Vorlesung: Lineare Modelle

Prof. Dr. Helmut Küchenhoff

Institut für Statistik, LMU München

SoSe 2014

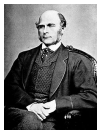
LMU LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN | Institut für Statistik | STABLAB Statistisches Beratungs Labor

LMU LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN | Institut für Statistik | STABLAB Statistisches Beratungs Labor

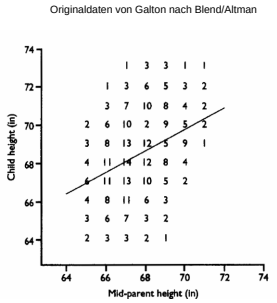
LMU LUDWIG-MAXIMILIANS-UNIVERSITÄT MÜNCHEN | Institut für Statistik | STABLAB Statistisches Beratungs Labor

Sir Francis Galton

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



Der Begriff Regression



Zusammenhang zwischen Größe der Eltern und ihrer Kinder

$$\begin{aligned} E(Y) &= \bar{Y} + 0.66(X - \bar{X}) \\ E(Y) &= 0.66X + \bar{Y} - 0.66\bar{X} \end{aligned}$$

Y: Größe des Kindes X: Größe der Eltern

Gibt es eine Midlife - Crisis ?

Daten über die Zufriedenheit von Personen

$$\begin{aligned} E(Y_t) &= \beta_0 + \beta_1 x_{1t} + \beta_2 x_{2t} + \beta_3 \log(x_{3t}) + \beta_4 x_{4t} + ... \\ &\quad + \beta_A AI + \beta_{A2} AI^2 \end{aligned}$$

x-Variablen: Gehalt, Geschlecht, Gesundheitsstatus etc.

$\longrightarrow$ **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 : Wachstumsparamter in Gruppe j (j=1: Kalk, j=2: kein Kalk)

$\longrightarrow$ **Kovarianzanalyse**

Pädagogik

Zusammenhang zwischen Lesefähigkeit und Lehrmethode

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

x_{1ij} : Zahl der Förderstunden
α_j : Klasseneffekt

$\longrightarrow$ **Gemischtes lineares Modell**

Medizin, Epidemiologie

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)

$\longrightarrow$ **Logistisches Regressionsmodell**

Das einfache lineare Regressionsmodell

$$\begin{aligned} Y_i &= \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i;\ i = 1, \ldots, n && (1.1)\\ E(\varepsilon_i) &= 0 && (1.2)\\ V(\varepsilon_i) &= \sigma^2 && (1.3)\\ \{\varepsilon_i \mid i = 1, \ldots, n\} &\text{ stoch. unabhängig} && (1.4)\\ \varepsilon_i &\sim N(0, \sigma^2) && (1.5) \end{aligned}$$

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:

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

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

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

Existenz und Berechnung des KQ-Schätzers

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

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

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

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

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

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

Interpretation der Modellparmeter I

$$\begin{aligned} Y_i &= \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i;\ i = 1, \ldots, n \\ E(Y|X) &= \beta_0 + \beta_1 x \end{aligned}$$

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 Modellparmeter II

$$\begin{aligned} Y_i &= \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i;\ i = 1, \ldots, n \\ E(Y|X) &= \beta_0 + \beta_1 x \end{aligned}$$

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).

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i;\ i = 1, \ldots, n \tag{1.1}$$

$$E(\varepsilon_i) = 0 \tag{1.2}$$

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

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

Eigenschaften des KQ-Schätzers II

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

$$V(\varepsilon_i) = \sigma^2 \tag{1.3}$$

$$\{\varepsilon_i \,|\, i = 1, \ldots, n\} \quad \text{stoch. unabhängig} \tag{1.4}$$

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

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

Eigenschaften des KQ-Schätzers III

3. Unter der NV-Annahme (1.5)

$$\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2) \tag{1.5}$$

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:

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

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

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

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

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:

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

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

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 $\hat{\beta}_0$:

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

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

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:

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

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

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

heißt **Bestimmtheitsmaß**.

Es gilt

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

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

Bemerkung

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

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

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

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

Beweis

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

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

Für den Erwartungswert und die Varianz des Prognosefehlers gilt:

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

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

Prognose II

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

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

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

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

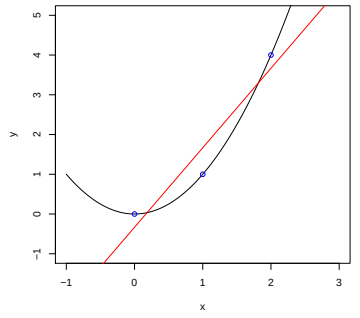
Gegeben sei ein quadratisches Modell:

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

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

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

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



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.