Was ist Regression?

Statistik II

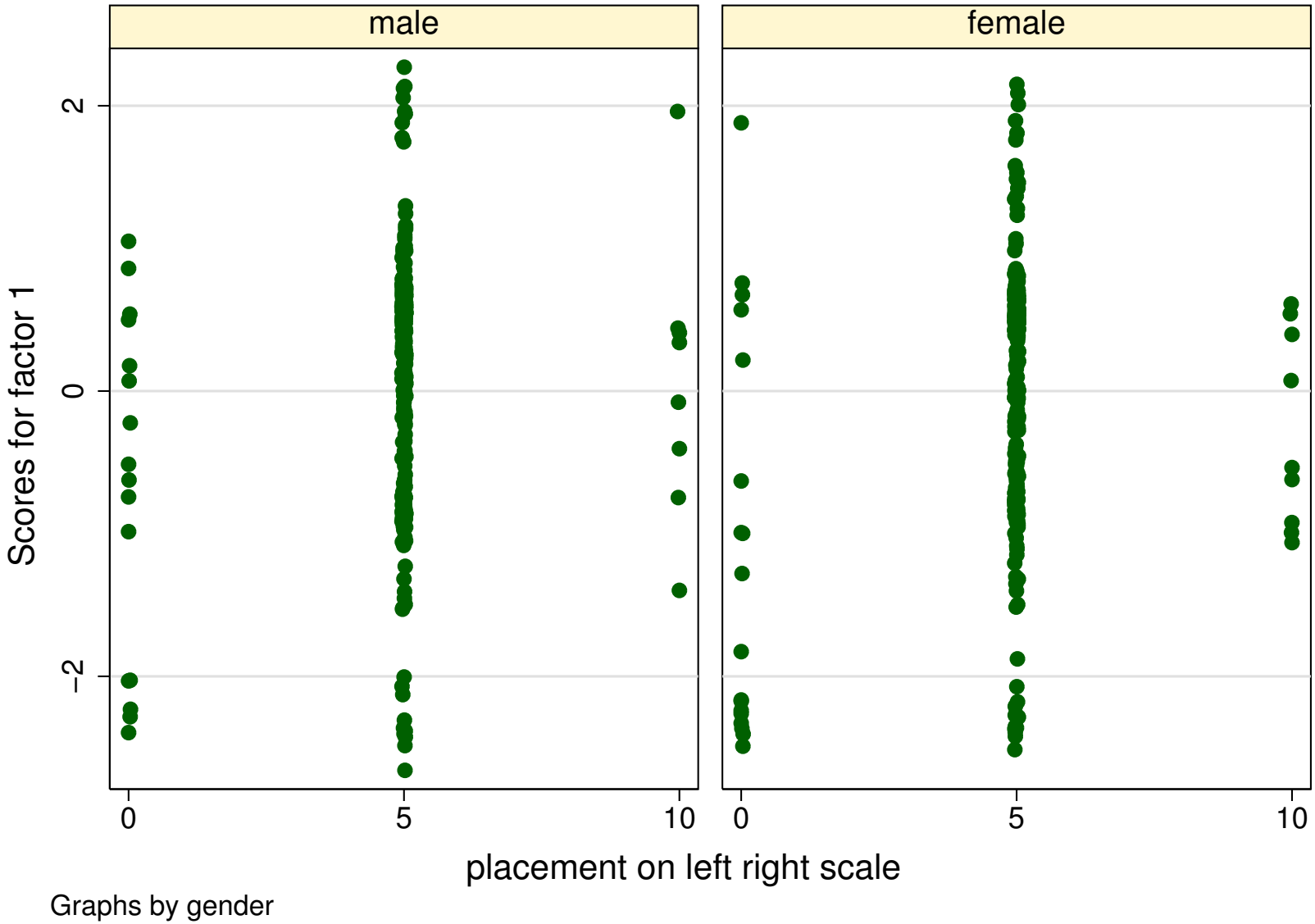
Übersicht

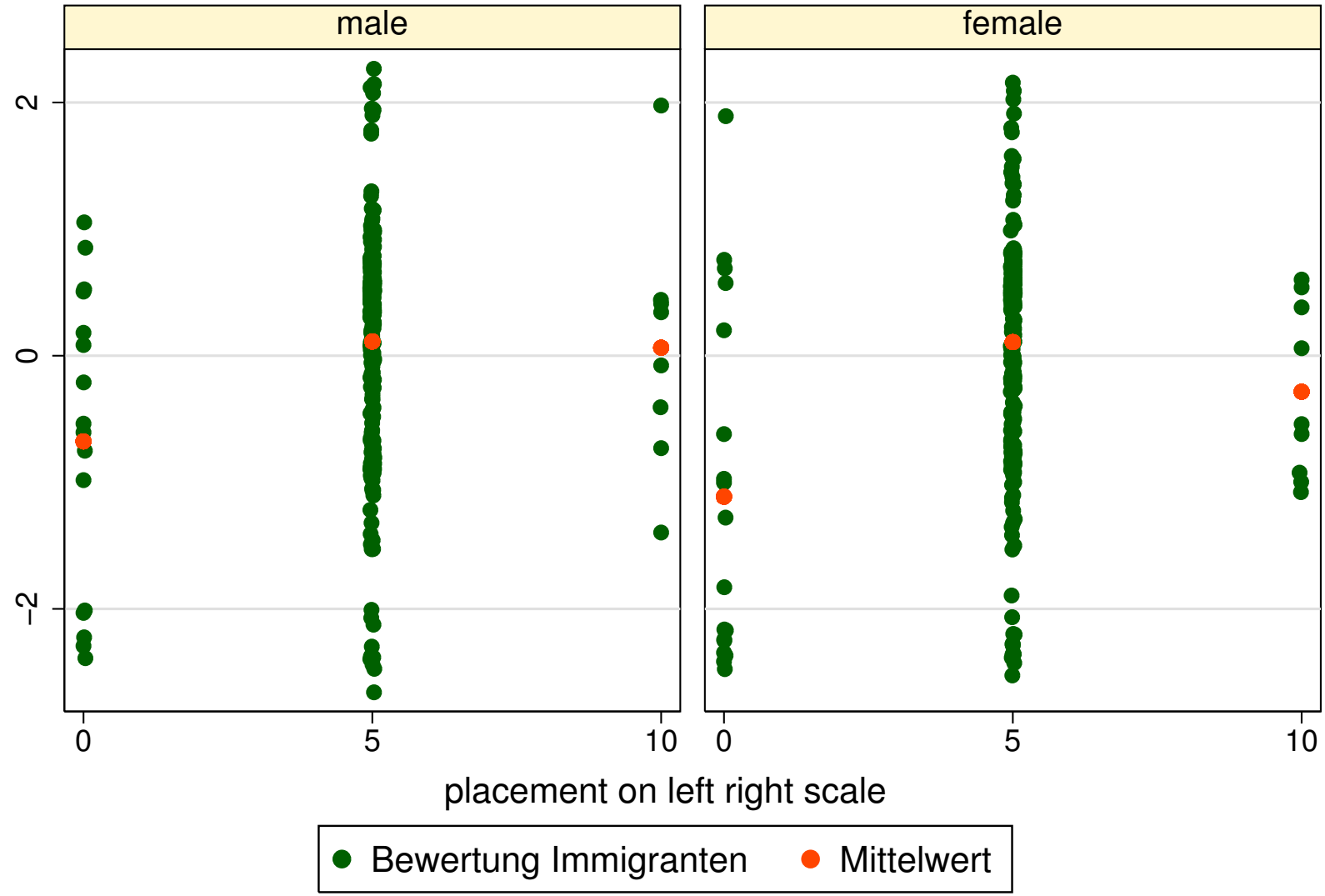
Literatur für heute

