

作物品种区域试验中品种均值估计的模型和方法 ——算术平均值、加权最小二乘估值和 BLUP 的比较

张群远¹ 孔繁玲^{1,*} 杨付新²

(¹中国农业大学植物遗传育种系,北京 100094; ²中国农业科学院棉花研究所,河南安阳 455112)

摘要 针对作物区域试验中的品种均值估计问题,根据混合线性模型的一般原理,总结和提出多种加权最小二乘估计(WLSE)和最佳线性无偏预测(BLUP)的方法,推导了这些方法的平衡数据计算简式;同时,利用 14 套 2 年多点的棉花区试资料 and 一套 4 年多点的棉花品种试验对这些方法的预测效果进行验证比较。结果表明,与算术平均值相比,以环境内误差方差倒数加权的 WLSE 估值的预测精度(包括预测差的大小和品种排名的一致性)明显不同,但其高低因数据而异;其他 WLSE 估值以及 BLUP 的预测结果差别不大,和算术平均值以及相互间的相关系数和秩相关系数均在 0.93 以上。*

关键词 区域试验;算术平均值;加权最小二乘估计;BLUP

中图分类号: O212 文献标识码: A

Models and Methods for Estimating Variety Means in Regional Crop Trials ——Comparisons of Arithmetic Mean, Weighted Least Squares Estimates and BLUPs

ZHANG Qun-Yuan¹ KONG Fan-Ling¹ YANG Fu-Xin²

(¹ Department of Plant Genetics and Breeding, China Agricultural University, Beijing 100094; ² Institute of Cotton, Chinese Academy of Agricultural Science, Anyang, Henan 455112, China)

Abstract Based on the mixed linear model, several weighted least squares estimates (WLSEs) and best linear unbiased predictors (BLUPs) were summarized and proposed for estimating variety means in regional crop trials, and the corresponding calculating formulae were derived and presented for balanced data. The data of 14 rounds of 2-year-multi-location regional cotton trials and a 4-year-multi-location cotton trial were used to compare the predictive efficiencies of arithmetic means, WLSEs and BLUPs. The results showed that the predictive differences and variety ranks of the WLSE weighted by the reciprocals of error variances within environments (WLSEe) differed significantly from that of the arithmetic means, but the predictive accuracy of WLSEe increased or decreased irregularly in different trials; the predictive results of other WLSEs and BLUPs were similar to that of the arithmetic means, the correlation coefficients and rank correlation coefficients between them were all above 0.93.

Key words Regional trial; Arithmetic mean; Weighted least squares estimate; BLUP; Prediction

作物品种区域试验(简称区试)中,品种×环境组合均值(即某品种在某参试环境中的性状均值)和品种均值(即某品种在所有参试环境中的性状均值)是两种最基本的统计数,是分析和评价品种的主要依据。通常,它们都由算术平均的方法获得,但算术平均值不一定是精确的估值^[1,2]。张群远等曾利

用我国区试数据,对品种×环境组合均值的几种主要估计方法作过比较^[2],本文则专门探讨区试中品种均值估计的模型和方法问题,并利用我国区试数据和专设的多年多点试验数据对各种方法的精度作比较,旨在为区试中品种均值估计方法的选择或改进作探索。

*基金项目:国家自然科学基金资助项目(30070433)。

作者简介:张群远(1970-),男,云南宣威人,博士,副教授,研究方向:生物统计学和统计遗传学。*通讯作者:孔繁玲,女,教授,博士生导师, Tel: 62893397。

Received (收稿日期): 2002-09-05, Accepted (接受日期): 2002-11-12.

1 材料与方法

1.1 品种均值估计的模型和方法

作物品种区试是在多环境中实施同一套试验方案,其品种均值的估计属于多套试验的合并分析问题。以往的研究或应用中,除算术平均外,品种均值估计的其他一些方法基本上是基于加权平均的思想,所采用的“权”有误差方差倒数、环境内剩余方差倒数、环境内遗传力、与参照环境的距离的倒数等^[3~5]。这些加权方法是经验性的,缺乏完整的统计学依据,为此,本文利用混合线性模型的理论来统一阐述品种均值估计方法。

区试中第 i 个品种在第 j 个环境中的第 k 次重复观测值的线性模型可写为:

$$Y_{ijk} = \mu + g_i + e_j + \epsilon_{ij} + \epsilon_{ijk} \quad (1)$$

μ 为观测值的总体均值; g_i 为第 i 个品种的效应; e_j 为第 j 个环境的效应; ϵ_{ij} 为第 i 个品种与第 j 个环境的基因型 \times 环境 (GE) 互作效应; ϵ_{ijk} 为第 i 个品种在第 j 个环境中的第 k 次重复观测值的误差。上式也可表达为更为一般的混合线性模型^[6,7]的矩阵形式:

$$Y = Xb + Zu + I \quad (2)$$

Y 为观测值向量; b 为固定效应向量; X 为固定效应的系数矩阵; u 为随机效应向量,通常假设其均值为 0,具有方差协差阵 G ; Z 为随机效应的系数矩

阵; u 为误差向量,通常假设其均值为 0,具有方差协差阵 R ; I 为单位矩阵。通过广义最小二乘方程组和混合模型方程组可获得固定效应 b 的最佳线性无偏估计 (best linear unbiased estimate, BLUE) 以及随机效应 u 的最佳线性无偏预测值 (best linear unbiased prediction BLUP)^[6~8]。

