

Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik für Biologen

Multivariate lineare Modelle

Dirk Metzler & Martin Hutzenthaler

http://evol.bio.lmu.de/_statgen

22. Juni 2010

Übersicht

- 1 Regression zur Mitte
- 2 Multivariate Regression
 - Beispiel: Artenreichtum an Sandstränden
 - Beispiel: Wirksamkeit von Therapien
- 3 Modellwahl: AIC und Kreuzvalidierung
 - Beispiel: (Schnabel-)Größen der Darwin-Finken
 - Beispiel: Wasserflöhe
- 4 Zur Klausur

Übersicht

- 1 Regression zur Mitte
- 2 Multivariate Regression
 - Beispiel: Artenreichtum an Sandstränden
 - Beispiel: Wirksamkeit von Therapien
- 3 Modellwahl: AIC und Kreuzvalidierung
 - Beispiel: (Schnabel-)Größen der Darwin-Finken
 - Beispiel: Wasserflöhe
- 4 Zur Klausur

Herkunft des Worts “Regression”

Wieso Regression=Rückkehr, Rückschritt?

Herkunft des Worts “Regression”

Wieso Regression=Rückkehr, Rückschritt?

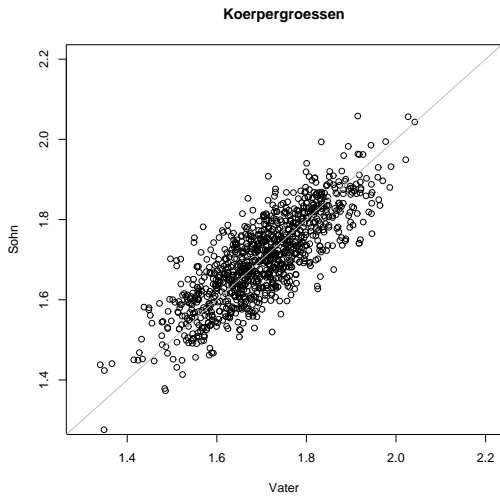
Sir Francis Galton (1822–1911): Regression toward the mean.

Herkunft des Worts “Regression”

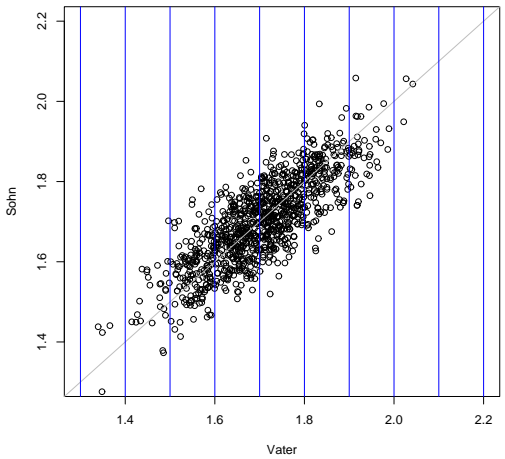
Wieso Regression=Rückkehr, Rückschritt?

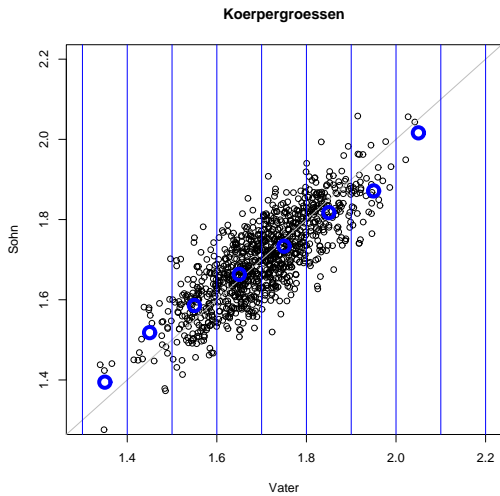
Sir Francis Galton (1822–1911): Regression toward the mean.

Große Väter haben Söhne, die im Schnitt etwas kleiner werden als sie selbst. Söhne kleiner Väter werden im Schnitt etwas größer als ihre Väter.

