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

Das logistische Regressionsmodell

$$\pi_i = P(Y_i = 1|x_i) = G(x_i'\beta) \quad (9.1)$$

$$\ln \frac{\pi_i}{1-\pi_i} = x_i'\beta \quad (9.2)$$

$$Y_i, i = 1, \ldots, n \quad \text{unabhängig (bei gegebenem festen } X) \quad (9.3)$$

$$G(t) = (1+\exp(-t))^{-1} \quad (9.4)$$

Y_i: binäre Zielgröße
x_i: Vektor der Einflussgrößen
X: Design-Matrix der Einflussgrößen mit vollem Rang

Bezeichnungen

$\ln \frac{\pi_i}{1-\pi_i}$	:	„Logarithmierte Chance“ Log-odds
$x_i'\beta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \ldots + \beta_p x_p$	:	linearer Prädiktor
Funktion G	:	Response-Funktion (Inverse Link-Funktion)

Die Wahl von G (Verteilungsfunktion der logistischen Verteilung) als Responsefunktion ermöglicht folgende Interpretation:
Einfaches Modell:

$$P(Y=1|x_0) = G(\beta_0 + \beta_1 * x_0)$$

$$P(Y=1|x_0+1) = G[\beta_0 + \beta_1 * (x_0+1)]$$

$$\frac{P(Y=1|x_0+1)/(1-P(Y=1|x_0+1))}{P(Y=1|x_0)/(1-P(Y=1|x_0))} = exp(\beta_1)$$

$$\ln \frac{P(Y=1|x_0+1)}{1-P(Y=1|x_0+1)} - \ln \frac{P(Y=1|x_0)}{1-P(Y=1|x_0)} = \beta_1$$

Interpretation

Das logistische Regressionsmodell nimmt einen linearen Zusammenhang zwischen den „Log–odds“ von Y und den Einflussgrößen X an.

Interpretation:

- Wenn x_k um einen Einheit steigt, so ändert sich die logarithmierte Chance von Y um β_k.
- Wenn x_k um einen Einheit steigt, so ändert sich die Chance von Y um den Faktor $\exp(\beta_k)$.
- Das Odds Ratio (Chancenverhältnis) zwischen Y bei x_k und Y bei $x_k + 1$ ist $\exp(\beta)$.

W'keit	0.01	0.05	0.1	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.9	0.95	0.99
Odds	1/99	1/19	1/9	3/7	2/3	1	1.5	7/3	9	19	99
Log odds	-4.6	-2.9	-2.2	-0.85	-0.41	0	0.41	0.85	2.2	2.9	4.6

Bemerkungen

Die Varianten des multiplen linearen Regressionsmodells lassen sich direkt auf das logistische Modell übertragen:

- Behandlung von Guppenvergleichen (ANOVA) mit Hilfe von Indikatorvariablen
- Behandlung von diskreten Einflussgrößen: verschiedene Codierungen, Interaktionen, etc.
- Behandlung von stetigen Einflussgrößen (Polynome, Splines etc.)

Beachte:
Beim logistischen Modell „fehlt“ der Varianz-Parameter σ,
da $Var(Y) = E(Y) * [1 - E(Y)]$
Weiter ist keine Verteilungsannahme nötig, da Y immer Bernoulli-verteilt ist.

Beispiele

- Y: Kreditwürdigkeit,
  X: Personenmerkmale
- Y: Auftreten einer Krankheit innerhalb einer bestimmten Zeit,
  X: Exposition, Geschlecht, Alter etc.
- Y: Auffinden der korrekten Blüte,
  X: Zeit (Trend), Art (Fledermaus)
- Y: Präferenz für eine Partei,
  X: Persönlichkeitsmerkmale
- Y: Bestehen eines Tests,
  X: Lehrmethode, Geschlecht etc.