估计品种均值,就是要估计 (1) 式中的总均值 μ 与品种效应 g_i 之和。 μ 通常为固定效应,包含在 (2) 式的 b 中; g_i 若为固定效应,也包含在 b 中,若为随机效应,则包含在 u 中,所以品种均值的估计受方差协差阵 G 和 R 的影响。 G 和 R 的构成是由不同效应的固定或随机以及误差方差的同质或异质的假设来决定的,不同假设下 G 和 R 的组成不同,由此也就产生了品种均值的不同估计方法。品种效应固定假设下得到的品种均值为 BLUE; 品种效应随机假设下得到的品种均值为 BLUP。

考虑到计算和应用的方便,本文附录中对 v 个品种、 s 个环境的平衡数据,以 r 次重复均值为基础,推导了混合模型的几种主要假设下品种均值的计算简式。将附录中各公式的误差方差 (σ^2 和 $\sigma_{e(j)}^2$) 替换成单个观测值的误差方差除以重复数 r 的形式 (σ^2/r 和 $\sigma_{e(j)}^2/r$), 即可得到品种均值的各种估算公式,列于表 1。表中 μ 均为固定效应,误差均为随机效应; $\sigma_{e(j)}^2$ 表示环境 j 内的误差方差; 误差同质 (或异质) 指各环境中的试验误差方差同质 (或异质); 剩

表 1 混合线性模型几种主要假设下品种均值估计的名称及平衡数据计算简式

Table 1 Calculating formulae for balanced data under several main assumptions of mixed linear model

模型假设 Effects assumptions in model	估值类型 Types of estimates	品种 i 的均值计算式 Calculating formulae for the i th variety mean
品种和环境固定,误差同质 Varieties and environments fixed errors homologous	最小二乘估计 (算术平均) LSE (arithmetic mean)	$\frac{1}{s} \sum_{j=1}^s \bar{Y}_{ij}$
品种和环境固定,误差异质 Varieties and environments fixed errors heterologous	加权最小二乘估计 WLSE _e	$\frac{\sum_{j=1}^s \bar{Y}_{ij} / \sigma_{e(j)}^2 / r}{\sum_{j=1}^s 1 / \sigma_{e(j)}^2 / r}$
品种和环境固定,剩余方差异质 Varieties and environments fixed residual variances heterologous	加权最小二乘估计 WLSE _R	$\frac{\sum_{j=1}^s \bar{Y}_{ij} / \sigma_{R(j)}^2}{\sum_{j=1}^s 1 / \sigma_{R(j)}^2}$
品种固定,环境随机,误差异质 Varieties fixed, environments random errors heterologous	加权最小二乘估计 WLSE _E	$\frac{\sum_{j=1}^s \bar{Y}_{ij} / (\sigma_E^2 + \sigma_{GE}^2 + \sigma_{e(j)}^2 / r)}{\sum_{j=1}^s 1 / (\sigma_E^2 + \sigma_{GE}^2 + \sigma_{e(j)}^2 / r)}$
品种固定,环境随机,剩余方差异质 Varieties fixed, environments random residual variances heterologous	加权最小二乘估计 WLSE _{ER}	$\frac{\sum_{j=1}^s \bar{Y}_{ij} / (\sigma_E^2 + \sigma_{R(j)}^2)}{\sum_{j=1}^s 1 / (\sigma_E^2 + \sigma_{R(j)}^2)}$
品种随机,环境固定,误差同质 Varieties random, environments fixed errors homologous	最佳线性无偏预测 BLUP ₀	$\bar{Y} + \frac{\sigma_G^2}{\sigma_G^2 + \sigma_E^2 / s + \sigma_{e(j)}^2 / sr} (\bar{Y}_i - \bar{Y})$
品种和环境随机,误差同质 Varieties and environments random errors homologous	最佳线性无偏预测 BLUP ₁	$\bar{Y} + \frac{\sigma_G^2}{\sigma_G^2 + \sigma_E^2 / s + \sigma_{GE}^2 / s + \sigma_{e(j)}^2 / sr} (\bar{Y}_i - \bar{Y})$

余方差指环境内互作和误差的混合方差; $\sigma_{R(j)}^2$ 为环境 j 内的 GE 互作和误差的混合方差; σ_G^2 、 σ_E^2 、 σ_{GE}^2 和 σ_e^2 分别指基因型、环境、GE 互作以及误差的方差; s 和 r 分别指环境数和环境内重复数,其余符号含义见附录。