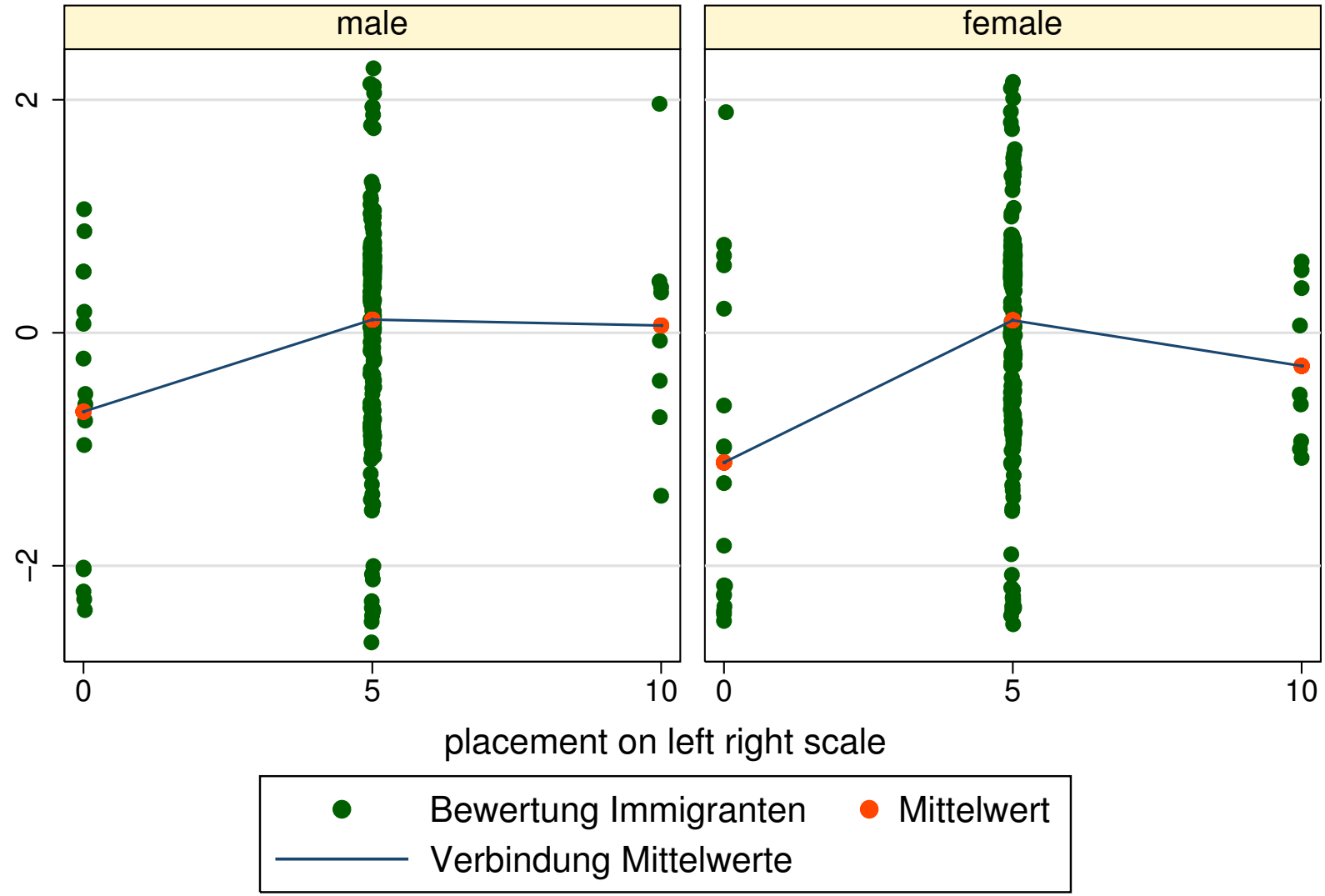
- Berk (2004, S. 13-17, 39-56) und
- Fox (1997, S. 86-88, 101, 204-205, 212-213)
- (beides im ReaderPlus)