Logistische Regression als Klassifikationsproblem

- Prognose in der Logistischen Regression entspricht Klassifikationsproblem mit 2 Gruppen
- Analogien zu Verfahren der Diskriminanzanalyse
- Diskriminanzregeln aus logistischer Regression möglich

ML-Schätzung im logistischen Regressionsmodell

Sei das Modell (9.1)–(9.4) gegeben.

$$\hat{\beta}_{ML} := \arg\max L(\beta) = \arg\max \ln L(\beta) \quad (9.5)$$

$$L(\beta) = \prod_{i=1}^{n} G(x_i'\beta)^{Y_i}(1 - G(x_i'\beta))^{1-Y_i} \quad (9.6)$$

$$\ln L(\beta) = \sum_{i=1}^{n} Y_i \ln(G(x_i'\beta)) + (1 - Y_i)\ln(1 - G(x_i'\beta)) \quad (9.7)$$

Ableiten nach β und Null setzen liefert unter Benutzung von $G' = G(1 - G)$ die Score-Gleichungen für $\hat{\beta}_{ML}$.

$$s(\hat{\beta}_{ML}) := \sum_{i=1}^{n}(Y_i - G(x_i'\hat{\beta}_{ML}))x_i = 0. \quad (9.8)$$

Eigenschaften des ML-Schätzers

Die allgemeine Theorie der Maximum-Likelihood-Schätzung liefert:
Für $n \to \infty$ gilt unter Regularitätsbedingungen:

$$\hat{\beta}_{ML} \to N(\beta, F^{-1}(\beta)) \quad (9.9)$$

$$F(\beta) = X'D(\beta)X \quad (9.10)$$

$$D(\beta) = \mathrm{diag}\{(G(x_i'\beta)(1 - G(x_i'\beta))\} \quad (9.11)$$

$$\hat{\beta}'F(\beta)\hat{\beta} \to \chi^2(p') \quad (9.12)$$

- Die asymptotische Varianzmatrix ergibt sich als Inverse der Fischer-Information (negative Ableitung der Score-Funktion)
- Die asymptotische Varianzmatrix entspricht auch der Varianzmatrix aus der gewichteten (heteroskedastischen) Regression, da $Var(Y) = D(\beta) = \mathrm{diag}(G(x_i'\beta)(1 - G(x_i'\beta)))$
- Die numerische Berechnung des ML–Schätzers erfolgt nach der Methode der „iterierten gewichteten kleinsten Quadrate" (IWLS Iteratively Weighted Least Squares)

Existenz und Eindeutigkeit des ML-Schätzers im logistischen Modell

Eindeutigkeit:
Da die Likelihood-Funktion konkav ist, ist die Lösung der Score-Gleichung immer eindeutig

Existenz:
Der ML- Schätzer existiert $\iff$ Die Werte 0 und 1 sind nicht linear trennbar, d.h. es existiert kein α mit $Y = 1$ für $x'\alpha > 0$ und $Y = 0$ für $x'\alpha < 0$
Im Fall der Nicht- Existenz geht mindestens eine Komponente gegen ∞.
Im einfachen Modell bedeutet die Bedingung, dass Y=1 für $x > c$ und Y=0 für $x < c$.

Inferenz im logistischen Regressionsmodell

Beachte:
Alle Aussagen gelten - im Gegensatz zum linearen Regressionsmodell - nur asymptotisch, d.h. für hinreichend große Stichprobenumfänge!

Wald-Konfidenzintervalle:
Wir benutzen die asymptotische Normalität und erhalten folgende Konfidenzintervalle für β zum Niveau α :

$$\hat{\beta}_k \pm \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_k} z_{1-\alpha/2}$$

$$\hat{\sigma}_{\hat{\beta}_k} = \sqrt{c_{kk}} \text{ (k-tes Diagonalelement der Matrix } F^{-1}(\hat{\beta}))$$

Für die Odds-ratios $\exp(\beta_k)$ ergibt sich das transformierte Konfidenzintervall zum Niveau α :

$$exp\left[\hat{\beta}_k \pm \hat{\sigma}_{\hat{\beta}_k} z_{1-\alpha/2}\right]$$

Da kein Varianzparameter zu schätzen ist, kommt die t-Verteilung hier nicht vor.

Wald-Test für die lineare Hypothese

Sei das logistische Regressionsmodell (9.1)–(9.4) gegeben.
$H_0 : A\beta = c$ mit rg(A) = a.

Analog zum linearen Modell wird folgende quadratische Form betrachtet:

$$W = (A\hat{\beta} - c)'(AF^{-1}(\hat{\beta})A')^{-1}(A\hat{\beta} - c)$$

W heißt Wald-Statistik.

