgenden m_{ij} die wahren Ertragswerte (bei gleicher Behandlung) auf der i -ten Parzelle im j -ten Block. Ich lasse der Einfachheit halber den Messfehler zunächst außen vor. Die wesentlichen Überlegungen im Rahmen der bei Calinski und Kageyama (2003) vorgestellten Randomisationstheorie, die offenbar ganz maßgeblich von J. Neyman beeinflusst sind, sind wie folgt:

- (1) Die wahren Werte m_{ij} sind feste Größen. Der Zufall kommt über die Randomisation ins Spiel (Parzellen in Blöcken und Blöcke). Zufällig sind in der Notation von Calinski und Kageyama (2003) nur die Kronecker-Variablen f und g , welche den Randomisationsprozess abbilden. Zufällig ist dann die durch Randomisation erfolgte Zuordnung von Werten m_{ij} zu den einzelnen Behandlungen.
- (2) Die Varianz-Kovarianz-Struktur der m_{ij} ist auf Basis einer Nullanalyse zu erstellen und wird durch den Randomisationsprozess induziert.
- (3) Behandlungsmittelwerte werden als Mittel über alle (!) wahren Werte definiert, sofern dieselbe Behandlung angewendet wurde. Auf diese Feinheit werde ich später noch eingehen.
- (4) Es wird Block-Behandlungs-Additivität angenommen.

Eine Feinheit in der Notation, die hier der Einfachheit halber ausgelassen wird, ist die Unterscheidung zwischen den wahren Werten einer Parzelle, die als fest betrachtet werden, und den nach Randomisation einer Behandlung zugeordneten wahren Werten. Letztere Zuordnung ist zufällig und induziert eine Korrelationsstruktur. Im folgenden spreche ich vereinfachend etwas locker von einer Varianz-Kovarianz-Struktur der wahren Werte m_{ij} .

Die aus der Randomisationstheorie folgende Varianz-Kovarianz-Struktur der Parzellenwerte m_{ij} ist (siehe Gl. 1.3.21 in Calinski und Kageyama, 2003, p.17; Notation von dort ist hier übernommen und weicht geringfügig von der in Gl. 4 von Frau Richter ab):

$$V_R = \text{var}(m) = (I_b - K_b) \otimes J_v \sigma_B^2 + I_b \otimes (I_v - K_v) \sigma_U^2, \quad (\text{I})$$

wobei I_n die n -dimensionale Einheitsmatrix ist, J_n eine $n \times n$ Matrix mit Einsen, $K_n = n^{-1} J_n$ und m der nach Blöcken und Parzellen in Blöcken geordnete Vektor der Werte m_{ij} . Diese Struktur ist identisch zu der von Frau Richter in ihrer Gl. (4) angegebenen Struktur, wenn die Messfehlervarianz σ_e^2 weggelassen wird und $B = b$ und $K = k$ gesetzt wird.

Varianz-Kovarianz-Struktur im Modell mit unabhängigen Effekten (übliches Modell)

Bei der Auswertung mit einem gemischten Modell unter Verwendung von REML Software wird üblicherweise das Modell

$$m_{ij} = \mu + b_j + f_{ij}$$

verwendet, wobei

$$b_j \sim N(0, \sigma_b^2) \text{ und} \\ f_{ij} \sim N(0, \sigma_f^2) \text{ ist.}$$

Dieses Modell bezeichne ich im Folgenden als "übliches Modell". In Matrixschreibweise ist

$$m \sim MVN[(1_b \otimes 1_v) \mu, V],$$

wobei m der nach Blöcken und Parzellen in Blöcken geordnete Vektor der m_{ij} ist und

$$V = I_b \otimes (v K_v \sigma_b^2 + I_v \sigma_f^2).$$

Man kann zeigen, dass dies äquivalent ist zu (John und Williams, 1995, p.136)

$$V = \xi_0 C_0 + \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2, \quad (\text{II})$$

wobei

$$C_0 = K_b \otimes K_v, \\ C_1 = (I_b - K_b) \otimes K_v, \\ C_2 = I_b \otimes (I_v - K_v), \\ \xi_0 = \xi_1 = v \sigma_b^2 + \sigma_f^2, \\ \xi_2 = \sigma_f^2.$$

Äquivalenz zwischen bedingtem üblichen Modell und Randomisationsmodell

Behandlungsmittelwerte werden bei Calinski und Kageyama als Mittel der Behandlung über alle verwendeten Parzellen definiert. Wesentlich für die formale Beziehung des einfachen gemischten Modells $m_{ij} = \mu + b_j + f_{ij}$ zum Randomisationsmodell von Calinski und Kageyama (2003) ist daher ein Bedingen auf das Mittel $\bar{m}_{..}$. Dieses Bedingen steht in Zusammenhang mit der Tatsache, dass für ein gegebenes Feld das Mittel $\bar{m}_{..}$ eine Konstante ist und somit keine Varianz hat. Außerdem ist dieses Bedingen relevant, weil in der Randomisationstheorie von Calinski und Kageyama (2003) Mittelwerte der Behandlungen in bezug auf das Mittel aller Parzellenwerte, also $\bar{m}_{..}$, definiert werden. Im unbedingten Modell hat dagegen $\bar{m}_{..}$ die Varianz

$\text{var}(\bar{m}_{..}) = \frac{\sigma_b^2}{b} + \frac{\sigma_f^2}{bv}$. Zur Ableitung der bedingten Verteilung betrachten wir die gemeinsame

