

附录 1

附录 1 展示式 (3) 对数似然函数的推导过程。

对于 n 个观测, 预测变量为 $\mathbf{X}_i, \mathbf{Z}_i$, 生存时间为 Y_i , 示性函数为 $\tau_i, i=1,2,\dots,n$, 本文考虑部分线性半参数 AFT 模型: $\log T_i = \mathbf{X}_i^T \boldsymbol{\beta} + h(\mathbf{Z}_i) + \varepsilon_i$ 。

记 $f(\cdot), S(\cdot)$ 分别为生存时间的密度函数和生存函数, $f_\varepsilon(\cdot)$ 和 $S_\varepsilon(\cdot)$ 分别为误差项的密度函数和生存函数。对于 n 个观测 $(Y_i, \tau_i, \mathbf{X}_i, \mathbf{Z}_i)$, 似然函数为 $\prod_{i=1}^n [f(Y_i)]^{\tau_i} [S(Y_i)]^{1-\tau_i}$ 。

由于 $f(Y_i) = f_\varepsilon(\varepsilon_i)/Y_i, S(Y_i) = S_\varepsilon(\varepsilon_i)$, 因此似然函数等价于 $\prod_{i=1}^n [f_\varepsilon(\varepsilon_i)/Y_i]^{\tau_i} [S_\varepsilon(\varepsilon_i)]^{1-\tau_i}$, 则对数似然 (Log Likelihood, 以下简称 LL) 函数为:

$$\begin{aligned} \text{LL} &= \log\left(\prod_{i=1}^n [f_\varepsilon(\varepsilon_i)/Y_i]^{\tau_i} [S_\varepsilon(\varepsilon_i)]^{1-\tau_i}\right) \\ &= \sum_{i=1}^n [\tau_i \log f_\varepsilon(\varepsilon_i) + (1-\tau_i) \log S_\varepsilon(\varepsilon_i) - \tau_i \log Y_i] \\ &= \sum_{i=1}^n [\tau_i \log f_\varepsilon(Y_i - \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - h(\mathbf{Z}_i)) + (1-\tau_i) \log S_\varepsilon(Y_i - \mathbf{X}_i \boldsymbol{\beta} - h(\mathbf{Z}_i)) - \tau_i \log Y_i] \end{aligned}$$

即论文中式 (3)。

附录 2

附录 2 展示式 (6) 到式 (7) 的推导过程。

第 $k+1$ 次更新 $\boldsymbol{\beta}$, 目标函数为式 (7):

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\beta}^{(k+1)} &= \arg \max_{\boldsymbol{\beta}} \left\{ \frac{1}{n} \left[\boldsymbol{\tau}^T (\log \mathbf{Y} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} - \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)}) - (\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}^T) \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) \right] \right. \\ &\quad \left. - \lambda_1 \|\boldsymbol{\beta}\|_1 - \lambda_2 \|\boldsymbol{\delta}^{(k)}\|_1 - \frac{1}{2} \lambda_3 \boldsymbol{\alpha}^{(k)T} \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)} \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

式 (6) 是关于 $\boldsymbol{\beta}$ 的非线性函数, 不易求解。受 Simon 等 (2011) 算法思想的启发, 以 $(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 为中心, 将似然函数 $l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 二阶泰勒展开, 下面给出具体的推导过程。

令 $l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}) = \boldsymbol{\tau}^T (\log \mathbf{Y} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} - \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}) \boldsymbol{\alpha}) - (\mathbf{I} + \boldsymbol{\tau}^T) \mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta})$, $\boldsymbol{\eta} = \mathbf{X} \boldsymbol{\beta} + \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}) \boldsymbol{\alpha}$ 。记 $\dot{l}_n(\boldsymbol{\eta})$, $\ddot{l}_n(\boldsymbol{\eta})$ 分别表示 $l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta})$ 关于 $\boldsymbol{\eta}$ 的梯度和 Hessian 矩阵, 设 $\dot{l}_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$, $\ddot{l}_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 分别表示 $l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta})$ 关于 $\boldsymbol{\beta}$ 的梯度和 Hessian 矩阵。令 $\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}^{(k)} + \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)}$, 将 $l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 在第 k 步估计值 $(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 处二阶泰勒展开, 则