Aus der asymptotischen Normalität folgt unmittelbar:

$$W \overset{as}{\sim} \chi^2(a)$$

Mit dieser Statistik lässt sich die allgemeine lineare Hypothese testen.

Likelihood-Quotienten-Test für die lineare Hypothese

Sei das logistische Regressionsmodell (9.1)–(9.4) gegeben.
$H_0 : A\beta = c$ mit rg(A)=a.

Wir definieren folgende Teststatistik:

$$\begin{aligned} LQ &= -2\left\{\ln L(\hat{\hat{\beta}}) - \ln L(\hat{\beta})\right\} \\ \hat{\hat{\beta}} &: \text{ML-Schätzer unter} H_0 \end{aligned}$$

Aus der allgemeine Theorie von Likelihood-Quotienten-Tests folgt:
Es gilt unter H_0:

$$LQ \overset{as}{\sim} \chi^2(a)$$

Beachte: Der LQ-Test ist mit dem Wald-Test für endliche Stichproben nicht äquivalent. Äquivalenz gilt nur asymptotisch.

Likelihood-Quotienten-Konfidenzintervalle

Mit Hilfe des LQ-Tests lassen sich auch Konfidenzintervalle zum Niveau α konstruieren:

$$KI := \{\tilde{\beta}_k | H_0 : \beta_k = \tilde{\beta}_k \text{ wird mit LQ-Test zum Niveau } \alpha \text{ nicht abgelehnt}\}$$

Devianz im logistischen Modell

Analog zur ANOVA-Tafel betrachtet man im logistischen Modell die Log-Likelihood als Maß für die Modellgüte: Dabei wird definiert:

Modell mit Konstante (SST):	$P(Y_i = 1) = G(\beta_0)$
Modell (SSE):	$P(Y_i = 1) = G(x_i'\beta)$
"volles Modell"	$P(Y_i = 1) = p_i$

Von diesen Modellen wird jeweils der Wert von -2 log(L) verglichen.

Das logistische Modell für gruppierte Daten I

Wir betrachten das logistische Regressionsmodell mit **gruppierten** Daten:

Jeweils n_j Datenpunkte werden zu einer Gruppe zusammengefasst. Dabei sind in einer Gruppe die Kovariablen identisch.

Sei $\hat{\pi}_j := G(x_j'\hat{\beta})$.
Y_j : Anzahl der Erfolge in Gruppe j.

Das Modell ist dann:

$$Y_j|x_j \sim B(n_j, G(x_j'\beta)), \qquad j = 1, \dots, g \tag{9.13}$$

Das logistische Modell für gruppierte Daten II

$$D = -2 \sum_{j=1}^{g} (\ln L(\hat{\beta}) - \ln L(y_j)) \tag{9.14}$$

heißt **Devianz**.

Es gilt:

$$D = 2 \sum_{j=1}^{g} y_j \ln \frac{y_j/n_j}{G(x_j'\hat{\beta})} + (n_j - y_j) \ln \frac{(n_j - y_j)/n_j}{(1 - G(x_j'\hat{\beta}))} \tag{9.15}$$

Anpassungstests

a) Pearson-Statistik

$$\chi_P^2 = \sum_{j=1}^{g} n_j \frac{(y_j/n_j - G(x'\hat{\beta}))^2}{\hat{\pi}_j(1 - \hat{\pi}_j)}$$

b) Devianz (siehe (9.14)) Verteilungsapproximation $(n_i/n \to \lambda_i)$

$$\chi_p^2, D, \overset{(a)}{\sim} \chi^2(g - p')$$

c) Bei kleinen Gruppenumfängen oder im Fall $n_i = 1$:
Hossmer-Lemeshow-Test
Bilde ca. g = 10 Gruppen nach der Größe des linearen Prädiktors $x'\hat{\beta}$ und bilde Anpassungsstatistik wie unter a). Die Testverteilung ist ein $\chi^2(g - 2)$-Verteilung.

