Vorlesung: Lineare Modelle

Prof. Dr. Helmut Küchenhoff

Institut für Statistik, LMU München

SoSe 2014

Einführung und Beispiele

1 Das einfache lineare Regressionsmodell

2 Das multiple lineare Regressionsmodell

Quadratsummenzerlegung und statistische Inferenz im multiplen linearen Regressionsmodell

Diskrete Einflußgrößen: Dummy- und Effektkodierung, Mehrfaktorielle Varianzanalyse

Modelle mit diskreten Einflussgrößen

Bei der ANOVA geht es um den Vergleich von Mittelwerten.

Die einfaktorielle Varianzanalyse hat die primäre Fragestellung:
Sind die Mittelwerte von verschiedenen Gruppen gleich?

Diese Frage lässt sich als lineares Modell darstellen. Wir verwenden eine diskrete Variable, die die Gruppenzugehörigkeit beschreibt.

Dummycodierung

Wir betrachten ein nominales Merkmal C mit K Ausprägungen.

a) Einfache Dummy-Kodierung

$$Z_k(C) = \begin{cases} 1 \text{ für } C = k; \\ 0 \text{ für } C \neq k; \end{cases} \quad k = 1, \ldots, K \tag{4.1}$$

b) Effekt-Kodierung

$$Z_k^e(C) = \begin{cases} 1 \text{ für } C = k; \\ 0 \text{ für } C \neq k; C \neq K \quad k = 1, \ldots, K-1; \\ -1 \text{ für } C = K; \end{cases} \tag{4.2}$$

Einfache Varianzanalyse

Gegeben sei eine nominale Einflussgröße C mit K Ausprägungen (Gruppen). Der Zielgrößenvektor Y wird in die K Gruppen mit jeweils n_k Beobachtungen aufgeteilt:

$$Y = (Y_{11}, \ldots Y_{1n_1}, Y_{21}, \ldots, Y_{Kn_K})'$$

a) Mittelwertsmodell:

$$Y_{kl} = \mu_k + \varepsilon_{kl} \qquad l = 1, \ldots, n_k; \; k = 1, \ldots, K$$

$$Y = (Z_1(C) \ldots Z_K(C)) \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_K \end{pmatrix} + \varepsilon \tag{4.3}$$

Beispiel

Design-Matrix X für $K = 3$ Gruppen mit je $n_k = 2$ Beobachtungen pro Gruppe:

Die Regressionsgleichung lautet:

$$\begin{pmatrix} Y_{11} \\ Y_{12} \\ Y_{21} \\ Y_{22} \\ Y_{31} \\ Y_{32} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{12} \\ \varepsilon_{21} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{31} \\ \varepsilon_{32} \end{pmatrix}$$

$b)$ Effekt-Kodierung:

$$Y_{kl} = \mu + \tau_k + \varepsilon_{kl}; \qquad \sum_{k=1}^{K} \tau_k = 0$$

$$Y = (e \;\; Z_1^e(C) \ldots Z_{K-1}^e(C)) \begin{pmatrix} \mu \\ \tau_1 \\ \vdots \\ \tau_{K-1} \end{pmatrix} + \varepsilon \tag{4.4}$$

Design-Matrix X für $K = 3$ Gruppen mit je $n_k = 2$ Beobachtungen pro Gruppe.

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

c) Modell mit Referenzkategorie K:

$$Y_{kl} = \mu_K + \tau_k + \varepsilon_{kl}, \;\; \tau_K = 0;$$

$$Y = (e \;\; Z_1(C) \ldots Z_{K-1}(C)) \begin{pmatrix} \mu_K \\ \tau_1 \\ \vdots \\ \tau_{K-1} \end{pmatrix} + \varepsilon \tag{4.5}$$

Design-Matrix X für 3 Gruppen mit je 2 Beobachtungen pro Gruppe:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Nullhypothesen zum Test auf „Effekt von C“

a) $H_0 : \mu_1 = \mu_2 = \ldots = \mu_K$

b) $H_0 : \tau_1 = \tau_2 = \ldots = \tau_{K-1} = 0$

c) $H_0 : \tau_1 = \tau_2 = \ldots = \tau_{K-1} = 0$

Zusammenhang zwischen Kodierungen

Mittelwertsmodell:	$\mu_1, \ldots, \mu_K$	kein Intercept
Effektkodierung:	$\mu = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\mu_k$	$\leftrightarrow$ Intercept
	$\tau_k = \mu_k - \mu$ $\Leftrightarrow \mu_k = \mu + \tau_k$	„Unterschied zum Gesamtmittel“
Referenzkodierung:	$\mu = \mu_K$	$\leftrightarrow$ Intercept
	$\tau_k = \mu_k - \mu_K$ $\Leftrightarrow \mu_k = \mu_K + \tau_k$	„Unterschied zur Referenz“

