



LUDWIG-
MAXIMILIANS-
UNIVERSITÄT
MÜNCHEN

Institut für Statistik



Vorlesung: Lineare Modelle

Prof. Dr. Helmut Küchenhoff

Institut für Statistik, LMU München

SoSe 2014



- 0 Einführung und Beispiele
- 1 Das einfache lineare Regressionsmodell
- 2 Das multiple lineare Regressionsmodell
- 3 Quadratsummenzerlegung und statistische Inferenz im multiplen linearen Regressionsmodell
- 4 Diskrete Einflußgrößen: Dummy- und Effektkodierung, Mehrfaktorielle Varianzanalyse



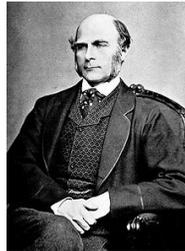
- 5 Metrische Einflußgrößen: Polynomiale Regression, Trigonometrische Polynome, Regressionsplines, Transformationen.
- 6 Modelldiagnose
- 7 Variablenselektion
- 8 Das allgemeine lineare Modell: Gewichtete KQ-Methode, Autokorrelierte und heteroskedastische Störterme
- 9 Das logistische Regressionsmodell
- 10 Das gemischte lineare Regressionsmodell („Linear mixed Model“)



- 0 Einführung und Beispiele
- 1 Das einfache lineare Regressionsmodell
- 2 Das multiple lineare Regressionsmodell
- 3 Quadratsummenzerlegung und statistische Inferenz im multiplen linearen Regressionsmodell
- 4 Diskrete Einflußgrößen: Dummy- und Effektkodierung, Mehrfaktorielle Varianzanalyse

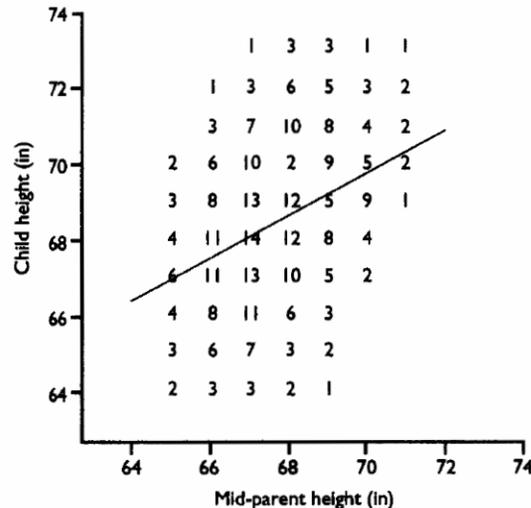
Sir Francis Galton

Sir Francis Galton (1822-1911) „Regression toward mediocrity in hereditary stature“



Der Begriff Regression

Originaldaten von Galton nach Blend/Altman



Zusammenhang zwischen Größe der Eltern und ihrer Kinder

$$E(Y) = \bar{Y} + 0.66(X - \bar{X})$$

$$E(Y) = 0.66X + \bar{Y} - 0.66\bar{X}$$

Y: Größe des Kindes X: Größe der Eltern

Gibt es eine Midlife - Crisis ?

Daten über die Zufriedenheit von Personen

$$E(Y_t) = \beta_0 + \beta_1 x_{1t} + \beta_2 x_{2t} + \beta_3 \log(x_{3t}) + \beta_4 x_{4t} + \dots \\ + \beta_{A1} AI + \beta_{A2} AI^2$$

x-Variablen: Gehalt, Geschlecht, Gesundheitsstatus etc.

→ **multiple lineare Regression**

Botanik: Wachstum von Pflanzen

In einem Versuchswald wird bei einem Teil der Bäume eine Kalkung vorgenommen. Annahme von linearem Wachstum.

$$E(Y_{ijt}) = \beta_0 + \beta_j(t - t_0)$$

Y_{ijt} : Baumhöhe von Baum i in der Gruppe j zum Zeitpunkt t

β_j : Wachstumsparameter in Gruppe j ($j=1$: Kalk, $j=2$: kein Kalk)

→ **Kovarianzanalyse**

Zusammenhang zwischen Lesefähigkeit und Lehrmethode

$$E(Y_{ij}) = \beta_0 + \beta_1 x_{1ij} + \alpha_j$$

x_{1ij} : Zahl der Förderstunden

α_j : Klasseneffekt

→ **Gemischtes lineares Modell**

Zusammenhang zwischen dem Auftreten von Chronischer Bronchitis (CBR) und Staubbelastung am Arbeitsplatz.