Verteilung der Werte m und des Gesamtmittels $\bar{m}_{..}$:

$$\begin{pmatrix} m \\ \bar{m}_{..} \end{pmatrix} \sim MVN \left[\begin{pmatrix} 1_b \otimes 1_v \mu \\ \mu \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} V & 1_b \otimes 1_v \phi \\ 1_b' \otimes 1_v' \phi & \phi \end{pmatrix} \right],$$

wobei

$$\phi = b^{-1}\sigma_b^2 + b^{-1}v^{-1}\sigma_f^2 = (bv)^{-1}\xi_0.$$

Die bedingte Verteilung ist (Searle et al., 1992, p.464)

$$(m | \bar{m}_{..}) \sim MVN[1_b \otimes 1_v \bar{m}_{..}, V_{\bar{m}}] \text{ mit}$$

$$V_{\bar{m}} = V - J_b \otimes J_v \phi = \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2. \quad (\text{III})$$

Diese Struktur ist interessanterweise identisch mit der aus der Randomisationstheorie bei Calinski und Kageyama folgenden Struktur V_R in Gl. (I) mit folgenden Entsprechungen:

$$\sigma_B^2 \equiv v^{-1}\xi_1 \text{ und}$$

$$\sigma_U^2 \equiv \xi_2.$$

Bei Verwendung des Modells mit unabhängigen Effekten ist es für die Inferenz bzgl. Kontrasten allerdings unerheblich, ob man die Randverteilung und somit V oder die bedingte Verteilung und somit $V_{\bar{m}}$ verwendet. Es ergeben sich lediglich Auswirkungen auf die Varianz der Mittelwerte.

Zur näheren Betrachtung beziehen wir nun Behandlungseffekte τ_i mit ein. Das Modell für die Daten lautet dann

$$y_{ij} = \tau_i + m_{ij},$$

$$y \sim MVN[(1_b \otimes 1_v)\mu + 1_b \otimes \tau, V],$$

wobei $\tau = (\tau_1, \tau_2, \dots)'$ ist. Demgegenüber ist die bedingte Verteilung

$$(y | \bar{m}_{..}) \sim MVN[1_b \otimes 1_v \bar{m}_{..} + 1_b \otimes \tau, V_{\bar{m}}].$$

In beiden Fällen sind die BLUE der Behandlungsmittelwerte gleich den einfachen Mittelwerten

$$\bar{y} = b^{-1}(\mathbf{1}'_b \otimes I_v)y \quad .$$

Im Fall des bedingten Modells bzw. des Randomisationsmodells schätzen wir

$$\theta_i^{\bar{m}} = \bar{m}_{\bullet\bullet} + \tau_i,$$

den Mittelwert der Behandlung über die verwendeten Parzellen (alle!). Hier verwenden wir die Varianz-Kovarianz-Struktur

$$V_{\bar{m}} = V_R = \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2$$

und erhalten

$$\text{var}_{\bar{m}}(\bar{y}) = b^{-1} \xi_2 (I_v - K_v) \quad .$$

Im Fall des unbedingten Modells schätzen wir dagegen

$$\theta_i = \mu + \tau_i,$$

den Mittelwert für die Behandlung in einer hypothetischen, unendlich großen Population von Parzellen, und die Varianz-Kovarianz-Struktur der Daten ist

$$V = \xi_0 C_0 + \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2 \quad .$$

Wir erhalten

$$\text{var}(\bar{y}) = b^{-1} \xi_0 K_v + b^{-1} \xi_2 (I_v - K_v) \quad .$$

Hierbei habe ich verwendet dass:

$$b^{-2}(\mathbf{1}'_b \otimes I_v)C_0(\mathbf{1}_b \otimes I_v) = b^{-2}\mathbf{1}'_b K_b \mathbf{1}_b \otimes K_v = b^{-1}K_v$$

$$b^{-2}(\mathbf{1}'_b \otimes I_v)C_1(\mathbf{1}_b \otimes I_v) = b^{-2}\mathbf{1}'_b (I_b - K_b)\mathbf{1}_b \otimes K_v = 0$$

$$b^{-2}(\mathbf{1}'_b \otimes I_v)C_2(\mathbf{1}_b \otimes I_v) = b^{-2}\mathbf{1}'_b I_b \mathbf{1}_b \otimes (I_v - K_v) = b^{-1}(I_v - K_v)$$

Die Konsequenz ist, dass sich die Varianz der Mittelwerte bei bedingtem und unbedingtem Modell unterscheiden. Insbesondere ist im unbedingten Modell die Varianz größer, nämlich gleich $b^{-1}(\sigma_b^2 + \sigma_f^2)$. Dies liegt daran, dass dieses Modell sich genau genommen auf eine Grundgesamtheit bezieht, aus der eine Stichprobe von Parzellen gezogen wurde. Demgegenüber bezieht sich das bedingte Modell nur auf die konkret ausgewählten Parzellen (es bedingt auf diese) und die Schlüsse sind auf diese beschränkt. Somit werden die Varianzen der Mittelwerte kleiner, und zwar gleich $(v-1)v^{-1}b^{-1}\sigma_f^2$. Man beachte, dass diese Varianz frei von den Blockeffekten ist. Man ist hier also, wenn man sich auf die Randomisationstheorie beruft (dort ist die Varianzstruktur dieselbe wie im bedingten Modell), sehr nahe an einer Auswertung im üblichen Modell mit festen Blockeffekten, und zwar auch dann wenn man im Randomisationsmodell mit zufälligen Blöcken arbeitet! Die Varianz der Mittelwerte ist sogar

etwas kleiner!

Aufschlussreich ist auch eine Betrachtung der Varianz der Summe (oder des Mittelwertes) der Behandlungsmittelwerte. Im bedingten Modell finden wir

$$\text{var}_{\bar{m}}(1' \bar{y}) = 1' [b^{-1} \xi_2 (I_v - K_v)] 1 = 0 \quad (!),$$

im unbedingten dagegen

$$\text{var}(1' \bar{y}) = v b^{-1} \xi_0 K_v$$

Die Varianz von Null im bedingten Modell ist Konsequenz der Tatsache, dass auf die im konkreten Versuch stehenden Parzellen bedingt wird. Dies ist wiederum sehr nah an der Grundidee von Neyman, welche im nächsten Abschnitt näher beleuchtet wird.