Bemerkungen

- Alle 3 Kodierungen führen zu gleicher Modellanpassung (R^2)
- Parameter haben unterschiedliche Interpretation
- Parameter und deren Schätzungen aus verschieden Varianten direkt ineinander überführbar
- Modelle erweiterbar mit zusätzlichen Einflussgrößen

Modell der zweifaktoriellen Varianzanalyse

Wir betrachten zwei diskrete Einflussgrößen C und D mit K_1 bzw. K_2 Ausprägungen. Man spricht dann von einer zweifaktoriellen Varianzanalyse mit einem K_1-stufigen und einem K_2-stufigen Faktor. Hier ist die Mittelwertsdarstellung nicht möglich.

$a)$ Modell mit einfachen Effekten (Effektdarstellung)

$$Y = (e \;\; Z_1^e(C) \ldots Z_{K_1-1}^e(C) Z_1^e(D) \ldots Z_{K_2-1}^e(D)) \begin{pmatrix} \mu \\ \tau_1 \\ \vdots \\ \tau_{K_1-1} \\ \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_{K_2-1} \end{pmatrix} \qquad (4.6)$$

Test auf Effekt von C: $\quad H_0 : \tau_1 = \ldots = \tau_{K_1-1} = 0$

Test auf Effekt von D: $\quad H_0 : \gamma_1 = \ldots = \gamma_{K_2-1} = 0$

Interpretation:
τ_k, γ_l Abweichung vom Gesamtmittel der Kategorien

Beispiel: Designmatrix

Modell mit einem zweistufigen und einem dreistufigen Faktor und jeweils zwei Beobachtungen pro Faktorkombination