Studie: 1246 Arbeitnehmer

$$P(Y_i = 1) = G(\beta_0 + \beta_1 x_{1i} + \beta_2 x_{2i} + \beta_3 IR_i)$$

Variablen:

Y : Indikator für CBR

x_1 : Staubkonzentration am Arbeitsplatz

x_2 : Dauer der Exposition

IR : Rauchstatus (ja/nein)

→ **Logistisches Regressionsmodell**



- 0 Einführung und Beispiele
- 1 Das einfache lineare Regressionsmodell**
- 2 Das multiple lineare Regressionsmodell
- 3 Quadratsummenzerlegung und statistische Inferenz im multiplen linearen Regressionsmodell
- 4 Diskrete Einflußgrößen: Dummy- und Effektkodierung, Mehrfaktorielle Varianzanalyse

Das einfache lineare Regressionsmodell

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i; \quad i = 1, \dots, n \quad (1.1)$$

$$E(\varepsilon_i) = 0 \quad (1.2)$$

$$V(\varepsilon_i) = \sigma^2 \quad (1.3)$$

$$\{\varepsilon_i \mid i = 1, \dots, n\} \quad \text{stoch. unabhängig} \quad (1.4)$$

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2) \quad (1.5)$$

Y_i : Zielgröße (Zufallsgröße), abhängige Variable

x_i : **feste** bekannte Einflussgröße, unabhängige Variable

ε_i : Zufallsfehler

$\beta_0, \beta_1, \sigma^2$: unbekannte Parameter

n : Anzahl der Beobachtungen

KQ-Schätzung

Wir betrachten Modell (1.1).
Dann heißt:

$$(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = \arg \min_{\beta_0, \beta_1} \sum_{i=1}^n (Y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2 \quad (1.6)$$

KQ-Schätzer (Schätzer nach der Methode der kleinsten Quadrate)

$$\hat{\varepsilon}_i := Y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i \quad \text{heißen } \mathbf{Residuen}. \quad (1.7)$$

Existenz und Berechnung des KQ-Schätzers

Der KQ-Schätzer **existiert** und ist **eindeutig**, (falls $\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \neq 0$):

$$\hat{\beta}_1 = \frac{S_{xY}}{S_x^2} = \frac{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(Y_i - \bar{Y})}{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (1.8)$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}. \quad (1.9)$$

Beweis:

Durch Differenzieren von (1.6) erhält man: $(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$ sind Lösung der **Normalgleichungen**

$$\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i = 0 \quad (1.10)$$

$$\sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i x_i = 0 \quad (1.11)$$

Interpretation der Modellparameter I

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i; \quad i = 1, \dots, n$$
$$E(Y|X) = \beta_0 + \beta_1 x$$

Systematische Komponenten: $\beta_0 + \beta_1 x_i$

- Zentrale Größe ist der Steigungsparameter β_1

Wenn X um eine Einheit steigt, dann steigt Y **im Durchschnitt** um β_1 Einheiten

Die Größe von β_1 hängt von der Einheit von X ab. Sie kann also nur in Zusammenhang mit X interpretiert werden.

- Interpretation des Achsenabschnitts β_0 :

Erwartungswert von Y bei $X=0$. In vielen Fällen irrelevant

Interpretation der Modellparameter II

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i; \quad i = 1, \dots, n$$
$$E(Y|X) = \beta_0 + \beta_1 x$$

Stochastische Komponente : Störterm ε

- Interpretation des Parameters σ :

Standardabweichung des Störterms.

Maß für die durchschnittliche Abweichung der Y-Werte von der Regressionsgeraden.

Eigenschaften des KQ-Schätzers I

Gegeben sei Modell (1.1) mit Annahme (1.2).

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i; \quad i = 1, \dots, n \quad (1.1)$$

$$E(\varepsilon_i) = 0 \quad (1.2)$$

1 Dann ist $(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$ ein **erwartungstreuer** Schätzer für (β_0, β_1) :

$$E(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) = (\beta_0, \beta_1). \quad (1.12)$$

Eigenschaften des KQ-Schätzers II

- 2 Für die **Varianzen** von $(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$ gilt unter den Annahmen (1.3), (1.4):

$$V(\varepsilon_i) = \sigma^2 \quad (1.3)$$

$$\{\varepsilon_i \mid i = 1, \dots, n\} \quad \text{stoch. unabhängig} \quad (1.4)$$

$$V(\hat{\beta}_1) = \frac{\sigma^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \sigma^2 / nS_x^2 \quad (1.13)$$

$$V(\hat{\beta}_0) = \sigma^2 \left[\frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{n \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right] = \sigma^2 \left[\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{nS_x^2} \right] \quad (1.14)$$

Eigenschaften des KQ-Schätzers III

- 3 Unter der NV-Annahme (1.5)

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2) \quad (1.5)$$

ist der KQ-Schätzer $(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$ **ML-Schätzer**.