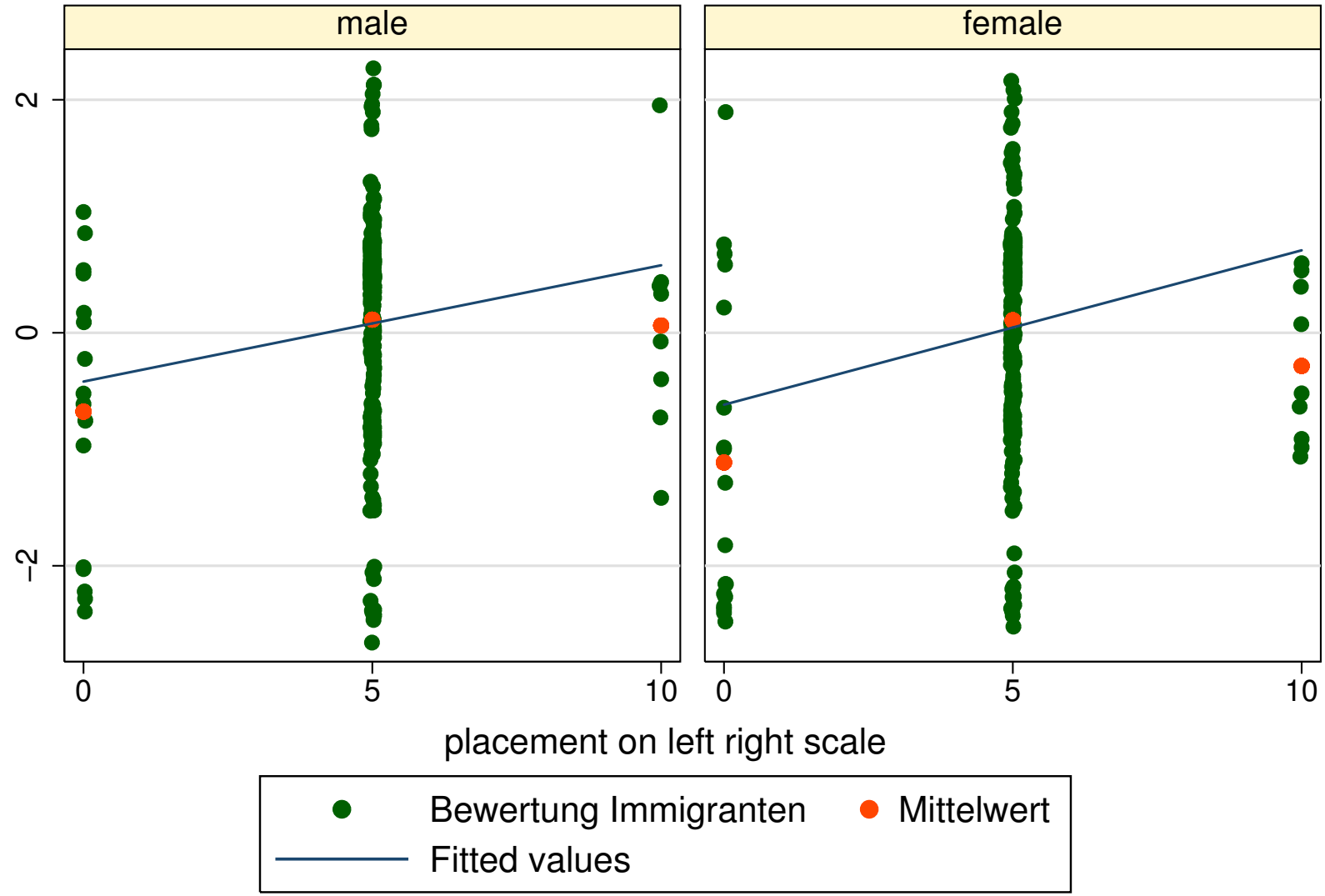
Literatur für nächste Woche

- Agresti ch. 10


male
female
Scores for factor 1
2
0
−2
0
5
10
placement on left right scale
Graphs by gender


male
female
2
0
−2
0
5
10
placement on left right scale
Bewertung Immigranten
Mittelwert
Graphs by gender


male
female
2
0
−2
0
5
10
placement on left right scale
Bewertung Immigranten
Mittelwert
Verbindung Mittelwerte
Graphs by gender