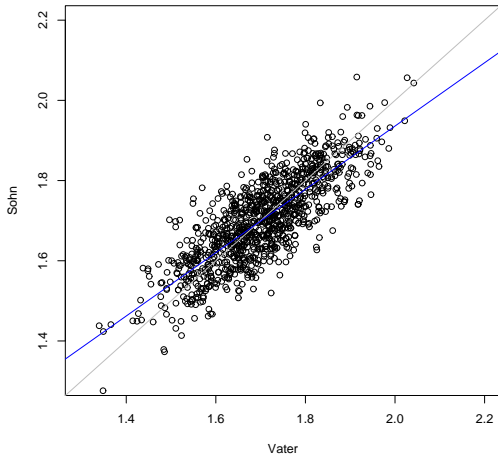


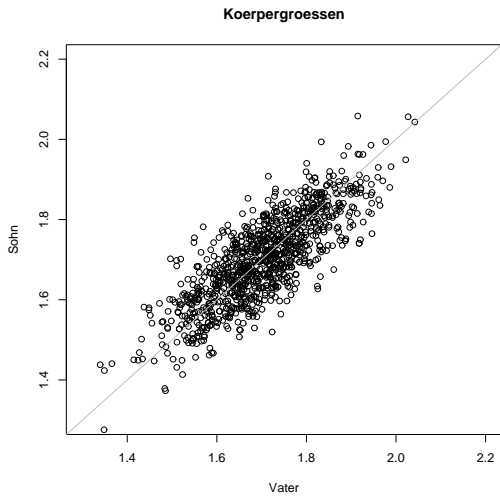
Koerpergroessen

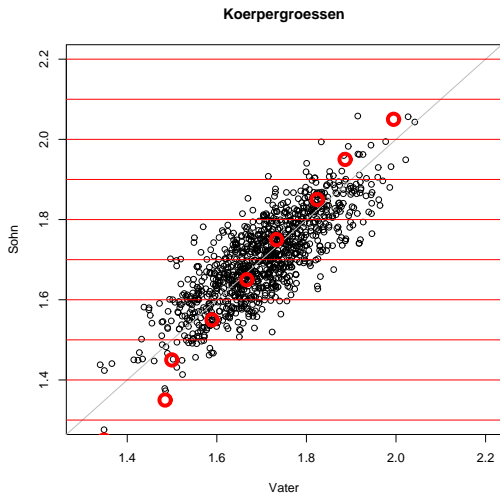


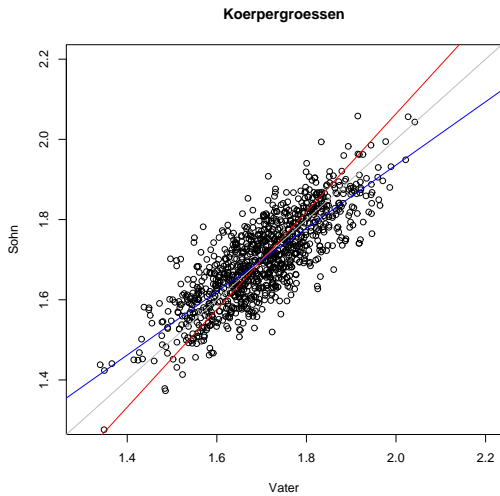


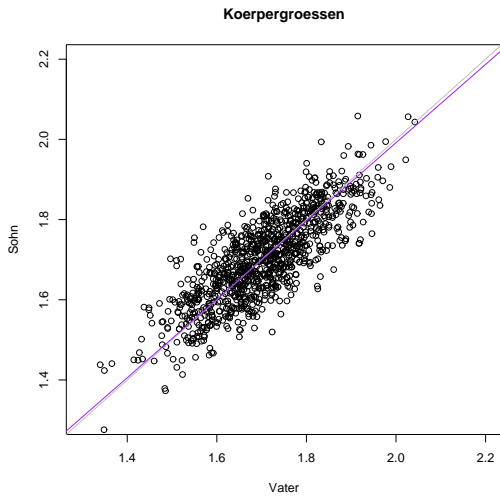
Koerpergroessen











Ähnliche Effekte

- Im Sport: der beste Sportler einer Saison wird in der nächsten Saison die hohen Erwartungen nicht erfüllen können.