Beweis des Satzes I

- 1 Es ist zu beachten, dass die x_i fest sind und dass die einzige stochastische Komponente des Modells ε_i ist.

$$\begin{aligned} E(\hat{\beta}_1) &= E \left[\frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})(x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right] \\ &= \frac{1}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sum_{i=1}^n E[(\beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i - \beta_0 - \beta_1 \bar{x} - \bar{\varepsilon})(x_i - \bar{x})] \\ &= \frac{1}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sum_{i=1}^n [(\beta_0 + \beta_1 x_i + E[\varepsilon_i] - \beta_0 - \beta_1 \bar{x} - E[\bar{\varepsilon}])(x_i - \bar{x})] \\ &= \frac{1}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \sum_{i=1}^n \beta_1 (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x}) = \beta_1 \\ E(\hat{\beta}_0) &= E[\bar{Y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}] = E[\beta_0 + \beta_1 \bar{x} + \bar{\varepsilon}] - \beta_1 \bar{x} = \beta_0 \end{aligned}$$

- 2 Übung

Beweis des Satzes II

3 Die Likelihood von Beobachtungen (y_i, x_i) lautet:

$$L(y_1, \dots, y_n, x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n \left(\sqrt{2 * \pi * \sigma^2} \right)^{-1} \exp \left[-\frac{[\varepsilon_i(\beta_0, \beta_1)]^2}{2\sigma^2} \right]$$

$$\ln L(y_1, \dots, y_n, x_1, \dots, x_n) = -n/2 * \ln(\sigma^2 * 2 * \pi) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2$$

Da die Parameter β_0 und β_1 nur in $\sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2$ vorkommen, entspricht die Maximierung von $\ln L(y_i, x_i)$ der Minimierung von $\sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2$. Damit entspricht die KQ-Methode der ML-Methode.

Als ML-Schätzung von σ^2 ergibt sich nach Einsetzen von $\hat{\varepsilon}_i := \varepsilon_i(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$:

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2$$

Dieser Schätzer ist nicht erwartungstreu. Daher wird er selten verwendet.

Schätzung von σ^2 und Konfidenzintervalle für β_0 und β_1 I

Gegeben sei das Modell (1.1) bis (1.4).

① Dann ist

$$\hat{\sigma}^2 := \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (Y_i - (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i))^2 \quad (1.15)$$

ein **erwartungstreuer** Schätzer für σ^2 .

Schätzung von σ^2 und Konfidenzintervalle für β_0 und β_1 II

- 2 Unter der Normalverteilungsannahme (1.5) gilt:

$$\frac{1}{\sigma^2} \sum_{i=1}^n \hat{\varepsilon}_i^2 \sim \chi_{n-2}^2 \quad (1.16)$$

$$(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1) \text{ und } \hat{\sigma}^2 \quad \text{stochastisch unabhängig} \quad (1.17)$$

Schätzung von σ^2 und Konfidenzintervalle für β_0 und β_1 III

- 3 Unter (1.5) gilt für die Schätzer $\hat{\beta}_1$ und $\hat{\beta}_0$:

$$\frac{\hat{\beta}_1 - \beta_1}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_1}} \sim t_{n-2} \text{ mit } \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_1} := \sqrt{\frac{\hat{\sigma}^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}} \quad (1.18)$$

$$\frac{\hat{\beta}_0 - \beta_0}{\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_0}} \sim t_{n-2} \text{ mit } \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_0} := \sqrt{\hat{\sigma}^2 \left[\frac{\sum_{i=1}^n x_i^2}{n \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right]} \quad (1.19)$$



Schätzung von σ^2 und Konfidenzintervalle für β_0 und β_1 IV

- 4 Konfidenzintervalle zum Niveau $1 - \alpha$ für β_1 und β_0 unter Normalverteilungsannahme (1.5):

$$[\hat{\beta}_1 - \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_1} t_{1-\alpha/2}(n-2); \hat{\beta}_1 + \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_1} t_{1-\alpha/2}(n-2)] \quad (1.20)$$

$$[\hat{\beta}_0 - \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_0} t_{1-\alpha/2}(n-2); \hat{\beta}_0 + \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_0} t_{1-\alpha/2}(n-2)] \quad (1.21)$$

$t_{1-\alpha/2}(n-2)$: $1 - \alpha/2$ -Quantil der $t(n-2)$ -Verteilung.