从表 1 可看出,品种效应固定时的某品种均值的估计,都是加权平均值,而“权”就是对应模型假定下品种 i 在环境 j 中的算术平均值 \bar{Y}_{ij} 自身方差的倒数,这意味着某环境中各个 \bar{Y}_{ij} 自身的变异越小,其值对品种均值的贡献越大。品种效应随机时的品种均值的 BLUP 值,则是一种“收缩”的预测值,相当于用对应模型假定下品种均值的重复力对品种效应进行“收缩”。若品种均值的重复力越小,对试验中的品种表型效应估值(即 $\bar{Y}_i - \bar{Y}$)就越持“谨慎”态度,也就是根据表型值对品种进行选择后获得的期望的遗传进展越小,这与我们的实际经验是吻合的。从这一个角度看,尽管品种随机的假设与我们区试中

的习惯做法(即品种固定)不太一致,但也有其合理性。

1.2 数据来源和试验方案

为比较表 1 中各种估值的统计精度,采用两类数据进行分析。一类是我国区试历史数据,即长江流域春棉 1990~1997 年,黄河流域春棉 1986~1996 年以及黄河流域夏棉 1986~1993 年每 2 年为 1 轮的区试资料(简称为区试数据);另外,考虑到以上区试的年份数只有 2 年,对于进行较长年份的预测效果分析来说有一定局限,还采用了一套专设的 4 年多点的品种试验数据(简称专设试验数据)。该试验选择建国以来黄河流域具有代表性的 10 个棉花品种,连续进行了 4 年的 4~6 个地点的试验(表 2),各点次均采用随机完全区组设计,3~4 次重复,3 行区,小区面积 20 m²,种植管理和性状考察按国家区试标准进行。以上两类资料均采用皮棉产量,单位为 kg/hm²。

表 2 4 年多地点棉花品种验证试验的设置

Table 2 Information of the 4-year multi-location cotton trial for validation

年份 Years	参试点 Experimental locations	重复数 Replication numbers	参试品种 Experimental cultivars
1996	沧州 安阳 西华 临清	4	岱 15, 徐州 1818, 徐州 142, 鲁棉 1 号, 鲁棉 6 号, 冀棉 8 号, 中棉所 12 号(种质库原种), 中棉所 12 号 CK(目前生产用种), 中棉所 19 号, 石远 321
1997	沧州 安阳 西华 临清 菏泽	3	
1998	沧州 安阳 西华 临清 菏泽 运城	3	
1999	沧州 安阳 西华 临清 菏泽 运城	3	

1.3 估值精度的比较方法

根据各轮历史区试中第 1 年的数据计算出各品种对应于表 1 中的 7 种估值,以之作为各品种未来表现的 7 种预测值;然后,计算各品种在第 2 年试验中的算术平均值,作为验证值。专设试验则依次根据 4 年中的每一年计算出品种估值(即预测值),把其他 3 年的各品种算术平均值作为验证值。计算各种估计方法所得预测值与验证值之间差值的绝对值(称为预测差)以及该差值占验证值的百分比(称为相对预测差),并对每轮验证中所有品种的预测差求平均;同时计算各种估值以及验证值之间的相关系数和秩相关系数。计算结果列于表 3~表 5。

以上计算中,需要估计表 1 公式中的各种方差组分,其中 σ_G^2 、 σ_E^2 、 σ_{GE}^2 和 σ_e^2 通过一年多点的方差分

析获得; $\sigma_{e(j)}^2$ 则通过第 j 个地点的单一点次的方差分析获得(即误差项均方 MS_e); 剩余方差 $\sigma_{R(j)}^2$ 的计算采用 Shukla(1972)的方法^[4]。

2 结果与分析

从表 3 中各种估值各轮验证的预测差来看,在 18 轮验证中,加权最小二乘估值(WLSE)的预测差小于 LSE 估值(即算术平均值)的有 16 轮,但其中 $WLSE_E$ 和 $WLSE_{ER}$ 与 LSE 的差别不大, $WLSE_R$ 和 $WLSE_e$ 则分别有 3 轮和 7 轮的预测差明显小于 LSE。预测精度的提高较为明显的(即预测差明显小于 LSE 的),大多数是 $WLSE_e$ 估值。比如用验证试验中 1996 年的 $WLSE_e$ 估值对 1997~1998 三年的

表 3 几种品种均值估计方法的绝对预测差和相对预测差

Table 3 Absolute and relative predictive differences (PDs) for variety mean in different estimating methods