Ich bin der Ansicht, dass Standardfehler der Mittelwerte irrelevant sind, solange die verwendeten Versuchseinheiten nicht eine echte Zufallsstichprobe aus einer wohl definierten Grundgesamtheit sind. Daher ist m.E. auch der genannte Unterschied des bedingten Modells (und damit des Randomisationsmodells von Calinski und Kageyama) einerseits und des üblichen unbedingten gemischten Modells andererseits praktisch weitgehend irrelevant.

Für lineare Kontraste sind die Varianzen dagegen bei beiden Modellen identisch:

$$\text{var}_{\bar{m}}(c' \bar{y}) = \text{var}(c' \bar{y}) = b^{-1} \xi_2 c' c \quad ,$$

wobei $c' 1_v = 0$ ist. Da es bei Versuchen fast immer nur um die Beurteilung von Kontrasten geht, ist es unerheblich, ob man das unbedingte (bzw. das Randomisations-) Modell oder das bedingte Modell nimmt.

Das bedingte Modell ist formal (in der implizierten Varianz-Kovarianz-Struktur, nicht in der Herleitung) äquivalent zum Modell von Calinski und Kageyama (2003). Daher sind Randomisationsmodell von Calinski und Kageyama (2003) und das "übliche Modell" weitgehend äquivalent, soweit Behandlungskontraste betrachtet werden.

Messfehler: Calinski und Kageyama (2003) berücksichtigen in ihrem Modell noch einen Messfehler. Hinzufügen dieses Fehlers bedeutet lediglich die Addition des Terms $I_b \otimes I_v \sigma_e^2$ in V . Im Modell mit unabhängigen Effekten ist der Messfehler mit dem Resteffekt der Parzellen (f_{ij}) vermengt.

Feste Blöcke: Manche Autoren, z.B. Hinkelmann und Kempthorne (1994), verwenden im wesentlichen dieselbe Randomisationstheorie, betrachten Blockeffekte aber durchweg als fix (siehe zu dieser Annahme auch Calinski und Kageyama, 2003), was mit einer unterlassenen Randomisation zwischen den Blöcken einhergeht. Es bleiben hinsichtlich der Varianz-Kovarianz-Struktur Unterschiede zum üblichen linearen Modell bestehen, die aber für Kontraste zwischen Behandlungen keine Auswirkung haben: Die betreffenden Auswertungen nach beiden Modellen auch hier sind äquivalent untereinander und außerdem identisch zur Auswertung mit zufälligen Blöcken.

Neyman und Fisher

Es gibt ursprünglich offenbar zwei verschiedene Spielarten in der Randomisationstheorie. Die eine geht auf Fisher zurück und die andere auf Neyman. Lesenswert hierzu ist der Kommentar von T. P. Speed (1991) zu einem Artikel zum Thema zufällige Blockeffekte (Samuels et al., 1991). Ich wiederhole hier wichtige Aussagen aus dem zitierten Beitrag und reproduziere Formeln in der dort gewählten Notation. Diese Notation weicht etwas ab von der bisher hier verwendeten.

Neyman hat folgende Definition eines Behandlungsmittelwertes vor Augen:

"I will now discuss the design of a field experiment involving plots ... In designing the experiment let us consider a field divided into m equal plots ... To compare v varieties, we will consider that many sequences of numbers, each of them having two indices (one corresponding to the variety and one corresponding to the plot):

$$U_{i1}, U_{i2}, \dots, U_{im} \quad (i = 1, 2, \dots, v) \quad (*)$$

[Neyman has already introduced a notion of true yield and U_{ik} is the true yield of variety i on plot k .]

The number

$$a_i = \frac{\sum_{k=1}^m U_{ik}}{m}$$

is the average of the numbers (*) and is the best estimate of the yield from the i -th variety on the field.

The goal of a field experiment which consists of the comparison of v varieties will be regarded as equivalent to the problem of comparing the numbers

$$a_1, a_2, \dots, a_v$$

or their estimates."

Neyman hat offenbar einen großen Einfluss auf seinen Landsmann Calinski, denn dessen Buch mit Kageyama (2003) basiert nach meinem Eindruck ganz wesentlich auf den Ideen von Neyman. Ganz zentral ist dort wie bei Neyman die Idee, den Mittelwert einer Behandlung in bezug auf die Summe aller tatsächlich verwendeten Parzellen zu definieren.

Fisher war in dieser Hinsicht offenbar weniger spezifisch. Dies wird besonders deutlich bei der Formulierung eines Modells. Nach der Interpretation von T. Speed hatte Fisher wahrscheinlich folgendes Modell vor Augen:

$$x_{ij}(k) = t_k + b_i + \varepsilon_{ij}$$

wobei t_k die Behandlungseffekte sind, ε_{ij} sind Zufallsvariablen mit Mittelwert Null, und die Blockeffekte b_i könnten Konstanten oder Zufallsvariablen sein (!!). Das ist genau unser Hauptdiskussionspunkt. Der ist also bei Fisher sekundär! Das Modell entspricht Gl. (2) von Frau Richter bzw. dem üblichen Modell.