male
female
2
0
−2
0
5
10
placement on left right scale
Bewertung Immigranten
Mittelwert
Fitted values
Graphs by gender

Was ist Regression?

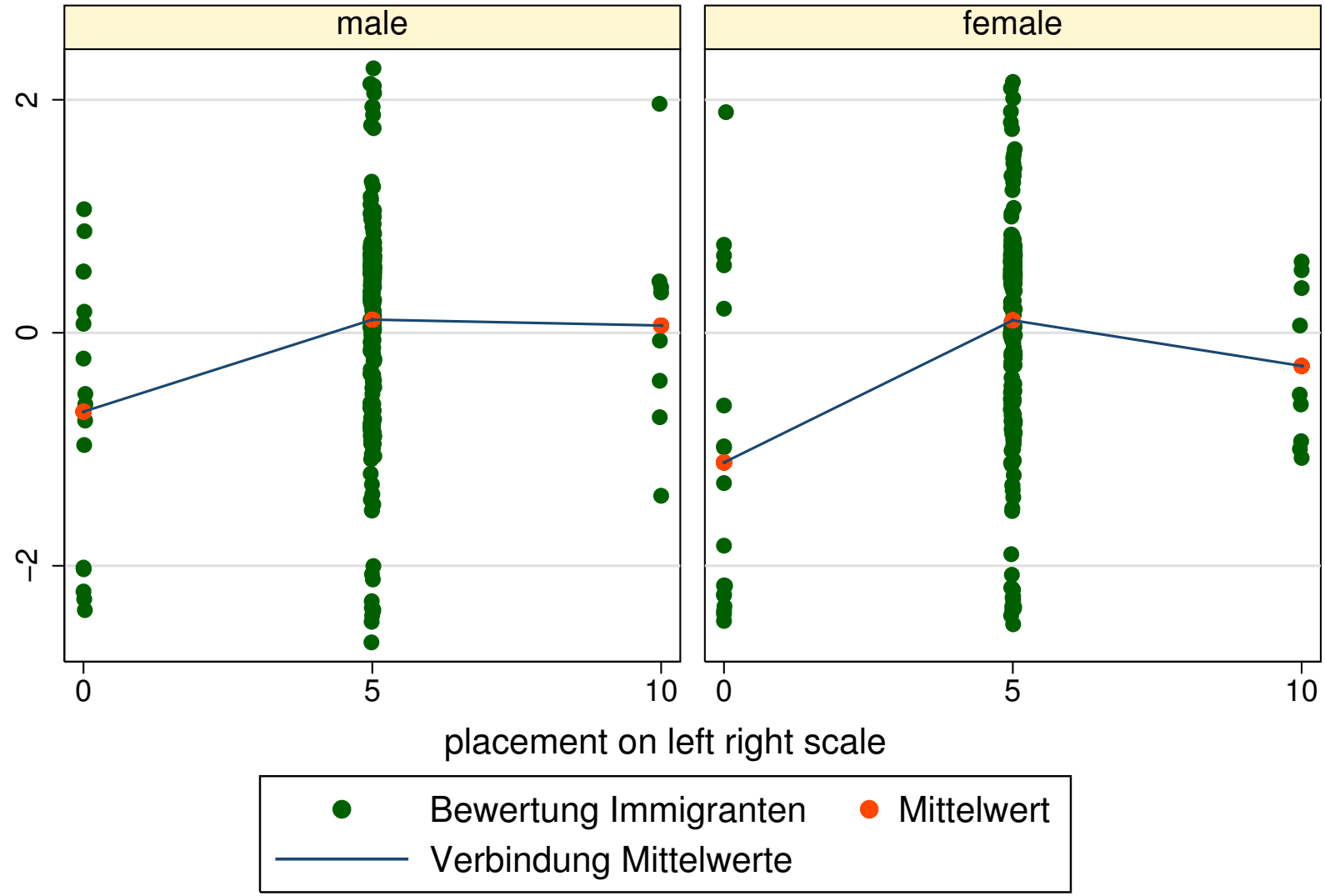
- Regression ist der Oberbegriff für Verfahren, ...
- die die *konditionale* Verteilung einer Variablen y...
- in Abhängigkeit von einer oder mehreren anderen Variablen $x_1, x_2 \ldots x_k$ beschreiben

Was ist eine „konditionale Verteilung“?