试验类型 Trial types	年份* Years*	绝对预测差(上)和相对预测差(%) (下) Absolute PDs(above) and relative PDs(%) (below)						
		LSE	WLSE _c	WLSE _R	WLSE _E	WLSE _{ER}	BLUPO	BLUPI
长江春棉区试 Spring cotton trials in the Changjiang River region	1990(1991)	112.91	50.15	42.38	111.76	97.74	112.91	112.91
		9.70	4.31	3.64	9.60	8.40	9.70	9.70
	1992(1993)	204.08	60.46	181.87	203.47	199.13	204.08	204.08
		19.12	5.66	17.04	19.06	18.66	19.12	19.12
	1994(1995)	134.53	30.28	342.83	132.21	129.77	134.53	134.53
		10.78	2.43	27.47	10.59	10.40	10.78	10.78
	1996(1997)	147.72	385.18	130.78	149.41	150.68	147.72	147.72
10.60		27.64	9.39	10.72	10.81	10.60	10.60	
平均 Average	149.54	164.60	168.77	149.24	145.16	149.54	149.54	
		12.05	13.26	13.60	12.03	11.70	12.05	12.05
黄河春棉区试 Spring cotton trials in Yellow River region	1985(1986)	298.81	380.30	312.10	301.11	309.44	298.81	298.81
		27.01	34.38	28.21	27.22	27.97	27.01	27.01
	1987(1988)	525.49	518.42	535.91	526.37	524.88	525.49	525.49
		77.89	76.84	79.44	78.02	77.80	77.89	77.89
	1989(1990)	125.09	43.82	83.20	120.11	121.61	125.09	125.09
		14.06	4.93	9.35	13.50	13.67	14.06	14.06
	1991(1992)	498.88	348.69	515.63	499.01	498.44	498.88	498.88
		102.60	71.72	106.05	102.63	102.51	102.60	102.60
	1993(1994)	152.85	185.70	244.83	153.83	163.31	152.85	155.08
		18.91	22.97	30.28	19.03	20.20	18.91	19.18
1995(1996)	68.59	206.07	99.49	68.62	79.56	69.01	72.30	
	8.38	25.17	12.15	8.38	9.72	8.43	8.83	
平均 Average	271.58	277.12	293.47	271.50	276.42	271.66	272.65	
		34.04	34.73	36.78	34.03	34.64	34.05	34.17
黄河夏棉区试 Summer cotton trials in Yellow River region	1986(1987)	59.35	127.42	49.44	59.99	55.82	65.12	82.48
		6.90	14.82	5.75	6.98	6.49	7.57	9.59
	1988(1989)	83.39	61.09	96.48	82.58	90.83	83.39	83.39
		13.12	9.61	15.17	12.99	14.29	13.12	13.12
	1990(1991)	84.94	95.55	129.56	84.99	85.10	84.94	84.94
		10.55	11.87	16.10	10.56	10.57	10.55	10.55
	1992(1993)	135.74	202.88	52.46	136.03	138.33	135.74	135.74
21.47		32.09	8.30	21.51	21.88	21.47	21.47	
平均 Average	91.41	116.34	88.45	91.39	93.44	92.46	95.62	
		12.53	15.95	12.12	12.53	12.81	12.67	13.11
验证试验 Validation trial	1996(97,98,99)	113.03	60.92	104.65	110.70	104.22	119.47	151.27
		12.77	6.89	11.83	12.51	11.78	13.50	17.10
	1997(96,98,99)	215.60	278.41	204.36	217.35	214.76	215.60	215.60
		22.66	29.26	21.48	22.84	22.57	22.66	22.66
	1998(96,97,99)	199.52	570.25	194.20	201.25	201.44	199.52	199.52
		18.94	54.14	18.44	19.11	19.13	18.94	18.94
	1999(96,97,98)	56.90	208.04	142.05	55.20	52.51	60.11	95.29
5.77		21.09	14.40	5.60	5.32	6.09	9.66	
平均 Average	146.26	279.41	161.32	146.13	143.23	148.68	165.42	
		15.09	28.83	16.65	15.08	14.78	15.34	17.07
总平均 Total average		184.30	232.43	199.66	184.17	184.77	185.21	191.05
		20.19	25.46	21.87	20.17	20.24	20.29	20.93

注: *用括号外年份的数据估算各种品种均值,对括号内年份的品种试验均值进行预测(表4同)。

Notes: *The data of the years out of brackets were used to estimate variety means to predict variety experimental means in the years in brackets (table 4 is the same).

平均结果进行预测,其预测差平均为 60.92 kg/hm^2 , 相当于验证均值 884 kg/hm^2 的 6.89% , 而算术平均值的预测差平均为 113.03 kg/hm^2 , 相当于验证均值的 12.77% 。就这一轮验证来看, $WLSE_c$ 估值的预测精度高出算术平均值近 1 倍。不过, 预测差明显大于 LSE 的, 多数也发生在 $WLSE_c$ 估值上。这说明 $WLSE_c$ 估值的预测精度比 LSE 提高或降低的状况不很稳定。正因为如此, 从所有轮的总平均来看, $WLSE_c$ 估值的预测差依然大于 LSE。 $WLSE_R$ 也基本类似, 但相对而言, 预测精度明显提高和降低的情况较少。 $WLSE_E$ 和 $WLSE_{ER}$ 则基本上没有预测精度明显比 LSE 提高或降低的情况。至于 BLUP 预测值(包括 BLUP0 和 BLUP1), 在大多轮的验证中都和 LSE 具有相同的平均预测差, 少数轮有变化, 但变化都不大。另外, 各种估值(包括目前常用的算术平均值)的相对预测差平均都在 20% 以上, 这从一个侧面说明, 仅根据一年的区试结果对品种表现作出估计, 准确性不高。