$$\begin{aligned} &l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) \\ &\approx l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^{(k)})^T \dot{l}_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^{(k)})^T \ddot{l}_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) (\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^{(k)}) \\ &= l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^{(k)})^T \mathbf{X}^T \dot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^{(k)})^T \mathbf{X}^T \ddot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) \mathbf{X} (\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^{(k)}) \\ &= l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\mathbf{X} \boldsymbol{\beta} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}^{(k)})^T \dot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + \frac{1}{2} (\mathbf{X} \boldsymbol{\beta} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}^{(k)})^T \ddot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\mathbf{X} \boldsymbol{\beta} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}^{(k)}) \\ &= l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\mathbf{X} \boldsymbol{\beta} + \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}^{(k)} - \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T \dot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) \\ &\quad + \frac{1}{2} (\mathbf{X} \boldsymbol{\beta} + \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}^{(k)} - \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T \ddot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\mathbf{X} \boldsymbol{\beta} + \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}^{(k)} - \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)}) \\ &= l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T \dot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T \ddot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) \\ &= (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T \dot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T \ddot{l}_n(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) + C_1^{(k)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \{ (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) + 2(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) \} + C_1^{(k)} \\
&= \frac{1}{2} \{ (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) + (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + [l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T [l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1}]^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) \} + C_1^{(k)} \\
&= \frac{1}{2} \{ (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) [\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}} + l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})] + [l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) \} + C_1^{(k)} \\
&= \frac{1}{2} \{ (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) [\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}} + l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})] + [l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) \} + \frac{1}{2} [l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + C_2^{(k)} \\
&= \frac{1}{2} [\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}} + l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) [\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}} + l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})] + C_2^{(k)} \\
&= \frac{1}{2} [\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) [\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}] + C_2^{(k)}
\end{aligned}$$

其中, $C_1^{(k)}, C_2^{(k)}$ 是与参数 $\boldsymbol{\beta}$ 无关的项, 其具体形式分别为 $C_1^{(k)} = l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$,

$$C_2^{(k)} = -\frac{1}{2} [l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) .$$

因此, $l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) \approx \frac{1}{2} [\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) [\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}] + C_2^{(k)}$. 易得极大化 $l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 等价于极大化 $\frac{1}{2} [\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) [\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}]$.

事实上, $l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$ 是一个对角矩阵, 所以只需要计算 $O(n)$ 项. 令 $V(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) = \tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$, $W(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$ 表示 $-l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$ 矩阵, $\boldsymbol{\beta}$ 的更新估计可通过求解以下惩罚加权最小二乘问题得到:

$$\frac{1}{2n} [V(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}^{(k)}]^T W(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) [V(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}^{(k)}] + \lambda_1 \|\boldsymbol{\beta}\|_1 \quad (7)$$

以上是式 (6) 到式 (7) 的推导过程.

附录 3

附录 3 展示第 $k+1$ 次更新 $\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{\delta}$ 的过程.

第 $k+1$ 次更新 $\boldsymbol{\alpha}$, 目标函数为:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\alpha}^{(k+1)} = \arg \max_{\boldsymbol{\alpha}} \left\{ \frac{1}{n} \left[\boldsymbol{\tau}^T (\log Y - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}) - (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\tau}^T) \boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) \right] \right. \\
\left. - \lambda_1 \|\boldsymbol{\beta}^{(k)}\|_1 - \lambda_2 \|\boldsymbol{\delta}^{(k)}\|_1 - \frac{1}{2} \lambda_3 \boldsymbol{\alpha}^T \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha} \right\}
\end{aligned}$$

上式是关于 $\boldsymbol{\alpha}$ 的非线性函数, 不易直接求解. 因此将 $l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta}) = \boldsymbol{\tau}^T (\log Y - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta})\boldsymbol{\alpha}) - (\boldsymbol{I} + \boldsymbol{\tau}^T) \boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta})$ 在 $(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 处二阶泰勒展开, 具体推导如下.