- Verteilung von y (Mittelwert, Streuung etc.) ...
- innerhalb von Subgruppen, die durch $x_1, x_2 \ldots x_k$ definiert sind

Was ist Regression?

- Die konditionalen Mittelwerte können durch eine glatte Linie beschrieben werden
- Übergang zum Modell: Annahmen über die Eigenschaften der Linie kommen von außen
- „Abhängige“ / „unabhängige“ Variable kommen ebenfalls von außen
- Das Beispiel zeigt u. a.
  - Mehrere unabhängige Variablen
  - Kategoriale unabhängige Variablen
  - Interaktion
  - Probleme mit der Linearitätsannahme


male
female
2
0
−2
0
5
10
placement on left right scale
Bewertung Immigranten
Mittelwert
Verbindung Mittelwerte
Graphs by gender

Wie sieht das Standardmodell aus?

Wie sieht das Standardmodell aus?

$$\begin{aligned} y =& \alpha + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 \cdots + \epsilon \\ =& \beta_0 x_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 \cdots + \epsilon \\ & \text{mit } x_0 = 1 \text{ für alle Einheiten} \end{aligned}$$

Welche Symbole werden verwendet?

- Nomenklatur oft wenig einheitlich
- Grundregeln:
  1. y für „abhängige“ Variable, x für „unabhängige“ Variable
  2. Variablen, Parameter und Untersuchungseinheiten kann man mit einem Index durchnumerieren: $x_1, x_2 \ldots x_k$
  3. Lateinische Buchstaben für Variablen und Parameter in der Stichprobe,
  4. Griechische Buchstaben für die unbekannten Parameter der Grundgesamtheit

Welche Symbole werden verwendet?

- Nomenklatur oft wenig einheitlich
- Grundregeln:
  5. Variablen erkannt man am *Kursivdruck*
  6. Für Vektoren verwendet man (griechische oder lateinische) Kleinbuchstaben in **Fettdruck**
  7. Für Matrizen verwendet man (griechische oder lateinische) Großbuchstaben in **Fettdruck**
  8. Ein „Dach“ über einem Parameter (z. B. $\hat{\beta}$) zeigt an, daß es sich um eine Schätzung handelt (wird oft weggelassen)

Was ist eine Zufallsvariable?

- Zufallsvariablen Ergebnis von Zufallsexperimenten
- Zufallsvariablen im Regressionsmodell
  - Zufällige Einflüsse auf einen Fall
  - Zufällige Variation der Schätzungen bei wiederholter Stichprobenziehung
- Zufallsexperimente
  - Können theoretisch beliebig oft wiederholt werden
  - Einzelergebnisse hängen vom Zufall ab, Verteilung der Ergebnisse ist aber bekannt
  - Bei häufiger Wiederholung nähert sich die empirische Verteilung der theoretischen Verteilung an
- Ziehung einer Zufallsstichprobe ist ein Zufallsexperiment
- Deshalb sind Stichprobenkennwerte und Modellparameter ebenfalls Zufallsvariablen

Was ist eine Zufallsvariable?

- Im Einzelfall weiß man nicht, welchen Wert die Variable annimmt
- Aber: Ausprägungen von Zufallsvariablen sind nicht willkürlich, sondern höchst regelmäßig verteilt
- Die Form der Verteilung der Werte einer Zufallsvariablen ist in der Regel bekannt / wird angenommen
- Zufallsvariablen (und ihre Verteilungen) können diskret oder stetig sein
- *Einfaches lineares Regressionsmodell: stetige Zufallsvariablen wichtig*

Was ist der konzeptionelle Status eines Regressionsmodells?

„To err is human, to forgive divine, but to include errors into your design is statistical“ (Leslie Kish)

„All models are wrong. Some are useful“ (George Box)

Was will uns Kish sagen?

- Abhängige Variable kann niemals vollständig durch $x_1, x_2 \ldots x_k$ erklärt werden
- Zufällige/als zufällig betrachtete Einflüsse Bestandteil des Modells (im linearen Modell ϵ)
- Diese Art von „Fehlern“ ist aus Sicht des Modells völlig unproblematisch

Was will uns Box sagen?

- Modelle niemals eine vollständige Abbildung der Wirklichkeit, sondern immer extreme Vergröberung
- Z. B. Auswahl unabhängigen Variablen, Linearitätsannahme
- Ist das Modell dem Forschungsproblem angemessen?
  - Instrumentalismus / Idealisierung (Friedman): Gute Prognosen, Problem: Stabilität der Randbedingungen?
  - Realismus / Abstraktion: Realistische Beschreibung, Problem: Komplexität, „Overfitting“

Was ist der konzeptionelle Status eines Regressionsmodells?