预测差只是预测效果的一个方面, 对于区试, 还要求预测值的品种排名与后续年份中的表现一致, 这对于品种比较和选择来说更为重要。为此, 表 4 计算列出了各种估值和验证值的秩相关系数。从表中可看出, 秩相关系数比 LSE 有明显提高和降低的, 多数还是 $WLSE_c$ 和 $WLSE_R$ 两种估值, 而且依然是 $WLSE_c$ 的波动大于 $WLSE_R$ 的, 这一点和预测差的情况相似; 但是, 预测差小的情况下, 秩相关系数不一定高, 所有 18 轮的预测差和秩相关系数的相关系数平均只有 -0.005 , 说明二者之间没有明显相关。不过, 验证试验中用 1996 年的 $WLSE_c$ 估值对 1997~1998 三年的平均结果进行预测时, 与 LSE 相比, 其预测差从 12.77% 减小到 6.89% 的同时, 预测值与验证值的秩相关系数也从 0.830 提高到 0.976 。各种估值与验证值的秩相关系数平均为 $0.811 \sim 0.824$, 决定系数为 $0.66 \sim 0.68$, 说明 1 年的区试尚不能很好地反映品种在后续年份表现的相对优劣。

表 4 几种品种均值估值与验证值的秩相关系数

Table 4 Rank correlation coefficients between several variety mean estimates and validation data

试验类型 Trials	年份 Years	各种估值与验证值之间的秩相关系数 Rank correlation coefficients between estimates and validation data						
		LSE	$WLSE_c$	$WLSE_R$	$WLSE_E$	$WLSE_{ER}$	BLUP0	BLUP1
		长江春棉	1990(1991)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	1992(1993)	0.900	0.900	0.600	0.900	0.800	0.900	0.900
	1994(1995)	0.700	0.700	0.800	0.900	0.900	0.700	0.700
	1996(1997)	0.571	0.690	0.524	0.571	0.571	0.571	0.571
长江春棉(总)		0.737	0.797	0.690	0.761	0.749	0.737	0.737
黄河春棉	1985(1986)	0.738	0.643	0.738	0.738	0.738	0.738	0.738
	1987(1988)	0.476	0.571	0.595	0.476	0.476	0.476	0.476
	1989(1990)	0.905	0.786	0.833	0.905	0.905	0.905	0.905
	1991(1992)	0.786	0.524	0.786	0.786	0.786	0.786	0.786
	1993(1994)	0.400	0.717	0.500	0.400	0.400	0.400	0.400
	1995(1996)	0.983	0.783	0.950	0.983	0.967	0.983	0.983
黄河春棉(总)		0.715	0.684	0.735	0.715	0.711	0.715	0.715
黄河夏棉	1986(1987)	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
	1988(1989)	0.943	0.886	0.829	0.943	0.943	0.943	0.943
	1990(1991)	0.929	0.786	0.929	0.929	0.857	0.929	0.929
	1992(1993)	0.500	0.500	0.300	0.500	0.500	0.500	0.500
黄河夏棉(总)		0.881	0.806	0.821	0.881	0.851	0.881	0.881
验证试验	1996(97,98,99)	0.830	0.976	0.964	0.879	0.939	0.830	0.830
	1997(96,98,99)	0.915	0.939	0.915	0.915	0.915	0.915	0.915
	1998(96,97,99)	0.806	0.733	0.782	0.806	0.794	0.806	0.806
	1999(96,97,98)	0.903	0.855	0.830	0.903	0.903	0.903	0.903
验证试验(总)		0.864	0.876	0.873	0.876	0.888	0.864	0.864
	总计	0.817	0.811	0.818	0.824	0.824	0.817	0.817

表 5 几种品种均值估值之间的相关系数(上)和秩相关系数(下)

Table 5 Correlation coefficients(above) and rank correlation coefficients(below) between several variety mean estimates

	LSE	WLSE _c	WLSE _R	WLSE _E	WLSE _{ER}	BLUP0
WLSE _c	0.843					
	0.868					
WLSE _R	0.948	0.806				
	0.957	0.890				
WLSE _E	0.999	0.845	0.949			
	0.998	0.873	0.962			
WLSE _{ER}	0.999	0.838	0.953	0.999		
	0.990	0.875	0.968	0.993		
BLUP0	0.999	0.840	0.948	0.999	0.998	
	1.000	0.868	0.957	0.998	0.990	
BLUP1	0.982	0.823	0.932	0.981	0.981	0.989
	1.000	0.868	0.957	0.998	0.990	1.000