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

Beispiel: 2 kategoriale Einflussgrößen

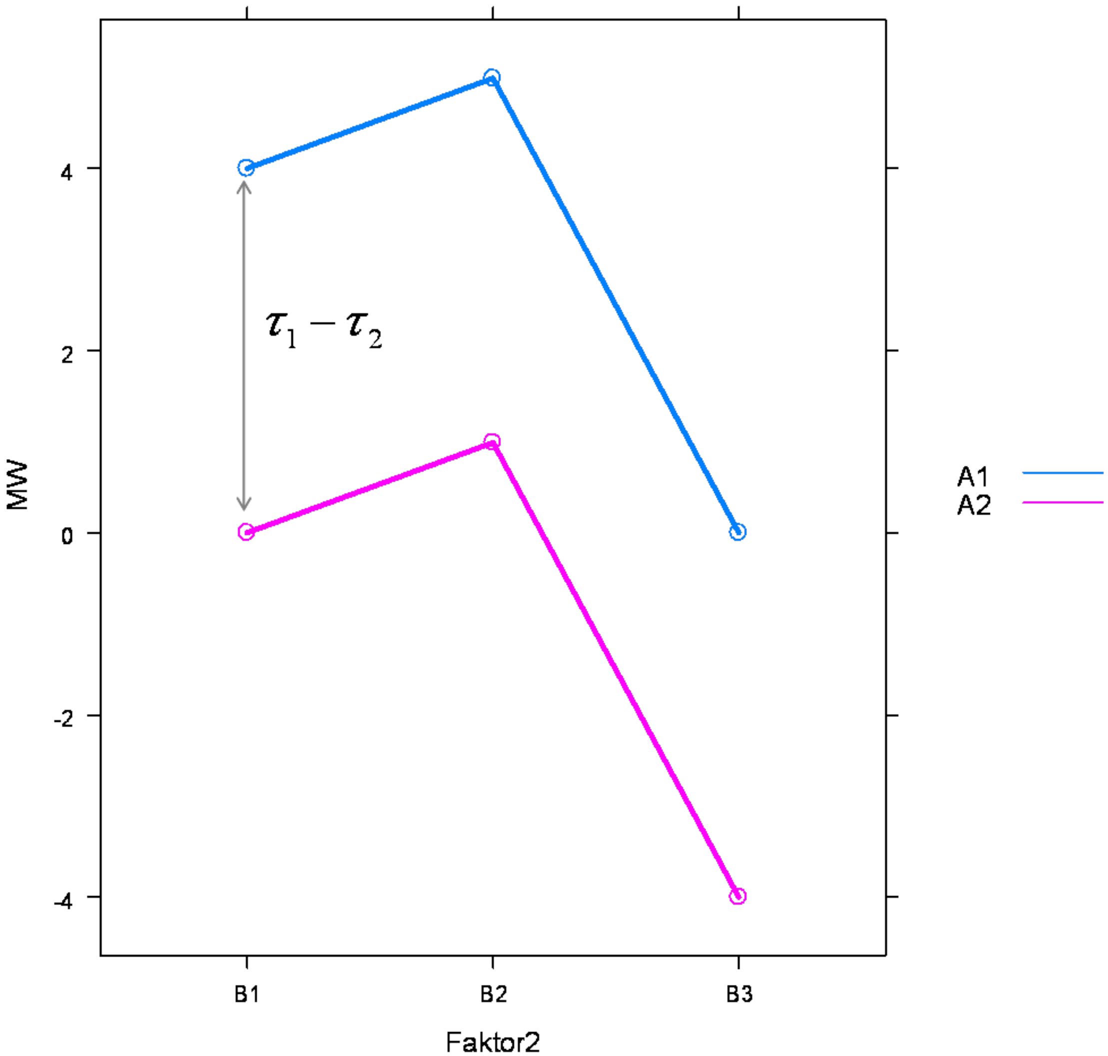
$\mu = 1$

Faktor A (2-stufig):	$\tau_1 = 2$	$\Rightarrow \tau_2 = -2$
Faktor B (3-stufig):	$\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 2$	$\Rightarrow \gamma_3 = -3$

Berechnung der Mittelwerte:

Faktor A	Faktor B	MW
1	1	$1 + 2 + 1 = 4$
1	2	$1 + 2 + 2 = 5$
1	3	$1 + 2 - 3 = 0$
2	1	$1 - 2 + 1 = 0$
2	2	$1 - 2 + 2 = 1$
2	3	$1 - 2 - 3 = -4$

Graphische Darstellung



Verlauf parallel
Abstand $\tau_1 - \tau_2$

Darstellung mit Referenz-Kodierung

$$Y = (e \;\; Z_1(C)\dots Z_{K_1-1}(C) Z_1(D)\dots Z_{K_2-1}(D)) \begin{pmatrix} \mu \\ \tau_1 \\ \vdots \\ \tau_{K_1-1} \\ \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_{K_2-1} \end{pmatrix} + \epsilon \quad (4.7)$$

Interpretation:
τ_k, γ_l Abweichung von der Referenzkategorie

Beispiel: Designmatrix

Modell mit einem zweistufigen und einem dreistufigen Faktor und jeweils zwei Beobachtungen pro Faktorkombination

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$b)$ Modell mit Interaktion

Interaktionen lassen sich durch Aufnahme aller Produktterme $Z_k^e(C)Z_l^e(D)$ modellieren:

$$E(Y) = (e, Z_1^e(C) ... Z_{K_2-1}(D), Z_1^e(C)Z_1^e(D) ... Z_{K_1-1}(C)Z_{K_2-1}(D)) \begin{pmatrix} \mu \\ \tau_1 \\ \vdots \\ \gamma_{K_2-1} \\ (\tau\gamma)_{11} \\ \vdots \\ (\tau\gamma)_{K_1-1,K_2-1} \end{pmatrix}$$

Test auf Interaktion:

$$H_0 : (\tau\gamma)_{11} = \ldots = (\tau\gamma)_{K_1-1,K_2-1} = 0$$

Beispiel

Design-Matrix X für 2-Faktor Modell mit einem zweistufigen und einem dreistufigen Faktor: (jeweils eine Beobachtung pro Merkmalskombination).

$$X\beta = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mu \\ \tau_1 \\ \gamma_1 \\ \gamma_2 \\ (\tau\gamma)_{11} \\ (\tau\gamma)_{12} \end{pmatrix}$$