Regressionsmodell

- Hochgradig vereinfachte
- Nicht unbedingt realistische
- Mathematisch formalisierte
- Beschreibung der sozialen Wirklichkeit als Funktion von
  - systematischen und
  - zufälligen Einflüssen

Was können wir mit den Parametern eines Modells anfangen?

- *Beschreibung*:
  - Modell erfaßt wesentliche Aspekte einer konkreten Verteilung von Datenpunkten
  - Keine weitergehenden Schlüsse, Mittel zur Verdichtung der Information
- *Inferenz*:
  - Von den konkreten Daten soll auf etwas anderes geschlossen werden, aber auf was?
  - (Fast völlig) unproblematisch im Fall einer Zufallsstichprobe aus einer großen Grundgesamtheit
  - Klassische Inferenz, Standardfehler, Konfidenzintervalle, Signifikanztests
  - Erfordert Annahmen über Zustandekommen der Daten $\rightarrow$ klassische Inferenz

Was leistet die klassische Inferenz?

- Rückschlüsse auf die Verteilung der in der Stichprobe errechneten Schätzungen
- um die wahren Werte in der Grundgesamtheit
- wenn Stichprobenziehung unter essentiell identischen Bedingungen
- unendlich oft wiederholt wird

Konfidenzintervall

„Ein Intervall, das nach dieser Regel konstruiert wird, wird in 95 von 100 Stichproben den wahren Wert des Parameters mit einschließen“

Was leistet die klassische Inferenz?

- Rückschlüsse auf die Verteilung der in der Stichprobe errechneten Schätzungen
- um die wahren Werte in der Grundgesamtheit
- wenn Stichprobenziehung unter essentiell identischen Bedingungen
- unendlich oft wiederholt wird

- Habe ich eine der 95 „glücklichen“ Stichproben gezogen?
- Nicht sehr intuitive, aber klare Interpretation

Und wenn ich keine Zufallsstichprobe habe?

- Schulbezirke, OECD-Staaten, Studierende an einer bestimmten Universität
- Strategie I: Die Daten werden wie eine Grundgesamtheit behandelt

  Regression dient nur zur *Beschreibung*
- Strategie II (mit Varianten): Annahmen über Natur, Superpopulation, ...
  - Standardfehler werden „als ob“ berechnet
  - Innerhalb des klassischen Ansatzes nicht ok
  - Erfordert andere statistische Annahmen

Und wenn ich keine Zufallsstichprobe habe?

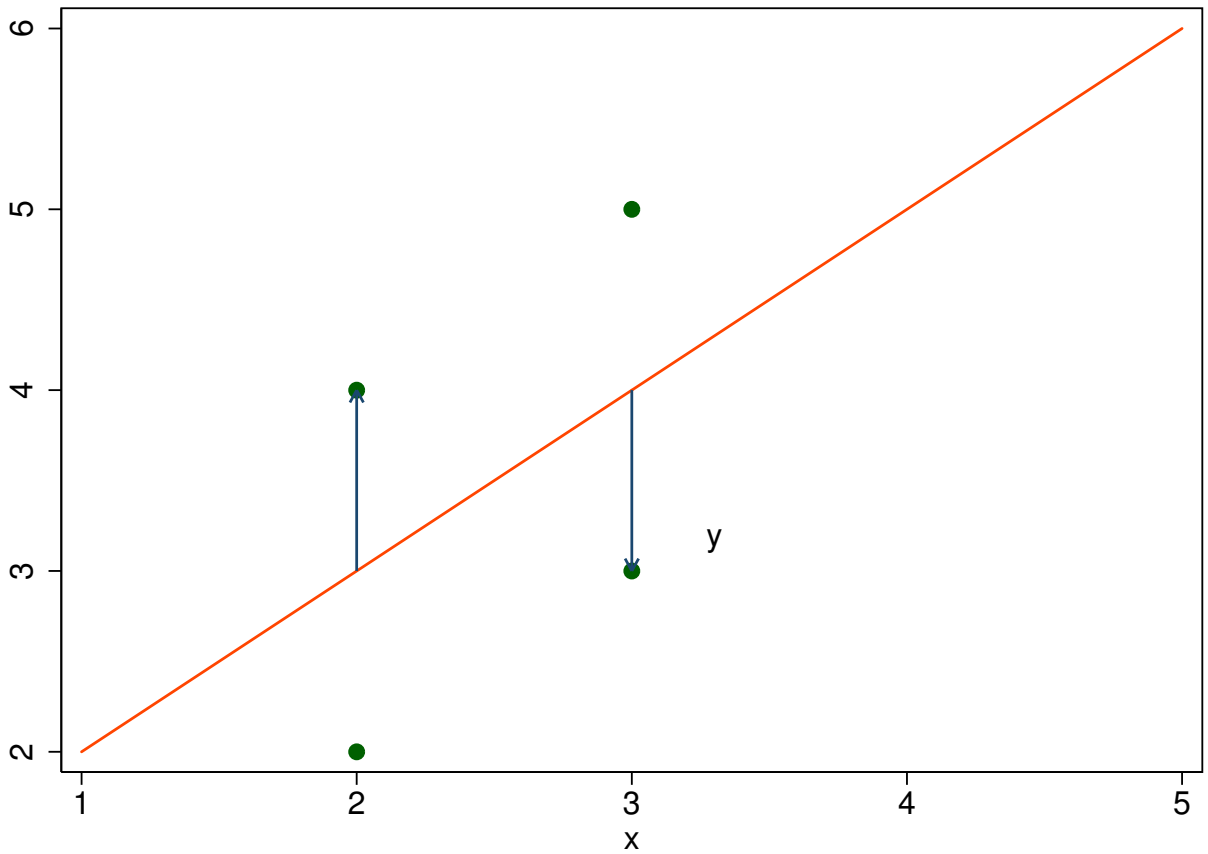
- Schulbezirke, OECD-Staaten, Studierende an einer bestimmten Universität
- Strategie I: Die Daten werden wie eine Grundgesamtheit behandelt