Beweis

Teil 1 und **Teil 2** später als Spezialfall im multiplen Regressionsmodell

Teil 3:

$$\text{Def. t-Verteilung: } \left. \begin{array}{l} X_1 \sim N(0; 1) \\ X_2 \sim \chi_n^2 \\ X_1, X_2 \text{ unabh.} \end{array} \right\} \frac{X_1}{\sqrt{\frac{X_2}{n}}} \sim t_n$$

$$\hat{\beta}_1 \sim N\left(\beta_1, \frac{\sigma^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}\right), \text{ da } \hat{\beta}_1 = \sum \frac{x_i - \bar{x}}{\sum (x_i - \bar{x})^2} y_i \sim NV$$

(Summe von unabh. NV ZG)

Aus der Def. der t-Vert. und Teil 2 \Rightarrow Behauptung

Teil 4:

Standard Konstruktion von Konfidenzintervallen

Beispiel: Analyse von Daten aus Reihengräbern in Wenigumstadt

Fragestellung: Zusammenhang zwischen Alter (zum Todeszeitpunkt) und Knochenbälckchendicke des 4. Lendenwirbels

Im Zentrum der Interpretation stehen

- Parameterschätzung von β_1
- Schätzung der durchschnittlichen Abweichung von der Regressionsgeraden
- R^2

Probleme

- Messfehler
- sehr kleine Werte
- x_i sind zufällig

Quadratsummenzerlegung I

Gegeben sei das Modell (1.1). Dann gilt:

1

$$\underbrace{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}_{\text{SST}} = \underbrace{\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2}_{\text{SSE}} + \underbrace{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2}_{\text{SSM}} \quad (1.22)$$

mit den **angepassten Größen** $\hat{Y}_i := \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$ (1.23)

SST:	Gesamtstreuung von Y	Sum of Squares Total
SSE:	Streuung der Residuen	Sum of Squares Error
SSM:	Streuung, die das Modell erklärt	Sum of Squares Model

Quadratsummenzerlegung II

2

$$R^2 = \frac{SSM}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (1.24)$$

heißt **Bestimmtheitsmaß**.

Es gilt

$$R^2 = r_{xY}^2. \quad (1.25)$$

r_{xY} := Korrelationskoeffizient nach Bravais-Pearson.

Bemerkung

Zu den obigen Quadratsummen wird üblicherweise die Zahl der Freiheitsgrade angegeben. Sie bezeichnet die Anzahl der frei bestimmbar Summanden der obigen Quadratsummen (bei geg. x_i)

bei SST: $\sum (y_i - \bar{y}) = 0$
 $\Rightarrow \mathbf{df=n-1}$

bei SSE: NGL liefern 2 Restriktionen
 $\Rightarrow \mathbf{df=n-2}$ ($\sum \hat{\varepsilon}_i = 0; \sum \varepsilon_i x_i = 0$)

bei SSM: $\sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2 = \sum (\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i - \bar{y})^2 = \sum (\hat{\beta}_1 (x_i - \bar{x}))^2$
 $\Rightarrow \mathbf{df=1}$ (durch Wählen von 1 y-Wert liegt $\hat{\beta}_1$ fest)

Beweis von 1)

$$\begin{aligned}\sum (y_i - \bar{y})^2 &= \sum (y_i - \hat{y}_i + \hat{y}_i - \bar{y})^2 \\ &= \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + 2 \underbrace{\sum (y_i - \hat{y}_i)(\hat{y}_i - \bar{y})}_C\end{aligned}$$

$$C = \sum \hat{\varepsilon}_i(\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i - \bar{y}) = 0$$

Interpretation von R^2

R^2 ist das zentrale Maß Anpassungsgüte der Regression

- Anteil der Varianz von Y , die durch X erklärt wird
- R ist skalenunabhängig
- R ist symmetrisch bzgl. X und Y
- Vorsicht: R^2 hängt auch von der Streuung von X in der Stichprobe ab

Prognose I

In Modell (1.1) mit (1.2) - (1.4) betrachten wir eine weitere Beobachtung x_{n+1} mit zugehörigem unbekanntem Y_{n+1} . Der Prognosewert von Y_{n+1} ist gegeben durch

$$\hat{Y}_{n+1} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_{n+1} \quad (1.26)$$