另外,各种估值之间的相关系数和秩相关系数(见表 5)都较大,除 WLSE_c 以外,各种估值间的两种相关系数均在 0.93 以上,其中 LSE、BLUP 和 BLUP1 间的秩相关系数为 1,这是因为 BLUP 只是对品种效应进行收缩,但不改变其相对大小顺序的缘故。WLSE_c 和其他各种估值的相关较低一点,两种相关系数均在 0.806~0.890 之间。

3 讨论

综合以上分析可以看出,与算术平均值(即 LSE 估计)相比,BLUP 对品种均值的预测效果基本上没有变化;WLSE 类估计中,主要是 WLSE_c 的预测效果和 LSE 不一致。这意味着,除 WLSE_c 以外的其他几种方法不易获得预测效果明显优于算术平均值的估计。不过,WLSE_c 的预测效果是否优于算术平均值,也难以一概而论。

本研究从混合线性模型的角度总结出了一系列区试品种均值的估计方法。尽管在实际数据的验证中没有发现哪种方法绝对的优于算术平均值,但至少表明,对某些轮的数据而言,确实存在着比算术平均值更“好”的估值,而 WLSE_c 是最有“希望”的一种。WLSE_c 利用各试点试验误差的倒数进行加权计算,这意味着,若某试点的试验误差越大,其数值对品种总均值的贡献就越小,我们对该试点试验结果的“相信程度”就越低,这与我们的一般直觉也是吻合的,可以解释为什么 WLSE_c 估值有时比算术平均值具有更好的预测效果。然而,另一方面,对于一些轮的数据来说,WLSE_c 预测效果与算术平均值的相差不大或者反而明显比算术平均值差,这意味着,WLSE_c 估值预测效果的好坏,可能与不同的数据“特

点”有关。由此看来,以后需进一步研究的问题,似乎不应该是“哪种估值更好?”,而应该是“哪种估值更适合于哪种数据?”。至于数据的特点,包括各项变异(尤其误差)的大小,异常值的多少,误差的同质性、独立性和正态性等许多方面,需要借助更多的数据资料(包括更多年份的连续试验资料和数学模拟数据)来研究。

本文的研究是基于平衡数据的,因为目前我国区试中大部分数据是平衡的,而且,从实际应用的角度出发,平衡数据便于计算。对于非平衡数据,计算量较大,有待进一步探讨。

附录 区试平衡数据的各种品种均值估计方法的公式推导

将区试观测值模型写成品种 i 在环境 j 中的 r 次重复均值 \bar{Y}_{ij} 的形式:

$$\bar{Y}_{ij} = \mu + g_i + e_j + \gamma_{ij} + \delta_{ij} \quad (\text{附 } 1)$$

δ_{ij} 为 r 次重复均值对应的误差,其余符号含义与正文中(1)式相同。采用 Searle 等表示法^[7],上式可表示为:

$$Y = (1_v \otimes 1_s) \mu + (I_v \otimes 1_s) g + (1_v \otimes I_s) e + (I_v \otimes I_s) \gamma + (I_v \otimes I_s) \delta \quad (\text{附 } 2)$$

Y 为 \bar{Y}_{ij} 构成的观测值向量, g 、 e 、 γ 、 δ 分别为 g_i 、 e_j 、 γ_{ij} 、 δ_{ij} 效应构成的向量, v 为品种数, s 为环境数。以 1_n 表示 n 个元素均为 1 的向量;以 I_n 表示对角线元素为 1,其余元素为 0 的 $n \times n$ 的单位矩阵;以 J_n 表示所有元素均为 1 的 $n \times n$ 的矩阵;以 $A \otimes B$ 表示矩阵 A 中的每一个非 0 元素均扩展为该元素与矩阵 B 的乘积矩阵,其余元素则以 0 填充。

1 品种效应固定时品种均值的最佳线性无偏估计(BLUE)

把(附2)式中 g 的每个元素加上 μ , 即得到品种均值向量 μ_g , (附2)式可改写为:

$$Y = (I_v \otimes I_s) \mu_g + (I_v \otimes I_s) e + (I_v \otimes I_s) + (I_v \otimes I_s) \quad (\text{附3})$$

μ_g 即为品种均值 $\mu_{g(i)} = \mu + g_i$ 构成的向量。由于 $\mu_{g(i)}$ 为固定效应, 由广义最小二乘方程组^[7]可获得 μ_g 的估计:

$$\hat{\mu}_g = [(I_v \otimes I_s) V^{-1} (I_v \otimes I_s)]^{-1} (I_v \otimes I_s) V^{-1} Y \quad (\text{附4})$$

在此, 假定品种效应是相互独立的, 所以不同品种的观测值可以独立进行矩阵运算。记与品种 i 有关的观测值向量为 $Y_{(i)}$, 对应 V 中的分块矩阵为 $V_{(i)}$, 则根据(附4)式可得到品种 i 的均值的估计式为:

$$\hat{\mu}_{g(i)} = \frac{(1_s) (V_{(i)})^{-1} Y_{(i)}}{(1_s) (V_{(i)})^{-1} 1_s} \quad (\text{附5})$$