  Regression dient nur zur *Beschreibung*
- Strategie II (mit Varianten): Annahmen über Natur, Superpopulation, ...
  - Standardfehler werden „als ob“ berechnet
  - Innerhalb des klassischen Ansatzes nicht ok
  - Erfordert andere statistische Annahmen
- Extreme Vorsicht mit Standardfehlern bei Non-Samples

Wie komme ich zu meinen Schätzungen?

- Wie lege ich die Gerade durch die Punkte (gute Beschreibung/gute Schätzung)?
- Standardmethode: „Kleinste-Quadrate-Schätzung“ (Ordinary Least Squares, OLS) Abweichungsquadrate“?
  - Welche Koeffizienten minimieren die SAQ?
  - Gute Beschreibung/Anpassung
- Und (in diesem Fall) auch gute *Schätzung* für Grundgesamtheit

Was sind die Abweichungen, die quadriert werden?



Wie komme ich zu meinen Schätzungen?

- Für alle Datenpunkte $i = 1, 2 \ldots n$ Differenz zwischen beobachtetem (y_i) und erwartetem Wert ($\hat{y}_i$) bestimmen, quadrieren und aufsummieren

$$\text{SAQ} = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (b_0 + b_1 x_{1i}))^2 \tag{1}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} (y_i - b_0 - b_1 x_{1i})^2 \tag{2}$$

- Die SAQ in (1) sind eine *Funktion* der Daten und der Parameterschätzungen
- Gesucht sind *Parameterschätzungen*, die SAQ minimieren

Wie minimiere ich die SAQ?

- Möglichkeit I:
  - Durch systematisches Variieren der Parameter
  - Entspricht in etwa den iterativen Verfahren
- Möglichkeit II:
  - Es existiert eine analytische Lösung
  - Funktion hat globales Minimum
  - Notwendige Bedingung für einen Extremwert: 1. Ableitung gleich 0 (Tangente ist an dieser Stelle flach)
  - Funktion hat zwei Variablen $\rightarrow$ zwei partielle Ableitungen (nach b_0 und b_1) betrachten
  - „Normalgleichungen“

Wie sehen die Normalgleichungen aus?

$$b_0 \times n + b_1 \sum x_{1i} + b_2 \sum x_{2i} + \cdots b_k \sum x_{ki} = \sum y_i \tag{3}$$

$$b_0 \sum x_{1i} + b_1 \sum x_{1i}^2 + b_2 \sum x_{1i}x_{2i} + \cdots b_k \sum x_{1i}x_{ki} = \sum x_{1i}y_i \tag{4}$$

$$\vdots$$

$$b_0 \sum x_{ki} + b_1 \sum x_{ki}x_{1i} + b_2 \sum x_{ki}x_{2i} + \cdots b_k \sum x_{ki}^2 = \sum x_{ki}y_i \tag{5}$$

Nur zur Illustration, muß nicht auswendig gelernt werden

Geht das auch etwas übersichtlicher?

- Schon bei zwei Variablen sehr unübersichtlich
- Für den multivariaten Fall Darstellung und Berechnung vorzugsweise in Matrix-Schreibweise
- Matrix: tabellenförmige Darstellung von Zahlen (Elementen der Matrix)
- $\mathbf{A}$ ist eine $m \times n$ Matrix (m Zeilen, n Spalten):

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix} \tag{6}$$

- Matrix mit einer Spalte: Spaltenvektor; Matrix mit einer Zeile: Zeilenvektor ▸ weiter

Wie kann man mit Matrizen rechnen?

- Der Stoff auf den nächsten Folien dient Ihrem Verständnis, ist aber nicht klausurrelevant
- Matrizen werden elementweise addiert (Rechenbeispiele aus Wikipedia)
- Setzt gleiche Zahl von Spalten Zeilen voraus

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 5 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+0 & 3+0 & 2+5 \\ 1+2 & 2+1 & 2+1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 7 \\ 3 & 3 & 3 \end{pmatrix}$$

Wie kann man mit Matrizen rechnen?