Beispiel: 2 kategoriale Einflussgrößen mit Interaktion

$\mu = 1$

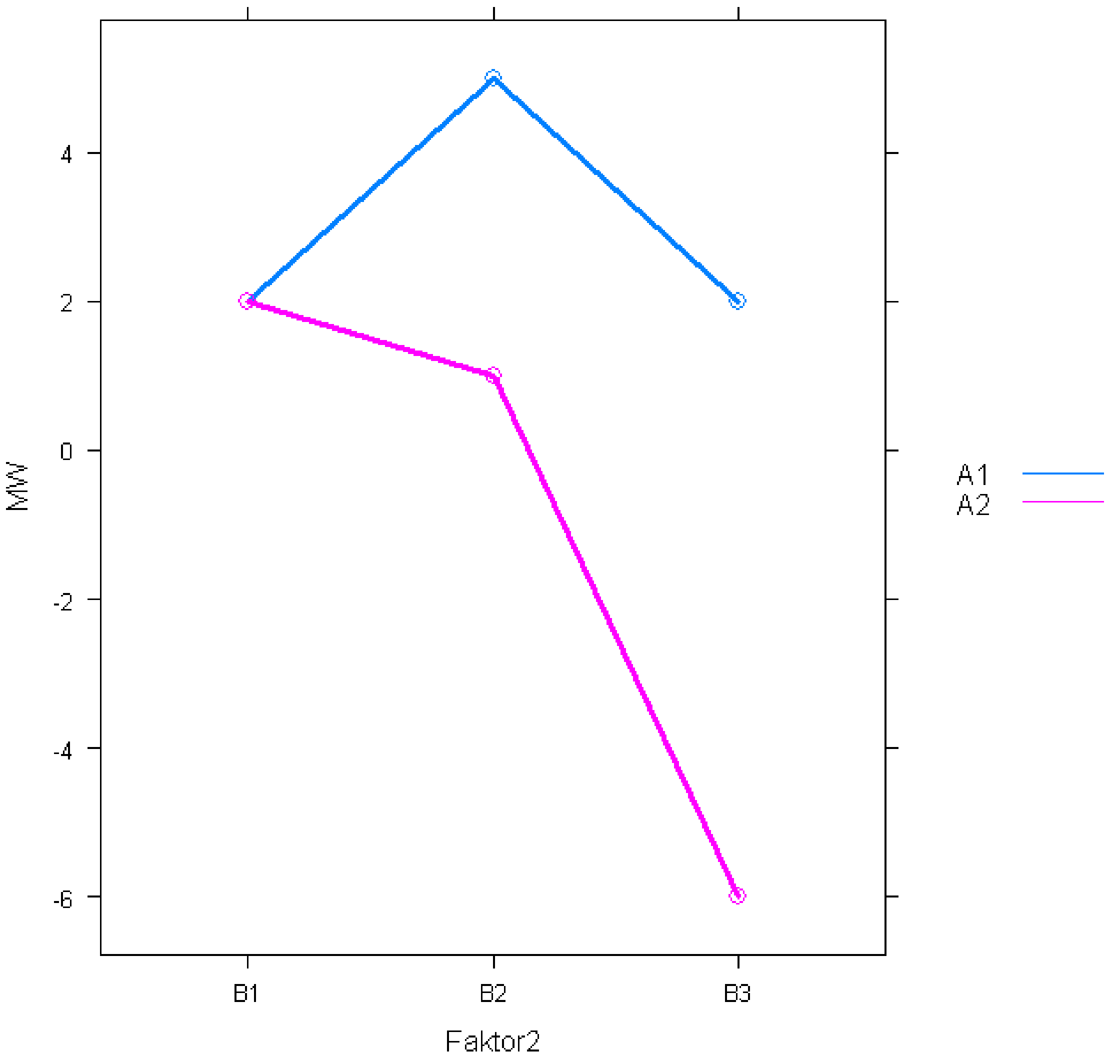
Faktor A (2-stufig): $\tau_1 = 2 \quad \Rightarrow \tau_2 = -2$
Faktor B (3-stufig): $\gamma_1 = 1, \gamma_2 = 2 \quad \Rightarrow \gamma_3 = -3$

Interaktion: $(\tau\gamma)_{11} = -2 \quad (\tau\gamma)_{21} = 2$
$(\tau\gamma)_{12} = 0 \quad (\tau\gamma)_{22} = 0$
$(\tau\gamma)_{13} = 2 \quad (\tau\gamma)_{23} = -2$

Berechnung der Mittelwerte:

Faktor A	Faktor B	MW
1	1	$1 + 2 + 1 - 2 = 2$
1	2	$1 + 2 + 2 + 0 = 5$
1	3	$1 + 2 - 3 + 2 = 2$
2	1	$1 - 2 + 1 + 2 = 2$
2	2	$1 - 2 + 2 + 0 = 1$
2	3	$1 - 2 - 3 - 2 = -6$