(A) 若 e_j 固定, 环境 j 中的误差方差为 σ_j^2 此时, $V_{(i)} = I_s \sigma_j^2$, 则:

$$\begin{aligned} \hat{\mu}_{g(i)} &= \frac{(1_s) (I_s \sigma_j^2)^{-1} Y_{(i)}}{(1_s) (I_s \sigma_j^2)^{-1} 1_s} \\ &= \frac{\sum_{j=1}^s \bar{Y}_{ij}}{\sum_{j=1}^s \frac{1}{\sigma_j^2}} \end{aligned} \quad (\text{附6})$$

此估值为加权最小二乘估值 (weighted least squares estimate, WLSE), 即以环境内误差方差倒数加权的品种平均值, 记为 $WLSE_e$ 。

若各环境中的误差方差同质, 即 $\sigma_j^2 = \sigma^2$, 则(附6)式可简化为:

$$\hat{\mu}_{g(i)} = \frac{1}{s} \sum_{j=1}^s \bar{Y}_{ij} = \bar{Y}_i \quad (\text{附7})$$

此即为算术平均值, 其实质是非加权的最小二乘估值 (least squares estimate), 记为 LSE。

(B) 若 e_j 固定, GE 互作和误差均看作主效以外的随机剩余效应, 环境 j 中的剩余方差记为 $\sigma_{R(j)}^2$

此时, $V_{(i)} = I_s \sigma_{R(j)}^2$, 把(附6)式中的 σ_j^2 替换为 $\sigma_{R(j)}^2$ 可得到:

$$\hat{\mu}_{g(i)} = \frac{\sum_{j=1}^s \bar{Y}_{ij}}{\sum_{j=1}^s \frac{1}{\sigma_{R(j)}^2}} \quad (\text{附8})$$

此即为以环境内剩余方差倒数加权的品种平均值, 记为 $WLSE_R$, 若 $\sigma_{R(j)}^2$ 同质, 则相当于算术平均。

(C) 若 e_j 随机, 各环境中的误差方差为 σ_j^2

此时, $V_{(i)}$ 的构成中还包括环境方差 σ_E^2 以及 GE 互作方差 σ_{GE}^2 , 即 $V_{(i)} = I_s (\sigma_E^2 + \sigma_{GE}^2 + \sigma_j^2)$, 与(附6)式同理

$$\hat{\mu}_{g(i)} = \frac{\sum_{j=1}^s \frac{\bar{Y}_{ij}}{\sigma_E^2 + \sigma_{GE}^2 + \sigma_j^2}}{\sum_{j=1}^s \frac{1}{\sigma_E^2 + \sigma_{GE}^2 + \sigma_j^2}} \quad (\text{附9})$$

此估值也是一种加权最小二乘估计, 记为 $WLSE_E$ 。若 σ_j^2 同质, 上式即为算术平均。

(D) 若 e_j 随机, 其余同(B)

此时, (B) 的 $V_{(i)}$ 中还将包括环境方差 σ_E^2 , 即 $V_{(i)} = I_s (\sigma_E^2 + \sigma_{R(j)}^2)$, 所以

$$\hat{\mu}_{g(i)} = \frac{\sum_{j=1}^s \frac{\bar{Y}_{ij}}{\sigma_E^2 + \sigma_{R(j)}^2}}{\sum_{j=1}^s \frac{1}{\sigma_E^2 + \sigma_{R(j)}^2}} \quad (\text{附10})$$

此估值也是加权最小二乘估计, 记为 $WLSE_{ER}$ 。若 $\sigma_{R(j)}^2$ 同质, 则相当于算术平均。

2 品种效应随机时品种均值的最佳线性无偏预测(BLUP)

若品种效应 g_i 随机, 则需求出 $\mu_i = \mu + g_i$ 的 BLUP 预测值来估计品种均值。若直接根据混合线性模型方程组来推导平衡数据下计算 $\mu + g_i$ 的 BLUP 的简式比较困难, 在此利用一等价公式 (Searle 等, 1992)^[7]:

$$BLUP(w) = L b^0 + CV^{-1} (Y - Xb^0) \quad (\text{附11})$$

其中 w 为需要估计的固定效应与随机效应之和的向量, $L b^0$ 为 w 中固定效应的线性组合部分, C 为 w 与 Y 的协方差阵, b^0 为固定效应的广义最小二乘估计。对于品种效应 g_i 随机时品种均值 $\mu_i = \mu + g_i$ 来说:

$$BLUP(\mu_i) = \mu^0 + C_{(i)} V_{(i)}^{-1} (Y_{(i)} - 1_s \mu^0) \quad (\text{附12})$$

$$\mu^0 = [(1_{vs}) V^{-1} 1_{vs}]^{-1} (1_{vs}) V^{-1} Y = \frac{(1_{vs}) V^{-1} Y}{(1_{vs}) V^{-1} 1_{vs}} \quad (\text{附13})$$