Neyman war dagegen sehr viel spezifischer. Insbesondere spiegelt sein Modell die angesprochene Definition eines Behandlungsmittelwertes wieder. Die "wahren Erträge" $X_{ij}(k)$ der k -ten Behandlung, die auf der j -ten Parzelle im i -ten Block erzielt werden können, können wie folgt zerlegt werden:

$$X_{ij}(k) = X_{..}(k) + B_i(k) + \eta_{ij}(k)$$

wobei

$B_i(k) = X_{i.}(k) - X_{..}(k)$ = Effekt für die Fruchtbarkeit im i -ten Block ist,

$\eta_{ij}(k) = X_{ij}(k) - X_{i.}(k)$ = Effekt für die Fruchtbarkeit der j -ten Parzelle im i -ten Block (Bodenfehler)

Der gemessene Ertrag ist dann

$$\begin{aligned} x_{ij}(k) &= X_{ij}(k) + \varepsilon_{ij}(k) \\ &= X_{..}(k) + B_i(k) + \eta_{ij}(k) + \varepsilon_{ij}(k) \end{aligned}$$

wobei $\varepsilon_{ij}(k)$ ein technischer Fehler ist. Das Modell entspricht dem bei Calinski und Kageyama (2003) und der Gl. (4) von Frau Richter, wenn der Messfehler weggelassen wird. Neyman wird in der engl. Übersetzung wie folgt zitiert: "Our purpose in the field experiment is to compare numbers such as $X_{..}(k)$, or average true yields which our objects are able to give when applied to the whole field (Neyman 1935, p.111)." --- Bei Fisher geht es dagegen um das Schätzen der Effekte t_k , die nicht identisch sind mit $X_{..}(k)$. Erstere entsprechen der Funktion $\theta_i^m = \bar{m}_{..} + \tau_i$, letztere entsprechen der Funktion $\theta_i = \mu + \tau_i$ in meiner Notation.

Das Modell von Neyman beruht ganz wesentlich auf der Identität

$$X_{ij}(k) = X_{..}(k) + (X_{i.}(k) - X_{..}(k)) + (X_{ij}(k) - X_{i.}(k)) .$$

Diese hat maßgeblichen Anteil an der etwas ungewohnten Form der Varianz-Kovarianz-Struktur in Calinski und Kageyama (2003), welche Folge der impliziten Summenrestriktionen für zufällige Blöck- und Parzelleneffekte ist.

Um es hier noch einmal zu wiederholen (Notation wie im vorangegangenen Abschnitt): Bei Weglassen des Messfehlers impliziert das Modell von Fisher eine Varianz-Kovarianz-Struktur der Form

$$V = \xi_0 C_0 + \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2 ,$$

während das von Neyman die Struktur

$$V_R = V_{\bar{m}} = \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2$$

impliziert. Erstere Struktur ist identisch mit der im üblichen gemischten Modell mit zufälligen Blöcken, während letztere identisch ist mit derjenigen im üblichen Modell, wenn man auf das Gesamtittel aller wahren Parzellenwerte bedingt. Das Modell von Fisher wird v.a. in der von England beeinflussten Literatur verwendet, z.B. John und Williams (1995). Diese Publikation

verwendet für die Blockanlage explizit die Struktur $V = \xi_0 C_0 + \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2$, während Calinski und Kageyama (2003) die Struktur $V_R = V_{\bar{m}} = \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2$ verwenden.

John und Williams (1995) berufen sich allerdings nicht direkt auf die Randomisationstheorie, sondern verfolgen einen modellbasierten Ansatz. Der wesentliche Vorteil eines modellbasierten Ansatzes gegenüber der Randomisationstheorie besteht darin, dass man auch bei ungleicher Blockgröße und sonstigen Abweichungen von "einfachen Blockstrukturen" (Nelder, 1965), für die keine vollständige Randomisationstheorie besteht, ohne weiteres ein Modell formulieren kann (John und Williams, 1995). Dies gilt vor allem auch für geostatistische Ansätze zur Auswertung von Feldversuchen, die keine Basis in der Randomisationstheorie haben.

Implementation in SAS

Das Randomisationsmodell von Calinski und Kageyama (2003) sowie das bedingte „übliche“ Modell weisen eine singuläre Varianz-Kovarianz-Struktur auf. Daher kann ein REML Paket wie MIXED nicht ohne weiteres verwendet werden, um diese Modell anzupassen, denn bei singulärer Varianz-Kovarianz-Struktur bricht es mit einer Fehlermeldung ab. Man kann das Paket jedoch überlisten, indem man einen Koeffizienten der Struktur z.B. in K_b minimal so verändert, dass die Singularität aufgehoben wird. Dies ist in den folgenden SAS Anweisungen implementiert. Im bedingten Modell mit Messfehler sowie im Randomisationsmodell mit Messfehler ist die Singularität aufgelöst, so dass die numerische Überlistung von MIXED entfallen kann. Allerdings sind diese Modelle überparametrisiert, so dass die Varianzkomponenten nicht eindeutig geschätzt werden können. Diese Gegebenheiten werden im folgenden an einem simulierten Beispiel erläutert.

Für simulierten Daten mit $v = 3$ und $b = 4$ (siehe SAS Anweisungen am Ende dieses Abschnittes) ergeben sich folgende Standardfehler bei verschiedenen Modellen:

Tab. 1: Übliches Modell

Modell	-2 log L	$\hat{\sigma}_b^2$	$\hat{\sigma}_f^2$	$\hat{\sigma}_e^2$	s.e.m.	s.e.d.
Blöcke fix	15.7	---	0.2926	---	0.2705	0.3825
$V = \xi_0 C_0 + \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2$ (unbedingt):						
Blöcke zufällig	22.4	0.2421	0.2926	---	0.3656	0.3825
Blöcke zufällig, BLUP $\mu + \tau_i + \bar{b}$.	22.4	0.2421	0.2926	---	0.2705	0.3825
$V_{\bar{m}} = \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2$ (bedingt):						
Blöcke zufällig	22.4	0.2421	0.2926	---	0.2208	0.3825
$V_{\bar{m}} + I_b \otimes I_v \sigma^2$:						
Blöcke zufällig, mit Messfehler [§]	22.4	0.2421	-6.4604	6.7530	0.7820	0.3825
Blöcke zufällig, mit Messfehlervarianz fixiert bei 2	22.4	0.2421	-1.7074	2	0.4642	0.3825

§ Je nach Startwerten der Varianzparameter ergeben sich unterschiedliche Varianzkomponentenschätzungen.