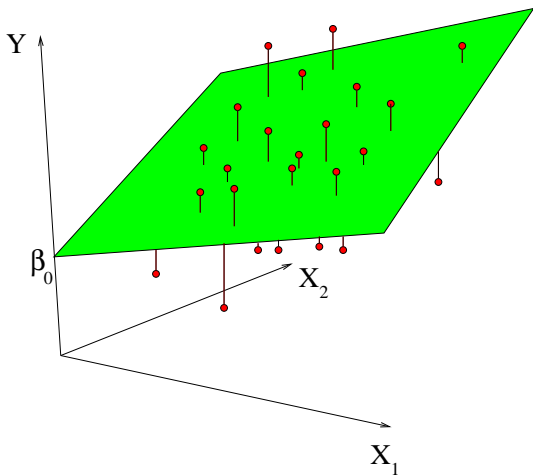
Ähnliche Effekte

- Im Sport: der beste Sportler einer Saison wird in der nächsten Saison die hohen Erwartungen nicht erfüllen können.
- In der Schule: Wenn die 10 % schlechtesten Schüler Nachhilfe bekommen und im nächsten Schuljahr im Schnitt besser sind, beweist das noch nicht den Nutzen des Nachhilfeunterrichts.

Übersicht

- 1 Regression zur Mitte
- 2 Multivariate Regression**
 - Beispiel: Artenreichtum an Sandstränden
 - Beispiel: Wirksamkeit von Therapien
- 3 Modellwahl: AIC und Kreuzvalidierung
 - Beispiel: (Schnabel-)Größen der Darwin-Finken
 - Beispiel: Wasserflöhe
- 4 Zur Klausur

Multivariate Regression



Multivariate Regression

Problem: Sage Y aus X_1, X_2, \dots, X_m voraus.

Multivariate Regression

Problem: Sage Y aus X_1, X_2, \dots, X_m voraus.

Beobachtungen:

$$Y_1 \quad , \quad X_{11}, X_{21}, \dots, X_{m1}$$

$$Y_2 \quad , \quad X_{12}, X_{22}, \dots, X_{m2}$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$Y_n \quad , \quad X_{1n}, X_{2n}, \dots, X_{mn}$$

Multivariate Regression

Problem: Sage Y aus X_1, X_2, \dots, X_m voraus.

Beobachtungen:

$$Y_1 \quad , \quad X_{11}, X_{21}, \dots, X_{m1}$$

$$Y_2 \quad , \quad X_{12}, X_{22}, \dots, X_{m2}$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$Y_n \quad , \quad X_{1n}, X_{2n}, \dots, X_{mn}$$

Modell: $Y = a + b_1 \cdot X_1 + b_2 \cdot X_2 + \dots + b_m \cdot X_m + \varepsilon$

Multivariate Regression

Problem: Sage Y aus X_1, X_2, \dots, X_m voraus.

Beobachtungen:

$$Y_1 \quad , \quad X_{11}, X_{21}, \dots, X_{m1}$$

$$Y_2 \quad , \quad X_{12}, X_{22}, \dots, X_{m2}$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$Y_n \quad , \quad X_{1n}, X_{2n}, \dots, X_{mn}$$

Modell: $Y = a + b_1 \cdot X_1 + b_2 \cdot X_2 + \dots + b_m \cdot X_m + \varepsilon$

Gleichungssystem zum Bestimmen von a, b_1, b_2, \dots, b_m :

$$Y_1 = a + b_1 \cdot X_{11} + b_2 \cdot X_{21} + \dots + b_m \cdot X_{m1} + \varepsilon_1$$

$$Y_2 = a + b_1 \cdot X_{12} + b_2 \cdot X_{22} + \dots + b_m \cdot X_{m2} + \varepsilon_2$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \ddots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$Y_n = a + b_1 \cdot X_{1n} + b_2 \cdot X_{2n} + \dots + b_m \cdot X_{mn} + \varepsilon_n$$