令 $\boldsymbol{\eta} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta})\boldsymbol{\alpha}$. 记 $l_n'(\boldsymbol{\eta}), l_n''(\boldsymbol{\eta})$ 分别表示 $l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta})$ 关于 $\boldsymbol{\eta}$ 的梯度和 Hessian 矩阵, $\dot{l}_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}), \ddot{l}_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 分别表示 $l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\delta})$ 关于 $\boldsymbol{\alpha}$ 的梯度和 Hessian 矩阵. 令 $\tilde{\boldsymbol{\eta}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} + \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}^{(k)}$, 在第 k 步估计值 $(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 处, 将 $l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 二阶泰勒展开, 得

$$\begin{aligned}
& l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) \\
& \approx l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T \dot{l}_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T \ddot{l}_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}^{(k)}) \\
& = l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) (\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}^{(k)}) \\
& = l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) \\
& \quad + \frac{1}{2} (\boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (\boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}^{(k)})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} + \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) \\
 &\quad + \frac{1}{2}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} + \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}^{(k)})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})(\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} + \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}^{(k)}) \\
 &= l_n(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) + (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) \\
 &= (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + \frac{1}{2}(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) + C_1^{(k)} \\
 &= \frac{1}{2}\{(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) + 2(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})\} + C_1^{(k)} \\
 &= \frac{1}{2}\{(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}}) + (\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})l_n^{-1}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + [l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T [l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^{-1} l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})\} + C_1^{(k)} \\
 &= \frac{1}{2}\{(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})[\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}} + l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})] + [l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})\} + C_1^{(k)} \\
 &= \frac{1}{2}\{(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})^T l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})[\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}} + l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})] + [l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})(\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}})\} \\
 &\quad + \frac{1}{2}[l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) + C_2^{(k)} \\
 &= \frac{1}{2}[\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}} + l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})[\boldsymbol{\eta} - \tilde{\boldsymbol{\eta}} + l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})] + C_2^{(k)} \\
 &= \frac{1}{2}[\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})[\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}] + C_2^{(k)}
 \end{aligned}$$

其中, $C_1^{(k)}$, $C_2^{(k)}$ 是与参数 $\boldsymbol{\alpha}$ 无关的项, 因此,

$$l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)}) \approx \frac{1}{2}[\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})[\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}] + C_2^{(k)}$$

于是, 极大化 $l_n(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}^{(k)})$ 等价于极大化下式:

$$\frac{1}{2}[\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}]^T l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})[\tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{\eta}]$$

不妨统一将极大化问题转化为极小化问题, 令 $V(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) = \tilde{\boldsymbol{\eta}} - l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})^{-1} l_n'(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$, $\boldsymbol{W}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$ 表示 $-l_n''(\tilde{\boldsymbol{\eta}})$ 矩阵。则上式等价于最小化下式:

$$\frac{1}{2n}[V(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}]^T \boldsymbol{W}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})[V(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}] + \frac{1}{2}\lambda_3 \boldsymbol{\alpha}^T \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}$$

可以看出, 上式是一个关于 $\boldsymbol{\alpha}$ 的二次型。关于 $\boldsymbol{\alpha}$ 求导并令导数为零, 有

$$\frac{1}{n}(-\boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}))\boldsymbol{W}(\tilde{\boldsymbol{\eta}})[V(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha}] + \lambda_3 \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)})\boldsymbol{\alpha} = 0$$

$$\text{即} \left[\frac{1}{n} \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{W}(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) + \lambda_3 \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \right] \boldsymbol{\alpha} = \frac{1}{n} \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}^{(k)}) \boldsymbol{W}(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) (V(\tilde{\boldsymbol{\eta}}) - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)})$$

求解以上线性方程组可得到 $\boldsymbol{\alpha}$ 的更新估计^①。

第 $k+1$ 次更新 $\boldsymbol{\delta}$: 固定 $\boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\alpha}^{(k)}$, $\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{\beta}^{(k)}$, 最大化 $f(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta})$ 。受 Friedman 等 (2010) 算法思想启发, 为实现多元参数 $\boldsymbol{\delta}$ 的有效更新, 本文基于逐维梯度下降算法, 循环更新 δ_l , 对于 $\delta_l > 0$, $\delta_l > 0$, $l, l' = 1, \dots, q$, 有

$$\delta_q^{(k+1)} = \arg \max_{\delta_q} \left\{ \frac{1}{n} \left[\boldsymbol{\tau}^T (\log Y - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}^{(k)} - \boldsymbol{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta})\boldsymbol{\alpha}^{(k)}) - (I + \boldsymbol{\tau}^T) \boldsymbol{A}(\boldsymbol{\alpha}^{(k)}, \boldsymbol{\beta}^{(k)}, \boldsymbol{\delta}) \right] \right\}$$