$C_{(i)}$ 、 $V_{(i)}$ 和 $Y_{(i)}$ 为对应品种 i 的参数与观测值的协方差阵、观测值的方差协方差阵以及观测值向量。

(E) 若 e_j 固定, 各环境中的误差方差同质 (即 $\sigma_j^2 = \sigma^2$)

此时, $V_{(i)} = I_s \sigma_G^2 + I_s (\sigma_{GE}^2 + \sigma^2)$, $C_{(i)} = 1_s \sigma_G^2$ 。据(附12)式有:

$$\text{BLUP}(\mu_i) = \mu^0 + (I_s \frac{\sigma^2}{G}) [J_s \frac{\sigma^2}{G} + I_s (\frac{\sigma^2}{GE} + \sigma^2)]^{-1} (Y_{(i)} - I_s \mu^0) \quad (\text{附 14})$$

与(附 6)、(附 7)式的同理,根据(附 13)式可得出,误差同质情况下,试验总均值 μ^0 的广义最小二乘估计即为算术平均值,即

$$\mu^0 = \frac{1}{vs} \sum_{i=1}^v \sum_{j=1}^s Y_{ij} = \bar{Y} \quad (\text{附 15})$$

另外,根据下面的求逆公式^[7]

$$(aI_n + bJ_n)^{-1} = \frac{1}{a} \left[I_n - \frac{b}{a + nb} J_n \right] \quad (\text{附 16})$$

可得到

$$\begin{aligned} & [J_s \frac{\sigma^2}{G} + I_s (\frac{\sigma^2}{GE} + \sigma^2)]^{-1} \\ &= \frac{1}{\frac{\sigma^2}{GE} + \sigma^2} \left[I_s - \frac{\frac{\sigma^2}{G}}{\frac{\sigma^2}{GE} + \sigma^2 + \frac{\sigma^2}{G}} J_s \right] \quad (\text{附 17}) \end{aligned}$$

所以

$$\begin{aligned} & [I_s \frac{\sigma^2}{G} [J_s \frac{\sigma^2}{G} + I_s (\frac{\sigma^2}{GE} + \sigma^2)]]^{-1} \\ &= I_s \left[\frac{\frac{\sigma^2}{G}}{\frac{\sigma^2}{GE} + \sigma^2 + \frac{\sigma^2}{G}} \right] \quad (\text{附 18}) \end{aligned}$$

把(附 15)和(附 18)式代入(附 14)式,可得到

$$\text{BLUP}(\mu_i) = \bar{Y} + \left[\frac{\frac{\sigma^2}{G}}{\frac{\sigma^2}{GE} + \sigma^2 + \frac{\sigma^2}{G}} \right] (\bar{Y}_i - \bar{Y}) \quad (\text{附 19})$$

此即为品种效应随机,环境效应固定时的品种均值的 BLUP 预测值,记作 BLUP₀。

(F) 若 e_j 随机,且各环境中的误差方差同质

此时, $V_{(i)} = J_s \frac{\sigma^2}{G} + I_s (\frac{\sigma^2}{E} + \frac{\sigma^2}{GE} + \sigma^2)$, 而 $C_{(i)}$ 同

(E)。类似(附 19)式推导,可得到:

$$\begin{aligned} & \text{BLUP}(\mu_i) \\ &= \bar{Y} + \left[\frac{\frac{\sigma^2}{G}}{\frac{\sigma^2}{s} + \frac{\sigma^2}{GE} + \frac{\sigma^2}{E} + \frac{\sigma^2}{G}} \right] (\bar{Y}_i - \bar{Y}) \quad (\text{附 20}) \end{aligned}$$

此即为品种和环境效应随机时,品种均值的 BLUP 预测值,记作 BLUP₁。

References

- [1] Gauch H G. Statistical Analysis of Regional Yield Trials. New York: Elsevier, 1992
- [2] Zhang Q-Y (张群远), Kong F-L (孔繁玲), Yang F-X (杨付新). Comparison of the predictive accuracy of arithmetic means and BLUPs and AMMI estimates in regional crop trial. *Acta Agronomica Sinica* (作物学报), 2001, 27(4): 428—433
- [3] Yates F, Cochran W G. The analysis of groups of experiments. *Journal of Agricultural Science*, 1938, 28: 556—580
- [4] Bernardo R. Weighted vs. unweighted mean performance of varieties across environments. *Crop Science*, 1992, 32: 490—492
- [5] Huhn M. Weighted means are unnecessary in cultivar performance trials. *Crop Science*, 1997, 37: 1745—1750
- [6] Wang S-G (王松桂). Theory and Application of Linear Models (线性模型的理论及应用). Hefei: Anhui Education Press, 1987
- [7] Searle S R, Casella G, McCulloch C E. Variance Components. New York: John Wiley & Sons, 1992, 19—33
- [8] Henderson C R. Best linear unbiased estimation and prediction under a selection model. *Biometrics*, 1975, 31: 423—447
- [9] Shukla G K. Some statistical aspects of partitioning genotype-environmental components of variability. *Heredity*, 1972, 29: 237—245