Modell:

$$\begin{array}{rcccccccccccc}
 Y_1 & = & a & + & b_1 \cdot X_{11} & + & b_2 \cdot X_{21} & + & \dots & + & b_m \cdot X_{m1} & + & \varepsilon_1 \\
 Y_2 & = & a & + & b_1 \cdot X_{12} & + & b_2 \cdot X_{22} & + & \dots & + & b_m \cdot X_{m2} & + & \varepsilon_2 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 Y_n & = & a & + & b_1 \cdot X_{1n} & + & b_n \cdot X_{2n} & + & \dots & + & b_m \cdot X_{mn} & + & \varepsilon_n
 \end{array}$$

Zielvariable Y


Erklärende Variablen X_1, X_2, \dots, X_m

Zu schätzende Parameter a, b_1, \dots, b_m

Unabhängige normalverteilte Störungen $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m$ mit unbekannter Varianz σ^2 .

Übersicht

- 1 Regression zur Mitte
- 2 **Multivariate Regression**
 - **Beispiel: Artenreichtum an Sandstränden**
 - Beispiel: Wirksamkeit von Therapien
- 3 Modellwahl: AIC und Kreuzvalidierung
 - Beispiel: (Schnabel-)Größen der Darwin-Finken
 - Beispiel: Wasserflöhe
- 4 Zur Klausur

- Von welchen Faktoren hängt der Artenreichtum an einem Stück Strand ab?
- Daten aus einer Studie des niederländischen National Institute for Coastal and Marine Management Rijkswaterstaat/RIKZ
- siehe auch
 -  Zuur, Ieno, Smith (2007) *Analysing Ecological Data*. Springer

	richness	angle2	NAP	grainsize	humus	week
1	11	96	0.045	222.5	0.05	1
2	10	96	-1.036	200.0	0.30	1
3	13	96	-1.336	194.5	0.10	1
4	11	96	0.616	221.0	0.15	1
.
.
21	3	21	1.117	251.5	0.00	4
22	22	21	-0.503	265.0	0.00	4
23	6	21	0.729	275.5	0.10	4
.
.
43	3	96	-0.002	223.0	0.00	3
44	0	96	2.255	186.0	0.05	3
45	2	96	0.865	189.5	0.00	3

Bedeutung der Variablen

richness Anzahl Arten, die an der Probestelle gefunden wurden.

angle2 Hangneigung des Strandes an der Probestelle

NAP Höhe der Probestelle im Vergleich zur mittleren Wasserhöhe

grainsize Durchschnittliche Größe der Sandkörner

humus Anteil an organischem Material

week in welcher der 4 Wochen wurde die Stelle beprobt

(Viele weitere Variablen im Originaldatensatz)

Modell 0:

$$\text{richness} = a + b_1 \cdot \text{angle2} + b_2 \cdot \text{NAP} + b_3 \cdot \text{grainsize} + b_4 \cdot \text{humus} + \varepsilon$$

Modell 0:

$$\text{richness} = a + b_1 \cdot \text{angle2} + b_2 \cdot \text{NAP} + b_3 \cdot \text{grainsize} + b_4 \cdot \text{humus} + \varepsilon$$

in R-Notation:

```
richness ~ angle2 + NAP + grainsize + humus
```

```
> modell0 <- lm(richness ~ angle2+NAP+grainsize+humus,  
+               data = rikz)
```

```
> summary(modell0)
```

Call:

```
lm(formula = richness ~ angle2 + NAP + grainsize + humus, data = rikz)
```

Residuals:

Min	1Q	Median	3Q	Max
-4.6851	-2.1935	-0.4218	1.6753	13.2957

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	18.35322	5.71888	3.209	0.00262	**
angle2	-0.02277	0.02995	-0.760	0.45144	
NAP	-2.90451	0.59068	-4.917	1.54e-05	***
grainsize	-0.04012	0.01532	-2.619	0.01239	*
humus	11.77641	9.71057	1.213	0.23234	

Signif. codes: 0 *** 0.001 ** 0.01 * 0.05 . 0.1 1

Residual standard error: 3.644 on 40 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.5178. Adjusted R-squared: 0.4696

- z.B. die -2.90451 ist der Schätzer für b_2 , den Vorfaktor von NAP

- z.B. die -2.90451 ist der Schätzer für b_2 , den Vorfaktor von NAP
- Der p -Wert $\Pr(>|t|)$ bezieht sich auf die Nullhypothese, dass der wahre Parameterwert 0 sein könnte, d.h. dass die entsprechende erklärende Variable, z.B. NAP dann keinen Einfluß auf die Zielgröße (hier den Artenreichtum) hätte.