Tab. 2: Randomisationsmodell

Modell	-2 log L	$\hat{\sigma}_B^2$	$\hat{\sigma}_U^2$	$\hat{\sigma}_e^2$	s.e.m.	s.e.d.
$V_R = (I_b - K_b) \otimes J_v \sigma_B^2 + I_b \otimes (I_v - K_v) \sigma_U^2$ Blöcke zufällig (Calinski & Kageyama, 2003)	22.4	0.3397	0.2926	---	0.2208	0.3825
$V_R + I_b \otimes I_v \sigma_e^2$ Blöcke zufällig, mit Messfehler [§]	22.4	0.1326	-0.3285	0.6211	0.3171	0.3825
Blöcke zufällig, mit Messfehlervarianz fixiert bei 2	22.4	-0.3270	-1.7074	2	0.4642	0.3825
Blöcke zufällig, mit Blockvarianz fixiert bei 0	22.4	0	-0.7263	1.0190	0.3656	0.3825

§ Je nach Startwerten der Varianzparameter ergeben sich unterschiedliche Varianzkomponentenschätzungen.

Die REML log-Likelihoods stimmen in allen Modellen mit zufälligen Blöcken überein, was zunächst das hohe Maß an Äquivalenz bestätigt. Unterschiede ergeben sich vor allem im s.e.m. (Standardfehler eines Mittelwertes), nicht aber im s.e.d. (Standardfehler einer Differenz).

Im Detail bestätigt sich, dass der Standardfehler eines Mittelwertes im Randomisationsmodell mit zufälligen Blöcken und ohne Messfehler sowie im bedingten Modell kleiner ist als im üblichen Modell mit festen Blöcken. Dies liegt daran, dass in letzterem Modell nur auf die Blockeffekte bedingt wird, während im Randomisationsmodell zusätzlich auf die Parzelleneffekte bedingt wird. Wenn man im üblichen Modell mit zufälligen Blöcken BLUP $\mu + \tau_i + \bar{b}_i$ berechnet, erhält man interessanterweise dieselben Standardfehler der Mittelwerte wie im üblichen Modell mit festen Blöcken. Wenn im bedingten Modell ein Messfehler hinzugenommen wird, so ändert sich die Parzellenfehlervarianz ($\hat{\sigma}_f^2$), wobei die Schätzwerte sich beliebig durch Wahl der Startwerte für die Varianzparameter in der REML Schätzung verschieben lassen. Die Summe $\hat{\sigma}_f^2 + \hat{\sigma}_e^2$ beträgt allerdings immer 0.2926. Das Modell ist überparametrisiert, was an der Meldung im log-Fenster zu sehen ist:

NOTE: Asymptotic variance matrix of covariance parameter estimates has been found to be singular and a generalized inverse was used.

Die Überparametrisierung trifft ebenso auf das Randomisationsmodell mit Messfehler zu. Man kann die Messfehlervarianz auf einen beliebigen Wert fixieren, ohne dass sich die log-likelihood oder der s.e.d. ändert. Dies bestätigt die Überparametrisierung. Durch Veränderung des fixierten Wertes für die Messfehlervarianz ändert sich der s.e.m., nicht aber der s.e.d.

Im Randomisationsmodell kann man generell die Überparametrisierung auflösen, indem man eine der Varianzkomponenten auf einen bestimmten Wert fixiert. Will man das Modell im Rahmen gängiger Software für gemischte Modelle nutzen, so ist man zu einer solchen Parameterrestriktion sogar gezwungen, es sei denn man hat eine unabhängige Schätzung der Messfehlervarianz. Ein besonders interessanter Fall ergibt sich, wenn die Blockvarianz $\sigma_B^2 = 0$ gesetzt wird (letzter Fall in Tab.2). In diesem Fall erhält man denselben s.e.m. wie im üblichen (unbedingten) Modell. Argumentiert man also von der Randomisationstheorie her, so muss die

Verwendung des üblichen Modells für die praktische Auswertung genau genommen also im Prinzip durch eine sehr unrealistische Annahme gerechtfertigt werden, nämlich der, dass es keine Blockeffekte in der Neymanschen Definition gibt. Dies ist natürlich etwas überspitzt, zeigt aber das praktische Dilemma. Die eher praxisbezogene Begründung für die Verwendung des üblichen Modells ist, dass dieses für Kontraste dieselben Ergebnisse liefert wie das Randomisationsmodell, ohne dass die Modelle völlig äquivalent wären. In diesem Sinne können die Modelle als praktisch äquivalent betrachtet werden. Dies ist für mich die wesentliche Begründung für die Verwendung des üblichen Modells mit zufälligen Effekten.

Die obigen Befunde haben die wichtige Konsequenz, dass im Randomisationsmodell mit Messfehler der s.e.m. nicht eindeutig geschätzt werden kann. Hierzu wäre eine unabhängige Schätzung der Messfehlervarianz erforderlich. Dies wiederum stellt die Verwendung und Interpretation von Standardfehlern der Mittelwerte grundsätzlich in Frage, egal ob das übliche Modell oder das Randomisationsmodell verwendet wird. Für mich kann die Konsequenz nur lauten, dass der s.e.m. nie wirklich interpretiert wird. Aussagekräftig ist einzig und allein der s.e.d. Nur er ist unabhängig davon, ob ein Randomisationsmodell oder das übliche Modell verwendet wird.