^①若上述方程的左侧为奇异矩阵, 线性方程组求解会失效, 因此不妨在方程组左侧添加对角元素为1的对角矩阵以修正线性方程组。

$$-\lambda_2 \sum_{l \neq l'}^q \delta_l^{(k)} - \lambda_2 \delta_l - \frac{1}{2} \lambda_3 \boldsymbol{\alpha}^{(k)T} \mathbf{K}^{(g)}(\boldsymbol{\delta}) \boldsymbol{\alpha}^{(k)} \Big\}$$

上式是关于 δ_l 的带限制条件的一元非线性最优化问题，可利用 R 软件中的最优化算法，如 L-BFGS-B，寻找未知参数的最优解。

附录 4

C-statistic: C-statistic表示在所有“可用对”中预测结果和观察结果相一致的概率。其范围在0.5~1之间，其值越高表明模型的预测能力越好。对于预先指定的随访期 $(0, t_0)$ ，定义 C-statistic 为 $C_0 = P(f(\mathbf{X}_1, \mathbf{Z}_1) < f(\mathbf{X}_2, \mathbf{Z}_2) | Y_1 < Y_2, Y_1 < t_0)$ ，其中 Y 表示观察的生存时间， $f(\mathbf{X}, \mathbf{Z})$ 表示估计的风险得分。特别地，对于 RegGKM 方法， $f(\mathbf{X}, \mathbf{Z}) = \mathbf{X}^T \hat{\boldsymbol{\beta}} + \hat{h}(\mathbf{Z})$ 。基于“逆概率加权”技术，有

$$\hat{C}_{t_0} = \frac{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \tau_i \{\hat{G}(Y_i)\}^{-2} \mathbf{I}(Y_i < Y_j, Y_i < t_0) \mathbf{I}(f(\mathbf{X}_i, \mathbf{Z}_i) < f(\mathbf{X}_j, \mathbf{Z}_j))}{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \tau_i \{\hat{G}(Y_i)\}^{-2} \mathbf{I}(Y_i < Y_j, Y_i < t_0)}$$

其中 $\mathbf{I}(\cdot)$ 是示性函数， $\hat{G}(\cdot)$ 是删失时间分布 $G(t) = P(T > t)$ 的 Kaplan-Meier 估计量。本文利用 R 包“survC1”实现 C-statistic 的计算。

当模型中包含冗余预测变量时，本文借助于 Error (E)、correct-selection (C)、over-selection (O)、under-selection (U) 四个指标^①比较 RegGKM 方法和 LASSO 方法的变量选择效果 (Rong 等, 2018)。若 C 和 O 越高，E 和 U 越低，表明将无关预测变量选入模型的频率更低，变量选择效果更好。