- z.B. die -2.90451 ist der Schätzer für b_2 , den Vorfaktor von NAP
- Der p -Wert $\Pr(>|t|)$ bezieht sich auf die Nullhypothese, dass der wahre Parameterwert 0 sein könnte, d.h. dass die entsprechende erklärende Variable, z.B. NAP dann keinen Einfluß auf die Zielgröße (hier den Artenreichtum) hätte.
- NAP wird als hochsignifikant bewertet, grainsize ist ebenfalls signifikant.

- z.B. die -2.90451 ist der Schätzer für b_2 , den Vorfaktor von NAP
- Der p -Wert $\Pr(>|t|)$ bezieht sich auf die Nullhypothese, dass der wahre Parameterwert 0 sein könnte, d.h. dass die entsprechende erklärende Variable, z.B. NAP dann keinen Einfluß auf die Zielgröße (hier den Artenreichtum) hätte.
- NAP wird als hochsignifikant bewertet, `grainsize` ist ebenfalls signifikant.
- Hat die Woche einen signifikanten Einfluß?

- z.B. die -2.90451 ist der Schätzer für b_2 , den Vorfaktor von NAP
- Der p -Wert $\Pr(>|t|)$ bezieht sich auf die Nullhypothese, dass der wahre Parameterwert 0 sein könnte, d.h. dass die entsprechende erklärende Variable, z.B. NAP dann keinen Einfluß auf die Zielgröße (hier den Artenreichtum) hätte.
- NAP wird als hochsignifikant bewertet, `grainsize` ist ebenfalls signifikant.
- Hat die Woche einen signifikanten Einfluß?
- Es soll nicht die Nummer 1,2,3,4 der Woche mit einem Vorfaktor verrechnet werden, sondern die Zahlen werden als nicht-numerischer Faktor gesehen, d.h. jede Woche bekommt einen Parameter, der angibt, wie sehr stark die Artenzahl in der entsprechenden Woche erhöht oder vermindert ist.

- z.B. die -2.90451 ist der Schätzer für b_2 , den Vorfaktor von NAP
- Der p -Wert $\Pr(>|t|)$ bezieht sich auf die Nullhypothese, dass der wahre Parameterwert 0 sein könnte, d.h. dass die entsprechende erklärende Variable, z.B. NAP dann keinen Einfluß auf die Zielgröße (hier den Artenreichtum) hätte.
- NAP wird als hochsignifikant bewertet, `grainsize` ist ebenfalls signifikant.
- Hat die Woche einen signifikanten Einfluß?
- Es soll nicht die Nummer 1,2,3,4 der Woche mit einem Vorfaktor verrechnet werden, sondern die Zahlen werden als nicht-numerischer Faktor gesehen, d.h. jede Woche bekommt einen Parameter, der angibt, wie sehr stark die Artenzahl in der entsprechenden Woche erhöht oder vermindert ist.
- In R wird dazu `week` in einen `factor` umgewandelt.

Modell 0:

$$\begin{aligned} \text{richness} = & a + b_1 \cdot \text{angle2} + b_2 \cdot \text{NAP} + b_3 \cdot \text{grainsize} + \\ & + b_4 \cdot \text{humus} + \\ & b_5 \cdot I_{\text{week}=2} + b_6 \cdot I_{\text{week}=3} + b_7 \cdot I_{\text{week}=4} + \varepsilon \end{aligned}$$

Dabei ist $I_{\text{week}=k}$ eine sog. Indikatorvariable, die 1 ist, falls $\text{week} = k$ und sonst 0.