Zu zwei Äquivalenzbeziehungen zwischen Randomisationsmodell mit Messfehler und üblichem Modell

(1) Im vorangegangenen Abschnitt wurde eine hohe Übereinstimmung der Schätzungen verschiedener Modelle an einem simulierten Beispiel gefunden. Im Folgenden wird eine Äquivalenzbeziehung zwischen dem Randomisationsmodell und dem üblichen Modell im Hinblick auf die REML-Schätzung der Parameter näher erläutert, welche die empirischen Übereinstimmungen erklärt. Die Varianz-Kovarianz-Struktur nach Randomisationstheorie mit Messfehler ist

$$V_R = \text{var}(m) = (I_b - K_b) \otimes J_v \sigma_B^2 + I_b \otimes (I_v - K_v) \sigma_U^2 + I_b \otimes I_v \sigma_e^2 .$$

REML schätzt die Varianzkomponenten aus linear unabhängigen Fehlerkontrasten

$$z = L'y ,$$

welche frei von festen Effekten sind. Im Fall des RCBD hat man v feste Effekte und somit $v(b-1)$ Fehlerkontraste für die Varianzkomponentenschätzung. Eine Wahl für die Fehlerkontraste ist

$$L' = H' \otimes I_v ,$$

wobei H' eine $(b-1) \times b$ Matrix mit Helmert-Kontrasten ist, so dass $H'H = I_{b-1}$. Die Varianz-Kovarianz-Struktur der Kontraste $z = L'y$ ist

$$\begin{aligned} V_{R(z)} &= L'V_R L = I_{b-1} \otimes J_v \sigma_B^2 + I_{b-1} \otimes (I_v - K_v) \sigma_U^2 + I_{b-1} \otimes I_v \sigma_e^2 \\ &= I_{b-1} \otimes K_v (v \sigma_B^2 - \sigma_U^2) + I_{b-1} \otimes I_v (\sigma_U^2 + \sigma_e^2) \end{aligned}$$

Die Vermengung der drei Varianzkomponenten ist offensichtlich: nur zwei der drei können unabhängig geschätzt werden. Die Struktur hat dieselbe Compound-Symmetry Form wie im üblichen Modell mit unabhängigen Effekten. Dort haben dieselben Fehlerkontraste folgende

Varianz-Kovarianz-Struktur:

$$V = I_b \otimes J_b \sigma_b^2 + I_b \otimes I_v \sigma_f^2, \text{ so dass}$$

$$V_z = L'VL = I_{b-1} \otimes J_v \sigma_b^2 + I_{b-1} \otimes I_v \sigma_f^2.$$

Es ergeben sich folgende Äquivalenzbeziehungen zwischen dem üblichen Modell und dem Randomisationsmodell mit Messfehlern:

$$\sigma_b^2 \equiv \sigma_B^2 - v^{-1} \sigma_U^2 \text{ und}$$

$$\sigma_f^2 \equiv \sigma_U^2 + \sigma_e^2.$$

Diese Äquivalenzbeziehung wird am Beispiel des Randomisationsmodells mit fixierter Messfehlervarianz erläutert:

$$\hat{\sigma}_B^2 = -0.3270$$

$$\hat{\sigma}_U^2 = -1.7074$$

$$\hat{\sigma}_e^2 = 2$$

$$\sigma_B^2 - v^{-1} \sigma_U^2 = -0.3270 + 1.7074/3 \approx 0.2421 = \hat{\sigma}_b^2$$

$$\hat{\sigma}_U^2 + \hat{\sigma}_e^2 = -1.7074 + 2.000 = 0.2926 = \hat{\sigma}_f^2$$

(2) Die im vorangegangenen Abschnitt angesprochene Reparametrisierungsbedingung

$$\sigma_B^2 = 0$$

hat die Konsequenz dass

$$\begin{aligned} V_R = \text{var}(m) &= (I_b - K_b) \otimes J_v \sigma_B^2 + I_b \otimes (I_v - K_v) \sigma_U^2 + I_b \otimes I_v \sigma_e^2 \\ &= -I_b \otimes K_v \sigma_U^2 + I_b \otimes I_v (\sigma_U^2 + \sigma_e^2). \end{aligned}$$

Dies ist äquivalent zur Varianz-Kovarianz-Struktur im üblichen Modell mit

$$\sigma_b^2 \equiv -v^{-1} \sigma_U^2 \text{ und}$$

$$\sigma_f^2 \equiv \sigma_U^2 + \sigma_e^2,$$

wobei dies eine negative Varianz σ_b^2 impliziert. Auf die Notwendigkeit, als Konsequenz der Randomisationstheorie eine negative Blockvarianz zuzulassen, hat Nelder verschiedentlich hingewiesen (Nelder, 1954).

SAS Anweisungen

```
%let v=3;
%let b=4;
data a;
c=0;
do block=1 to &b;
  bl=0.3*normal(1);
  do trt=1 to &v;
```

```

    c=c+1;
    y=bl+trt+normal(1);if c=13 then y=.;  output;
  end;
end;

/*übliches unbedingtes Modell mit festen Blöcken*/
proc mixed data=a;
class trt block;
model y=trt block;
lsmeans trt/pdiff;
run;

/*übliches unbedingtes Modell mit zufälligen Blöcken*/
proc mixed data=a;
class trt block;
model y=trt/ddfm=kr;
lsmeans trt/pdiff;
random block;
estimate 'trt1' int 4 trt 4 0 0 | block 1 1 1 1/divisor=4;
estimate 'trt2' int 4 trt 0 4 0 | block 1 1 1 1/divisor=4;
estimate 'trt3' int 4 trt 0 0 4 | block 1 1 1 1/divisor=4;
run;

/*übliches Modell, bedingtStruktur Randomisationstheorie Calinski &
Kageyama*/
proc iml;
K_v=j(&v,&v,1/&v);
K_b=j(&b,&b,1/&b);
C0=K_b@K_v;
C1=( I(&b)-K_b/**0.99999**/ )@K_v; /*numerisch so dass nicht singulär, so dass
einfache Inverse geht. REML macht keine g-inverse*/
C2=I(&b)@( I(&v) - K_v);
Cb=/*C0*&v*/+C1*&v;
Ce=/*C0  +*/C1  +C2;
parm=( j(&v*&b,1,1)//j(&v*&b,1,2) );
row=parm;
c=0;
do i=1 to 2;
  cc=0;
  do j=1 to &b;
    do k=1 to &v;
      c=c+1;
      cc=cc+1;
      row[c]=cc;
    end;
  end;
end;

w=Cb//Ce;
create lin1 from w;
append from w;
create lin0 var {parm row};
append;

quit;

data lin;
merge lin0 lin1;
run;

/*bedingtes Modell ohne Messfehler*/
proc mixed data=a;
class trt;
model y=trt/ ddfm=kr;