Für den Erwartungswert und die Varianz des Prognosefehlers gilt:

$$E \left[\hat{Y}_{n+1} - Y_{n+1} \right] = 0 \quad (1.27)$$

$$V \left[\hat{Y}_{n+1} - Y_{n+1} \right] = \sigma^2 \left[1 + \frac{1}{n} + \frac{(x_{n+1} - \bar{x})^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \right] \quad (1.28)$$

Prognose II

Prognoseintervall für y_{n+1} zum Niveau $1 - \alpha$:

$$[\hat{Y}_{n+1} - \hat{\sigma}_{\hat{Y}_{n+1}} t_{1-\alpha/2}(n-2); \hat{Y}_{n+1} + \hat{\sigma}_{\hat{Y}_{n+1}} t_{1-\alpha/2}(n-2)] \quad (1.29)$$

$$\text{mit } \hat{\sigma}_{\hat{Y}_{n+1}}^2 = \hat{\sigma}^2 \left[1 + 1/n + (x_{n+1} - \bar{x})^2 / \left(\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \right) \right] \quad (1.30)$$

Bemerkungen

- 1 Alle Aussagen gelten nur unter der zentralen Modellannahme des linearen Zusammenhangs von $E(Y)$ und x .
- 2 Transformationen sind grundsätzlich möglich. Zu beachten sind dann die geänderte Interpretation der Modellparameter und der Modellannahmen. Insbesondere ist

$$E[g(Y)] \neq g[E(Y)]$$

- 3 Das lineare Modell ist in vielen Beispielen eine sinnvolle Näherung

Lineares Modell als sinnvolle Annäherung I

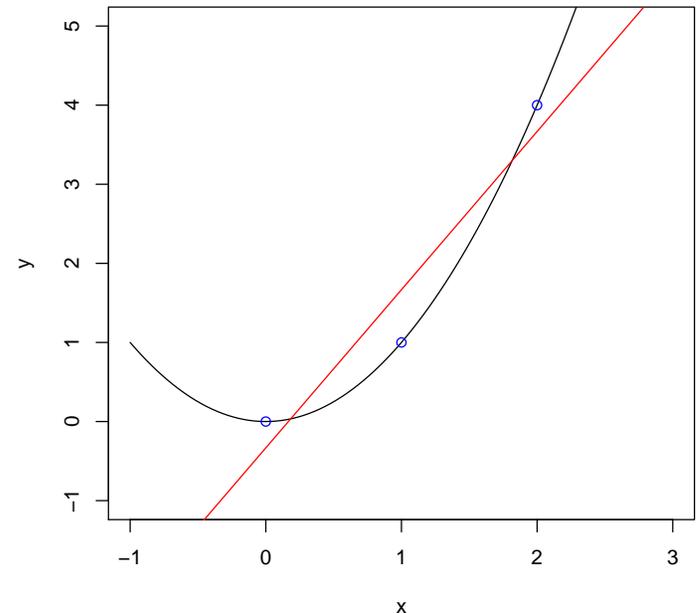
Gegeben sei ein quadratisches Modell:

$$Y_i = x_i^2 + \epsilon \text{ mit } E(\epsilon) = 0, \quad x_1 = 0, x_2 = 1, x_3 = 2 \text{ und } y_1, y_2, y_3$$

Angenommen wird aber ein lineares Modell: **KQ-Schätzung**

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon$$

$$\begin{aligned} E(\hat{\beta}_1) &= \frac{\sum_{i=1}^3 (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^3 (x_i - \bar{x})^2} \\ &= \frac{1}{2} (-1E(y_1 - \bar{y}) + 1E(y_3 - \bar{y})) \\ &= \frac{1}{2} (-0^2 + 4) = 2 \\ E(\hat{\beta}_0) &= E(\bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}) = \frac{5}{3} \cdot 2 \cdot 1 = -\frac{1}{3} \end{aligned}$$



Lineares Modell als sinnvolle Annäherung II

Je nachdem, wie die x -Werte (unter Annahme der Richtigkeit des quadratischen Modells) liegen, bekommt man eine andere Regressionsgerade (bei Annahme eines linearen Zusammenhangs).

- Näherung im Bereich $[0, 2]$ ist akzeptabel (abhängig von der Größe des Störterms).
- Prognose außerhalb von $[0, 2]$ ergibt falsche Ergebnisse. Auch das Prognose-Intervall ist vollkommen falsch: z.B. $x = -1$ ergibt eine Prognose von $\hat{y} = -1$, obwohl $y = 1$ richtig ist.