Modell 0:

$$\begin{aligned} \text{richness} = & a + b_1 \cdot \text{angle2} + b_2 \cdot \text{NAP} + b_3 \cdot \text{grainsize} + \\ & + b_4 \cdot \text{humus} + \\ & b_5 \cdot I_{\text{week}=2} + b_6 \cdot I_{\text{week}=3} + b_7 \cdot I_{\text{week}=4} + \varepsilon \end{aligned}$$

Dabei ist $I_{\text{week}=k}$ eine sog. Indikatorvariable, die 1 ist, falls $\text{week} = k$ und sonst 0.

z.B. b_7 beschreibt, um wieviel an einer durchschnittlichen Probestelle der Artenreichtum in Woche 3 gegenüber Woche 1 erhöht ist.

Modell 0:

$$\begin{aligned} \text{richness} = & a + b_1 \cdot \text{angle2} + b_2 \cdot \text{NAP} + b_3 \cdot \text{grainsize} + \\ & + b_4 \cdot \text{humus} + \\ & b_5 \cdot I_{\text{week}=2} + b_6 \cdot I_{\text{week}=3} + b_7 \cdot I_{\text{week}=4} + \varepsilon \end{aligned}$$

Dabei ist $I_{\text{week}=k}$ eine sog. Indikatorvariable, die 1 ist, falls $\text{week} = k$ und sonst 0.

z.B. b_7 beschreibt, um wieviel an einer durchschnittlichen Probestelle der Artenreichtum in Woche 3 gegenüber Woche 1 erhöht ist.

in R-Notation:

```
richness ~ angle2 + NAP + grainsize + humus +  
factor(week)
```

```
> modell <- lm(richness ~ angle2+NAP+grainsize+humus
+               +factor(week), data = rikz)
> summary(modell)
```

```
.
.
.
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	9.298448	7.967002	1.167	0.250629	
angle2	0.016760	0.042934	0.390	0.698496	
NAP	-2.274093	0.529411	-4.296	0.000121	***
grainsize	0.002249	0.021066	0.107	0.915570	
humus	0.519686	8.703910	0.060	0.952710	
factor(week)2	-7.065098	1.761492	-4.011	0.000282	***
factor(week)3	-5.719055	1.827616	-3.129	0.003411	**
factor(week)4	-1.481816	2.720089	-0.545	0.589182	

- In Wochen 2 und 3 waren also signifikant weniger Arten zu finden als in Woche 1, die hier als “Bezugspunkt” dient

- In Wochen 2 und 3 waren also signifikant weniger Arten zu finden als in Woche 1, die hier als “Bezugspunkt” dient
- Der geschätzte Achsenabschnitt *Intercept* entspricht also der zu erwartenden Artenzahl in Woche 1 an einer Probestelle, an der alle anderen Parameter 0 sind.

- In Wochen 2 und 3 waren also signifikant weniger Arten zu finden als in Woche 1, die hier als “Bezugspunkt” dient
- Der geschätzte Achsenabschnitt `Intercept` entspricht also der zu erwartenden Artenzahl in Woche 1 an einer Probestelle, an der alle anderen Parameter 0 sind.
- eine alternative Darstellung ohne `Intercept` nimmt 0 als Bezugspunkt.