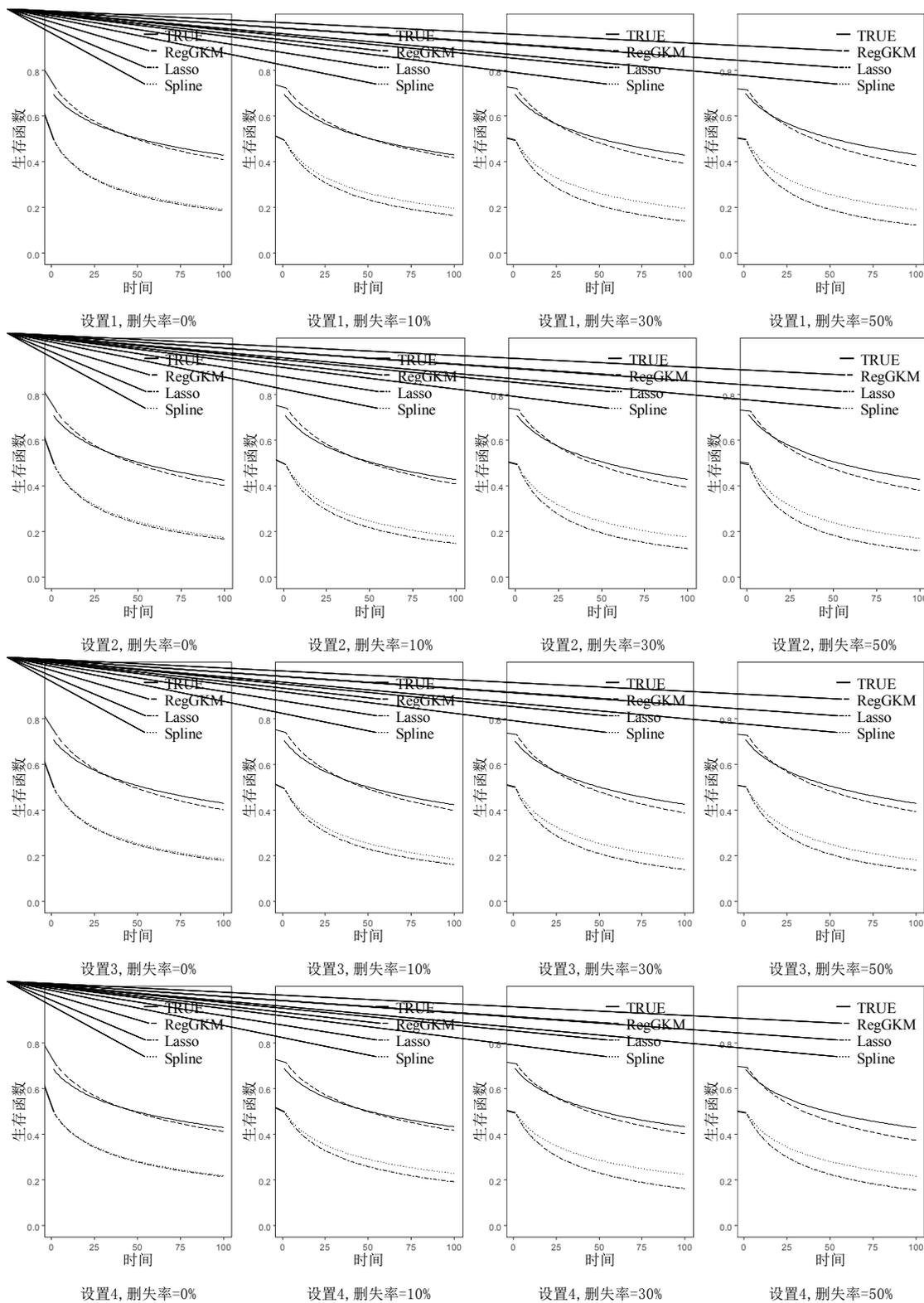
附表 1 RegGKM 和 LASSO 方法的变量选择

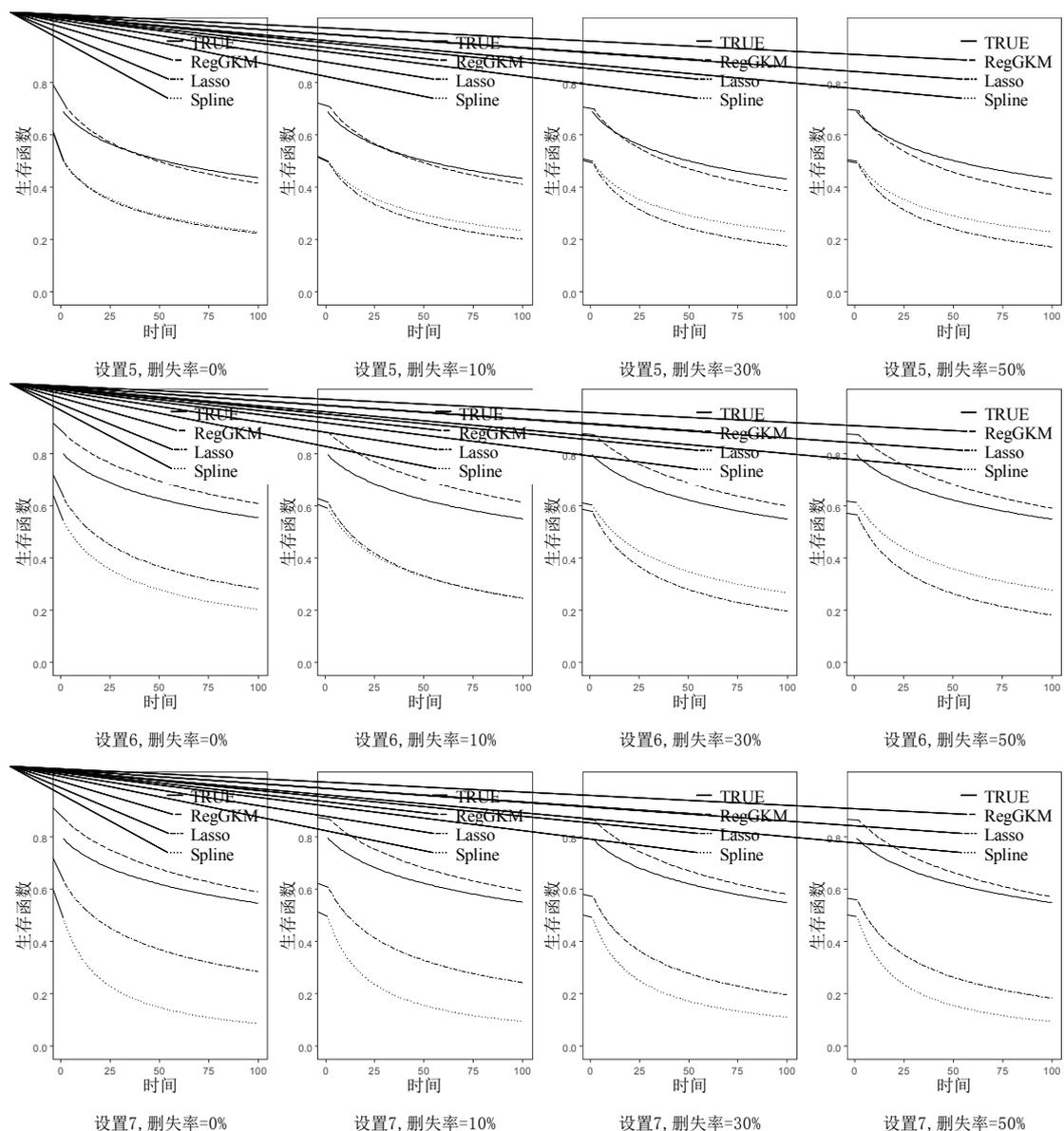
设置	CR	方法	Z				X			
			E	C	O	U	E	C	O	U
2	0%	RegGKM	0.53	0.27	0.73	0.00	0.87	0.07	0.83	0.10
		LASSO	0.89	0.00	0.66	0.34	0.90	0.10	0.90	0.00
	10%	RegGKM	0.48	0.18	0.82	0.00	0.82	0.06	0.82	0.12
		LASSO	0.88	0.00	0.74	0.26	0.85	0.15	0.85	0.00
	30%	RegGKM	0.52	0.22	0.76	0.02	0.88	0.08	0.85	0.07
		LASSO	0.92	0.00	0.73	0.27	0.93	0.07	0.92	0.01
	50%	RegGKM	0.57	0.12	0.84	0.04	0.90	0.09	0.85	0.06
		LASSO	0.92	0.00	0.72	0.28	0.95	0.04	0.95	0.01
3	0%	RegGKM	0.27	0.04	0.96	0.00	0.72	0.12	0.72	0.16