- Die Multiplikation mit einem Skalar ist einfach:

$$2 \times \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \times 1 & 2 \times 3 & 2 \times 2 \\ 2 \times 1 & 2 \times 2 & 2 \times 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 6 & 4 \\ 2 & 4 & 4 \end{pmatrix}$$

Wie kann man mit Matrizen rechnen?

- Die Multiplikation von Matrizen ist spannender
- Nur möglich, wenn die Spaltenzahl der linken mit der Zeilenzahl der rechten Matrix übereinstimmt
- $\mathbf{A} \times \mathbf{B} \neq \mathbf{B} \times \mathbf{A}$ (normalerweise)

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 6 & -1 \\ 3 & 2 \\ 0 & -3 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 \times 6 + 2 \times 3 + 3 \times 0 & 1 \times (-1) + 2 \times 2 + 3 \times (-3) \\ 4 \times 6 + 5 \times 3 + 6 \times 0 & 4 \times (-1) + 5 \times 2 + 6 \times (-3) \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 12 & -6 \\ 39 & -12 \end{pmatrix}$$

Was kann man sonst noch machen?

- Transponieren, d. h. Zeilen und Spalten vertauschen

$$\begin{pmatrix} 1 & 8 & -3 \\ 4 & -2 & 5 \end{pmatrix}' = \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 8 & -2 \\ -3 & 5 \end{pmatrix}$$

- Die Inverse suchen (entspricht etwa dem Kehrwert): $\mathbf{A} \times \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$
- $\mathbf{I}$ ist die *Einheitsmatrix*
- Quadratische Matrix mit Einsen auf der Hauptdiagonale, sonst nur Nullen
- Inverse ermöglicht es, durch Matrix zu teilen; nicht alle Matrizen sind invertierbar

Was hilft uns das?

- Das lineare Modell kann in Matrix-Schreibweise sehr kompakt formuliert werden

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon} \quad \text{mit} \begin{cases} \mathbf{y}: & \text{Spaltenvektor mit Werten der abhängigen Variablen} \\ \mathbf{X}: & \text{Matrix mit Werten der unabhängigen Variablen} \\ \boldsymbol{\beta}: & \text{Spaltenvektor mit Koeffizienten} \\ \boldsymbol{\epsilon}: & \text{Spaltenvektor mit zufälligen Einflüssen} \end{cases}$$

dabei ist

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & \cdots & x_{1k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & \cdots & x_{nk} \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{pmatrix} \quad \boldsymbol{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix} \tag{7}$$

Was hilft uns das?

- OLS-Schätzung: $\mathbf{y} = \mathbf{Xb} + \mathbf{e}$ ($\mathbf{e}$ ist der Spaltenvektor der Residuen, $\mathbf{b}$ ist der Spaltenvektor der Koeffizienten, $\mathbf{X}$ ist die Datenmatrix)
- Die Summe der quadrierten Residuen ist $\mathbf{e}'\mathbf{e}$ (warum? – siehe Matrix-Multiplikation drei Folien vorher)

$$\begin{aligned} \text{SAQ} = \mathbf{e}'\mathbf{e} &= (\mathbf{y} - \mathbf{Xb})'(\mathbf{y} - \mathbf{Xb}) && (8) \\ &= \mathbf{y}'\mathbf{y} - \mathbf{y}'\mathbf{Xb} - \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{y} + \mathbf{b}'\mathbf{X}'\mathbf{Xb} && (9) \\ &= \mathbf{y}'\mathbf{y} - (2\mathbf{y}'\mathbf{X})\mathbf{b} + \mathbf{b}'(\mathbf{X}'\mathbf{X})\mathbf{b} && (10) \end{aligned}$$

Muß nicht auswendig gelernt werden, aber Sie sollten es in groben Zügen verstehen

Was hilft uns das?

- Die partielle Ableitung der SAQ nach $\mathbf{b}$ ist $\frac{\partial \text{SAQ}}{\mathbf{b}} = -2\mathbf{X}'y + 2\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b}$
- Auf null setzen: $-2\mathbf{X}'y + 2\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b} = 0$
- Vektorform der Normalgleichungen: $\mathbf{X}'\mathbf{X}\mathbf{b} = \mathbf{X}'\mathbf{y}$
- Nach $\mathbf{b}$ auflösen: $\mathbf{b} = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{y}$

Muß nicht auswendig gelernt werden, aber Sie sollten es in groben Zügen verstehen

Zusammenfassung

- Regression betrachtet konditionalen Mittelwert einer Variablen
- Mittelwert folgt in Abhängigkeit von unabhängigen Variablen einem Pfad
- Im klassischen Modell entspricht dieser Pfad einer Linie/Fläche/Hyperfläche, die die SAQ minimiert
- Das Gleichungssystem läßt sich analytisch lösen, um die optimalen Parameter zu finden
- Matrix muß genug unabhängige Informationen enthalten
- OLS gutes Mittel zur Datenverdichtung – auch ein gutes Schätzverfahren?