```

```

repeated/type=lin(2) ldata=lin sub=int;
lsmeans trt/pdiff;
run;

/*bedingtes Modell mit Messfehler*/
proc mixed data=a;
class block trt;
model y=trt/ ddfm=kr;
random block*trt/type=lin(2) ldata=lin sub=int;
lsmeans trt/pdiff;
run;

proc mixed data=a;
class block trt;
model y=trt/ ddfm=kr;
random block*trt/type=lin(2) ldata=lin sub=int;
lsmeans trt/pdiff;
parms (1)(1)(2)/hold=3;
run;

/*Struktur Randomisationstheorie Calinski & Kageyama*/
proc iml;
K_v=j(&v,&v,1/&v);
K_b=j(&b,&b,1/&b);
C0=K_b@K_v;
C1=( I(&b)-K_b*0.99999)@K_v; /*numerisch so dass nicht singulär, so dass
einfache Inverse geht. REML macht keine g-inverse*/
C2=I(&b)@( I(&v) - K_v);
Cb=C1*&v;
Ce=C2;
parm=( j(&v*&b,1,1)//j(&v*&b,1,2) );
row=parm;
c=0;
do i=1 to 2;
cc=0;
do j=1 to &b;
do k=1 to &v;
c=c+1;
cc=cc+1;
row[c]=cc;
end;
end;
end;

w=Cb//Ce;
create lin1 from w;
append from w;
create lin0 var {parm row};
append;

quit;

data linR;
merge lin0 lin1;
run;

/*Randomisationsmodell ohne Messfehler*/
proc mixed data=a;
class trt;
model y=trt/ ddfm=kr;
repeated/type=lin(2) ldata=linR sub=int;
lsmeans trt/pdiff;
run;

```



```

/*Randomisationsmodell mit Messfehler*/
proc mixed data=a;
class block trt;
model y=trt/ ddfm=kr;
random block*trt/type=lin(2) ldata=linR sub=int;
lsmeans trt/pdiff;
run;

proc mixed data=a;
class block trt;
model y=trt/ ddfm=kr;
random block*trt/type=lin(2) ldata=linR sub=int;
lsmeans trt/pdiff;
parms (1)(1)(2)/hold=3;
run;

```

Messfehler im Randomisationsmodell

Die Randomisationstheorie lässt einen parzellenbezogenen Messfehler zu, der unabhängig verteilt ist. Alle anderen Effekte (außer Behandlungen) hängen physisch an den Parzellen bzw. deren "wahren Werten". Es ist vielleicht eine eher philosophische Frage, ob diese wahren Werte beispielsweise die Effekte von verschiedenen Boniteuren umfassen, welche die Parzellen getrennt bonitieren, oder die Effekte von verschiedenen Ernteterminen der einzelnen Blöcke. Diese Messfehlereffekte sind blockbezogen, so dass zufällige "Blockmessfehler" benötigt werden. Diese Messfehler-Struktur entspricht dem üblichen Modell mit

$V = I_b \otimes (vK_v \sigma_b^2 + I_v \sigma_f^2)$. Man kann also daran denken, das Randomisationsmodell mit

$V_R = V_{\bar{m}} = \xi_1 C_1 + \xi_2 C_2$ um die Messfehlerkomponente nach üblichem Modell,

$V = I_b \otimes (vK_v \sigma_b^2 + I_v \sigma_f^2)$, zu erweitern. Damit hat man dann eine Mischung aus

Randomisationsmodell und üblichem Modell. Dieses ist natürlich überparametrisiert. Praktisch wird man auch hier nur das übliche Modell alleine verwenden, was zu identischen Schlüssen bzgl. der Kontraste führt.

Eine weitreichende Äquivalenzbeziehung für auflösbare Blockanlagen

Ein allgemeines zerlegbares Blockdesign (dazu gehören Gitteranlagen und α -Designs) hat nach Randomisationsverteilung das Modell

$$y = X\tau + Z_r\rho + Z_b\beta + \eta + e$$

wobei τ = Behandlungsmittelwerte, ρ = Effekte der vollständigen Wiederholungen, β = Effekte der unvollständigen Blöcke, η = Parzelleneffekte, e = Messfehler. Die ersten beiden Momente sind

$$E(y) = X\tau$$

und

$$\text{Cov}(y) = (Z_r Z_r' - N_A^{-1} J_n) \sigma_A^2 + (Z_b Z_b' - B_H^{-1} Z_r Z_r') \sigma_B^2 + (I_n - K_H^{-1} Z_b Z_b') + I_n \sigma_e^2$$

(Calinski und Kageyama, 2003, p.224-225). Die BLUE bleiben unverändert, wenn das einfachere übliche Modell

$$\text{Cov}(y) = \sigma_1^2 (\gamma_1 Z_r Z_r' + \gamma_2 Z_b Z_b' + I_n) = \sigma_1^2 T$$

verwendet wird (Calinski und Kageyama, 2003, p.258), wobei Z_r und Z_b die Design-Matrizen für vollständige Wiederholungen und Blöcke sind und

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= (\sigma_A^2 - B_H^{-1} \sigma_B^2) / \sigma_1^2 \\ \gamma_2 &= (\sigma_B^2 - K_H^{-1} \sigma_U^2) / \sigma_1^2 \\ \sigma_1^2 &= \sigma_U^2 + \sigma_e^2. \end{aligned}$$