Graphische Darstellung



Verlauf unterschiedlich
$\Leftrightarrow$ Interaktion

Erweiterung auf Kombination von diskreten und stetigen Merkmalen (Kovarianzanalyse)

Beispiel für Design-Matrix X für $K = 3$ Gruppen mit je $n_k = 2$ Beobachtungen pro Gruppe und stetigem Merkmal x:

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & x_1 \\ 1 & 0 & 0 & x_2 \\ 0 & 1 & 0 & x_3 \\ 0 & 1 & 0 & x_4 \\ 0 & 0 & 1 & x_5 \\ 0 & 0 & 1 & x_6 \end{pmatrix} \beta = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \beta_4 \end{pmatrix}$$

Interpretation:
In den drei Gruppen drei parallele Geraden mit Achsenabschnitt α_i und Steigung β_4

Erweiterung auf Geraden mit versch. Steigung

Modell:

$$Y_{kl} = \alpha_k + \beta_k X_{kl} + \varepsilon_{kl} \tag{4.8}$$

Matrixdarstellung (3 Gruppen, 2 Beobachtungen pro Gruppe)

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & x_1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & x_2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & x_3 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & x_4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & x_5 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & x_6 \end{pmatrix} \beta = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \beta_3 \end{pmatrix}$$

Interaktion bedeutet Steigungen verschieden.

Test auf Interaktion: $\beta_1 = \beta_2 = \beta_3$

Darstellung mit Referenzkodierung

Modell:

$$
\begin{aligned}
Y_{kl} &= \alpha_3 + \alpha_k + \beta_3\, X_{kl} + \beta_k\, X_{kl} + \varepsilon_{kl} \qquad (k = 1, 2) \\
Y_{kl} &= \alpha_3 + \beta_3 X_{kl} + \varepsilon_{kl} \qquad (k = 3)
\end{aligned}
$$

Matrixdarstellung (3 Gruppen 2 Beobachtungen pro Gruppe)

$$
X = \begin{pmatrix}
1 & 1 & 0 & x_1 & x_1 & 0 \\
1 & 1 & 0 & x_2 & x_2 & 0 \\
1 & 0 & 1 & x_3 & 0 & x_3 \\
1 & 0 & 1 & x_4 & 0 & x_4 \\
1 & 0 & 0 & x_5 & 0 & 0 \\
1 & 0 & 0 & x_6 & 0 & 0
\end{pmatrix}
\beta = \begin{pmatrix}
\alpha_3 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \beta_3 \\ \beta_1 \\ \beta_2
\end{pmatrix}
$$

Interaktion bedeutet Steigungen verschieden.

Test auf Interaktion: $\beta_1 = \beta_2 = 0$

Typen von Quadratsummen

In der Literatur unterscheidet man 3 Typen von Quadratsummen:

Typ1 Sequentielle Quadratsummen

Typ2 Partielle Quadratsummen ohne höhere Interaktionsterme

Typ3 Partielle Quadratsummen

Beispiel mit Effekten X1 X2 X3 X1*X2 X1*X3 X2*X3 X1*X2*X3

	Variablen im Modell bei		
Effekt	Typ1	Typ3	Typ2
X1	-	alle anderen	X2 X3 X2*X3
X2	X1	alle anderen	X1 X3 X1*X3
X1*X2	X1 X2 X3	alle anderen	X1 X2 X3 X1*X3 X2*X3
X1*X2*X3	alle anderen	alle anderen	alle anderen

Beachte: Falls Interaktionen vorhanden sind, sind die einfachen Koeffizienten schwer direkt interpretierbar!

Beispiel: Vorher-Nachher Vergleich in randomisierter Studie

X1 :	Blutwert zum Zeitpunkt 1
X2 :	Blutwert zum Zeitpunkt 2
Z :	Gruppenzugehörigkeit (0= Placebo / 1= Verum) oder auch allgemeine Gruppierungsvariable

Fragestellung: Gibt es einen Unterschied zwischen den Gruppen ?

Variante 1: Betrachte Differenzen X2-X1 = D und
führe 2 Stichproben t-Test durch
Vorteil: Einfach und leicht interpretierbar

Variante 2: Regression $X2 = \beta_0 + \beta_1 X1 + \gamma * Z + \epsilon$
Teste die Nullhypothese: $H_0 : \gamma = 0$
Vorteil: „Regression to the mean“ und mögliche Abhängigkeit der Differenz vom Anfangswert wird berücksichtigt.