		LASSO	0.91	0.00	0.68	0.32	0.91	0.04	0.96	0.00
	10%	RegGKM	0.33	0.05	0.95	0.00	0.66	0.11	0.67	0.22
		LASSO	0.86	0.00	0.52	0.48	1.00	0.00	1.00	0.00
	30%	RegGKM	0.36	0.11	0.88	0.01	0.72	0.16	0.72	0.12
		LASSO	0.82	0.00	0.61	0.39	0.83	0.17	0.83	0.00
	50%	RegGKM	0.52	0.06	0.94	0.00	0.78	0.15	0.79	0.06
		LASSO	0.92	0.00	0.71	0.29	0.92	0.07	0.93	0.00
4	0%	RegGKM	0.32	0.20	0.77	0.03	0.84	0.08	0.78	0.14
		LASSO	0.87	0.00	0.59	0.41	0.88	0.00	1.00	0.00
	10%	RegGKM	0.42	0.20	0.75	0.05	0.87	0.20	0.60	0.20
		LASSO	0.87	0.00	0.55	0.45	0.88	0.00	1.00	0.00
	30%	RegGKM	0.37	0.12	0.82	0.06	0.89	0.17	0.71	0.12
		LASSO	0.88	0.00	0.70	0.30	0.91	0.00	0.99	0.01