Residualanalyse I

Wir betrachten wie oben das logistische Regressionsmodell mit gruppierten Daten. Sei $\hat{\pi}_j := G(x_j'\hat{\beta})$.

a) Devianz-Residuen

$$d_j = \text{sign}(y_j - n_j\hat{\pi}_j)\sqrt{y_j \ln \frac{y_j/n_j}{\hat{\pi}_j} + (n_j - y_j) \ln \frac{(n_j - y_j)/n_j}{(1 - \hat{\pi}_j)}} \tag{9.16}$$

b) Pearson-Residuen

$$r_j = \frac{y_j - n_j\hat{\pi}_j}{\sqrt{n_j\hat{\pi}_j(1 - \hat{\pi}_j)}} \tag{9.17}$$

Residualanalyse II

c) Standardisierung der Residuen

$$H := D^{\frac{1}{2}} X (X'DX)^{-1} X' D^{\frac{1}{2}} \quad (9.18)$$
$$D = \text{diag}(n_j \hat{\pi}_j (1 - \hat{\pi}_j)) \quad (9.19)$$
$$d_j^* := d_j / \sqrt{1 - h_{jj}} \quad (9.20)$$
$$r_j^* := r_j / \sqrt{1 - h_{jj}} \quad (9.21)$$

d) Likelihood-Residuen

$$lr_j := \text{sign}(y_j - n_j G(x_j' \beta)) \sqrt{2(\ln L(\tilde{\beta}, \hat{\gamma}_j) - \ln L(\hat{\beta}))} \quad (9.22)$$

$L(\tilde{\beta}, \hat{\gamma}_j)$: Likelihood des Modells mit dem der zusätzlichen Indikatorvariablen für die Beobachtung j mit zugehörigem Parameter γ_j.

ROC-Kurve

Allgemein
$Y = 1 \longrightarrow$ Ausfall (krank)
$Y = 0 \longrightarrow$ kein Ausfall (gesund)
In der medizinischen Literatur ist das Testergebnis m:

$$\hat{Y}_i = 1 \Leftrightarrow m_i \geq c \quad (9.23)$$

In der Literatur zum Kreditrisiko ist der Score s:

$$\hat{Y}_i = 1 \Leftrightarrow s_i \leq c \quad (9.24)$$

c ist dabei ein Grenzwert. Beide Ansätze sind offensichtlich äquivalent: Betrachte dazu $m_i = -s_i$

Sensitivität und Spezifität

Richtig Positiv = Sensitivität:

$$(m) \quad P(\hat{Y} = 1 | Y = 1) = P(m \geq c | Y = 1) = S_1(c) \quad (9.25)$$
$$(k) \quad P(\hat{Y} = 1 | Y = 1) = P(s \leq c | Y = 1) = F_1(c) \quad (9.26)$$

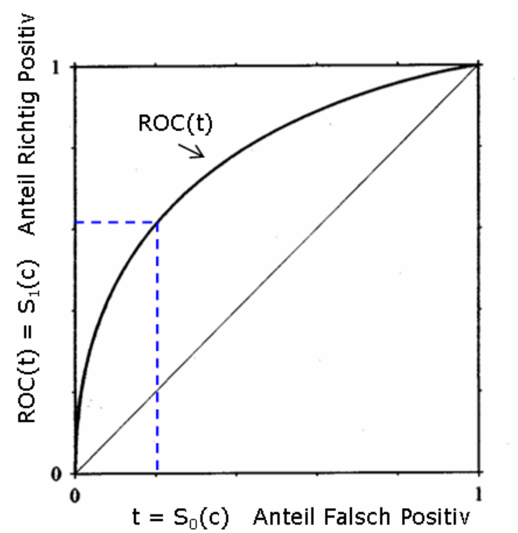
$S_1(c)$ stellt die Survivorfunktion dar, $F_1(c)$ die Verteilungsfunktion.

Falsch Positiv = 1- Spezifität:

$$(m) P(\hat{Y} = 1 | Y = 0) = P(m \geq c | Y = 0) = S_0(c) \quad (9.27)$$
$$(k) P(\hat{Y} = 1 | Y = 0) = P(s \leq c | Y = 0) = F_0(c) \quad (9.28)$$

Die ROC-Kurve besteht aus den Punkten $(S_0(c), S_1(c))$ bzw. $(F_0(c), F_1(c))$.

Beispiel für ROC-Kurve



Logistische Regression und ROC- Kurve

$$m_i = G(x_i'\beta)$$
$$m_i = x_i'\beta$$

Beachte die Invarianz der ROC Kurve bzgl. monotoner Funktionen! Die Verteilung von F_0, F_1 bzw. S_0, S_1 kann aus den Daten geschätzt werden $\Rightarrow$ ROC-Kurve

Alternative: Schätze F_0, F_1 bzw. S_0, S_1 aus Validierungsdaten.