Die Varianz-Kovarianz-Matrix von $\hat{\tau}$ ist

$$\text{Cov}(\hat{\tau}) = \sigma_1^2 (X T^{-1} X)' - N_A^{-1} \sigma_A^2 J_v$$

Die Varianz eines Kontrastes ist

$$\text{Cov}(c' \hat{\tau}) = \sigma_1^2 c' (X T^{-1} X)^{-1} c$$

Dies bedeutet, dass die Varianz eines Kontrastes unverändert geschätzt werden kann, wenn anstelle des Randomisationsmodells das übliche Modell verwendet wird. Dies ist die wesentliche Rechtfertigung durch die Randomisationstheorie für die Nutzung des üblichen Modells. Dagegen kann die Varianz-Kovarianz-Struktur der Mittelwerte im üblichen Modell nicht geschätzt werden, weil dort σ_A^2 nicht auftritt. Im Randomisationsmodell besteht eine Überparametrisierung, die nur aufgelöst werden kann, wenn eine der vier Varianzkomponenten bekannt ist, was in der Regel nicht der Fall ist (siehe auch die Betrachtung des einfacheren analogen Falls einer vollständigen Blockanlage im vorangegangenen Abschnitt). Dies impliziert, dass nur Kontraste und deren Varianzen schätzbar sind. Die Varianz eines Mittelwertes ist nicht schätzbar, es sei denn es liegen unabhängige Schätzwerte mindestens einer der Varianzkomponenten vor.

Literatur

- Calinski T, Kageyama S 2003 Block designs: A randomization approach
 John, J. A., E. R. Williams, 1995: Cyclic and computer generated designs. 2nd edition. Chapman and Hall, London.
 Hinkelmann K, Kempthorne O 1994 Design and analysis of experiments. Wiley, New York.
 Möhring J, Büchse A, Piepho HP 2006 On weighting in two-stage analyses of series of experiments (in preparation)
 Nelder, J. A., 1954: The interpretation of negative components of variance. *Biometrika* 41, 544-548.
 Nelder, J. A., 1965: The analysis of randomized experiments with orthogonal block structure. I. Block structure and the null analysis of variance. II. Treatment structure and the general analysis of variance. *Proceedings of the Royal Society of London A* **283**, 147-178.
 Samuels ML, Casella G, McCabe GP 1991 Interpreting blocks as random factors. *JASA* 86, 798-821.
 Scheffé H 1959 The analysis of variance. Wiley, New York.

Smith A, Cullis B, Gilmour A 2001b The analysis of crop variety evaluation data in Australia. Australian and New Zealand Journal of Statistics 43, 129-145.

Anhang zu Calinki und Kageyama (2003)

Block und Parzelleneffekte in der vollständigen Blockanlage werden auf Basis der Identität

$$m_{ij} = \bar{m}_{..} + (\bar{m}_{.j} - \bar{m}_{..}) + (m_{ij} - \bar{m}_{.j})$$

definiert. Block und Parzelleneffekte werden bei Calinski und Kageyama (2003, p.13-14) wie folgt definiert:

$$\beta_j = (\bar{m}_{.j} - \bar{m}_{..}) \quad (\text{Blockeffekt})$$

$$\eta_{ij} = (m_{ij} - \bar{m}_{.j}) \quad (\text{Parzelleneffekt})$$

Somit lautet die Identität

$$m_{ij} = \bar{m}_{..} + \beta_j + \eta_{ij}$$

Diese Definition der Effekte, die sich mit denen von Scheffe (1959) deckt, impliziert folgende Summenrestriktionen:

$$\sum_{j=1}^b \beta_j = 0$$

$$\sum_{i=1}^v \eta_{ij} = 0 \quad \text{für jedes } j$$

Ich glaube, dass diese Summenrestriktionen eine wesentliche Quelle von Verwirrung sind. Sie verstellen den Blick darauf, dass das Randomisationsmodell und das üblicherweise verwendete einfache Modell sehr ähnlich bzw. weitgehend äquivalent sind. Ich verwende die folgenden Varianzkomponentendefinitionen von Calinski und Kageyama (2003, p.14):

$$\sigma_B^2 = (b-1)^{-1} \sum_{j=1}^b \beta_j^2$$

$$\sigma_U^2 = b^{-1}(v-1)^{-1} \sum_{j=1}^b \sum_{i=1}^v \eta_{ij}^2$$

Ganz wesentlich für die Randomisationstheorie von Calinski und Kageyama (2003) ist, dass die Effekte β_j und η_{ij} selbst keine Zufallsvariablen sind sondern die Kronecker-Variablen f und g , welche die zufällige Zuordnung der Behandlungen zu den Parzellen abbilden. Meine Schreibweise ist etwas vereinfacht, weil hier die eigentlichen Zufallsvariablen, nämlich die Kronecker-Variablen f und g , unterdrückt werden. Die exaktere Schreibweise ist bei Calinski und Kageyama (2003) nachzulesen.

Die Randomisationstheorie führt nun zu folgender Varianz-Kovarianz-Struktur für die Effekte:

$$\text{Cov}(\beta_j, \beta_{j'}) = \begin{cases} b^{-1}(b-1)\sigma_B^2 & \text{für } j = j' \\ -b^{-1}\sigma_B^2 & \text{für } j \neq j' \end{cases}$$

$$\text{Cov}(\eta_{ij}, \eta_{i'j'}) = \begin{cases} v^{-1}(v-1)\sigma_U^2 & \text{für } j = j' \text{ und } i = i' \\ -v^{-1}\sigma_U^2 & \text{für } j = j' \text{ und } i \neq i' \\ 0 & \text{für } j \neq j' \end{cases}$$

Die Kovarianzen sind hier Folge der Summenrestriktionen $\sum_{j=1}^b \beta_j = 0$ und $\sum_{i=1}^v \eta_{ij} = 0$.