^①E 表示选入模型的冗余变量占全部冗余变量的频率，C 表示只选出全部相关预测变量的频率，O 表示选出全部相关和部分冗余预测变量的频率，U 表示未选出全部相关预测变量的频率。

	50%	RegGKM	0.34	0.14	0.73	0.13	0.90	0.10	0.76	0.14
		LASSO	0.89	0.00	0.66	0.34	0.91	0.00	0.91	0.09
5	0%	RegGKM	0.28	0.20	0.78	0.02	0.81	0.09	0.79	0.12
		LASSO	0.86	0.00	0.57	0.43	0.86	0.00	1.00	0.00
	10%	RegGKM	0.30	0.16	0.83	0.01	0.87	0.10	0.79	0.11
		LASSO	0.87	0.00	0.65	0.35	0.87	0.00	1.00	0.00
	30%	RegGKM	0.27	0.09	0.80	0.11	0.88	0.11	0.77	0.12
		LASSO	0.85	0.00	0.62	0.38	0.89	0.00	1.00	0.00
	50%	RegGKM	0.76	0.23	0.58	0.19	0.88	0.08	0.81	0.11
		LASSO	0.89	0.00	0.65	0.35	0.90	0.00	0.96	0.04
6	0%	RegGKM	0.52	0.02	0.98	0.00	--	--	--	--
		LASSO	0.98	0.00	0.92	0.08	--	--	--	--
	10%	RegGKM	0.53	0.04	0.96	0.00	--	--	--	--
		LASSO	0.99	0.00	0.98	0.02	--	--	--	--
	30%	RegGKM	0.47	0.03	0.97	0.00	--	--	--	--
		LASSO	0.96	0.00	0.90	0.10	--	--	--	--
	50%	RegGKM	0.42	0.03	0.95	0.02	--	--	--	--
		LASSO	0.93	0.00	0.80	0.20	--	--	--	--
7	0%	RegGKM	0.52	0.02	0.96	0.02	0.65	0.02	0.86	0.12
		LASSO	0.98	0.00	0.94	0.06	0.85	0.00	0.98	0.02
	10%	RegGKM	0.49	0.01	0.97	0.02	0.74	0.01	0.90	0.09
		LASSO	0.98	0.00	0.98	0.02	0.83	0.00	0.94	0.06
	30%	RegGKM	0.46	0.02	0.96	0.02	0.73	0.02	0.88	0.10
		LASSO	0.96	0.00	0.92	0.08	0.85	0.02	0.92	0.06
	50%	RegGKM	0.42	0.01	0.95	0.04	0.72	0.01	0.91	0.08
		LASSO	0.96	0.00	0.90	0.10	0.82	0.01	0.88	0.10

注：“--”表示无变量选择结果，设置 6 中 X 不包含冗余变量，因此没有变量选择结果。由于 Spline 方法只可得到线性 AFT 模型的参数估计，无法实现变量选择，因此附表 1 中不涉及该方法。





附图1 RegGKM、LASSO 和 Spline 方法的生存函数估计图

注：黑色实线表示真实的生存函数曲线（TRUE），虚线、双划线、点划线分别表示 RegGKM、LASSO 和 Spline 方法的生存函数估计。