Maß zur Bewertung der Kurve: AUC

$$AUC = \int_{t=0}^{1} ROC(t)dt \qquad (9.29)$$

Dies stellt die Fläche unter der Kurve dar.

Es gilt:

$$AUC = P(m_1 \leq m_0) \qquad (9.30)$$

m_1 ist dabei aus der Verteilung $m|Y = 1$
m_0 ist dabei aus der Verteilung $m|Y = 0$

Daher ist das empirische AUC:

$$\widehat{AUC} = \frac{N_c}{N} \qquad (9.31)$$

Dabei bezeichnet N_c die Anzahl der konkordanten Paare und N die Anzahl der Paare mit unterschiedlichem Y.
Mit N_d gleich der Anzahl der diskordanten Paare ist der GINI dann:

GINI- Koeffizient

Normierte Fläche zwischen Winkelhalbiernder und ROC- Kurve

$$GINI = 2 \cdot (AUC - \frac{1}{2}) = 2 \cdot AUC - 1 \qquad (9.32)$$

$$\widehat{GINI} = \frac{N_c - N_d}{N} \qquad (9.33)$$

Der empirische GINI entspricht dem Somers D.

Die logistische Regression für Fall-Kontroll-Studien

Sei in der Grundgesamtheit folgende Beziehung gegeben:

$$P_0(Y = 1|X = x) = G(\alpha + \beta x) \qquad (9.34)$$

mit $G(t) = (1 + \exp(-t))^{-1}$
X: Exposition
Y: Erkrankung

Es wird nun aus der GG gezogen:
n_1 Fälle $(Y = 1)$ und n_2 Kontrollen $(Y = 0)$

Gesucht ist

$$P_S(Y = 1|X = x) \qquad (9.35)$$

Mit P_S werden die Wahrscheinlichkeiten (Dichten) in der Stichprobe bezeichnet, mit P_0 die in der GG.

Berechnung von P_S I

$$P_S(Y=1|X=x) = \frac{P_S(Y=1, X=x)}{P_S(X=x)} =$$
$$\frac{P_S(Y=1)P_S(X=x|Y=1)}{P_S(Y=1)P_S(X=x|Y=1)+P_S(Y=0)P_S(X=x|Y=0)} =$$
$$\frac{c_1 P_0(X=x|Y=1)}{c_1 P_0(X=x|Y=1)+c_2 P_0(X=x|Y=0)}$$

Die letzte Identität gilt wegen

$$P_0(X=x|Y=1) = P_S(X=x|Y=1) \qquad (9.36)$$

und mit $c_1 = \frac{n_1}{n_1+n_2}$ und $c_2 = \frac{n_2}{n_1+n_2}$

$$c_1 P_0(X=x|Y=1) = \frac{c_1}{P_0(Y=1)} P_0(X=x)P_0(Y=1|X=x)$$
$$c_2 P_0(X=x|Y=0) = \frac{c_2}{P_0(Y=0)} P_0(X=x)P_0(Y=0|X=x)$$

Berechnung von P_S II

Mit $\frac{c_1}{P_0(Y=1)} = d_1$ und $\frac{c_2}{P_0(Y=0)} = d_2$ folgt:

$$\begin{aligned} P_S(Y=1|X=x) &= \frac{d_1 P(Y=1|X=x)}{d_1 P(Y=1|X=x)+d_2(1-P(Y=1|X=x))} \\ &= \frac{1}{1+\frac{d_2}{d_1}\frac{1-G(\alpha+\beta x)}{G(\alpha+\beta x)}} \\ &= \frac{1}{1+\exp(-\alpha-\ln(\frac{d_1}{d_2})-\beta x)} \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung folgt aus $\frac{1-G(t)}{G(t)} = \frac{1}{G(t)} - 1 = \exp(-t)$.

Berechnung von P_S III

Insgesamt gilt:

$$P_S(Y=1|X=x) = G(\alpha + \ln\left(\frac{d_1}{d_2}\right) + \beta x) \qquad (9.37)$$

Die Auswertung bezüglich β kann also durch eine logistische Regression erfolgen. Der Parameter α in der Grundgesamtheit kann dabei nicht geschätzt werden.