```
> modell.alternativ <- lm(richness ~ angle2+NAP+
+       grainsize+humus+factor(week)-1, data = rikz)
> summary(modell.alternativ)
```

.
.
.
.

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
angle2	0.016760	0.042934	0.390	0.698496	
NAP	-2.274093	0.529411	-4.296	0.000121	***
grainsize	0.002249	0.021066	0.107	0.915570	
humus	0.519686	8.703910	0.060	0.952710	
factor(week)1	9.298448	7.967002	1.167	0.250629	
factor(week)2	2.233349	8.158816	0.274	0.785811	
factor(week)3	3.579393	8.530193	0.420	0.677194	
factor(week)4	7.816632	6.522282	1.198	0.238362	

die p -Werte beziehen sich hier auf die Frage ob die vier geschätzten Achsenabschnitte für die einzelnen Wochen signifikant von 0 verschieden sind.

Wie testen wir, ob sich die Wochen unterscheiden?

Wie testen wir, ob sich die Wochen unterscheiden?

Z.B.: Wie wir im vorletzten Modell gesehen haben, sind Wochen 2 und 3 verschieden von Woche 1.

Wie testen wir, ob sich die Wochen unterscheiden?

Z.B.: Wie wir im vorletzten Modell gesehen haben, sind Wochen 2 und 3 verschieden von Woche 1. Der p -Wert bezieht sich aber auf die Situation eines Einzeltests.

Wie testen wir, ob sich die Wochen unterscheiden?

Z.B.: Wie wir im vorletzten Modell gesehen haben, sind Wochen 2 und 3 verschieden von Woche 1. Der p -Wert bezieht sich aber auf die Situation eines Einzeltests.

Wenn wir aber jedes Paar der vier Wochen vergleichen, führen wir $\binom{4}{2} = 6$ Test durch.

Wie testen wir, ob sich die Wochen unterscheiden?

Z.B.: Wie wir im vorletzten Modell gesehen haben, sind Wochen 2 und 3 verschieden von Woche 1. Der p -Wert bezieht sich aber auf die Situation eines Einzeltests.

Wenn wir aber jedes Paar der vier Wochen vergleichen, führen wir $\binom{4}{2} = 6$ Test durch.

Bonferroni-Korrektur: Multipliziere jeden p -Wert mit der Anzahl der durchgeführten Tests, in diesem Fall 6.

Bonferroni-Korrektur

Problem: Wenn man viele Tests durchführt, werden immer einige dabei sein, die Signifikanz anzeigen, auch wenn die Nullhypothese eigentlich gilt.

Bonferroni-Korrektur

Problem: Wenn man viele Tests durchführt, werden immer einige dabei sein, die Signifikanz anzeigen, auch wenn die Nullhypothese eigentlich gilt.

Beispiel: Führt man 20 Tests durch, mit Daten, die die Nullhypothese eigentlich erfüllen, wird im Schnitt ein Test Signifikanz auf dem 5%-Niveau anzeigen.

Bonferroni-Korrektur

Problem: Wenn man viele Tests durchführt, werden immer einige dabei sein, die Signifikanz anzeigen, auch wenn die Nullhypothese eigentlich gilt.

Beispiel: Führt man 20 Tests durch, mit Daten, die die Nullhypothese eigentlich erfüllen, wird im Schnitt ein Test Signifikanz auf dem 5%-Niveau anzeigen.

Bonferroni-Korrektur: Multipliziere alle p -Werte mit der Anzahl der Tests n . Wenn eines der Ergebnisse das Signifikanzniveau unterschreitet, verwirft die Nullhypothese

Bonferroni-Korrektur

Problem: Wenn man viele Tests durchführt, werden immer einige dabei sein, die Signifikanz anzeigen, auch wenn die Nullhypothese eigentlich gilt.

Beispiel: Führt man 20 Tests durch, mit Daten, die die Nullhypothese eigentlich erfüllen, wird im Schnitt ein Test Signifikanz auf dem 5%-Niveau anzeigen.

Bonferroni-Korrektur: Multipliziere alle p -Werte mit der Anzahl der Tests n . Wenn eines der Ergebnisse das Signifikanzniveau unterschreitet, verwirft die Nullhypothese

Nachteil: Konservativ: Häufig werden Abweichungen von der Nullhypothese nicht erkannt (Fehler zweiter Art).

Alternative: Teste ob es einen Wocheneffekt gibt, indem Du mit Varianzanalyse (ANOVA, ANalysis Of VAriance) ein Modell mit und eins ohne den Wocheneffekt vergleichst.

Alternative: Teste ob es einen Wocheneffekt gibt, indem Du mit Varianzanalyse (ANOVA, ANalysis Of VAriance) ein Modell mit und eins ohne den Wocheneffekt vergleichst.

Geht nur, wenn die Modelle eingebettet (engl. nested) sind, d.h. das einfachere Modell lässt sich erzeugen, indem man bei dem komplexeren bestimmte Randbedingungen für die Parameterwerte definiert, in unserem Fall “alle Wocheneffekte sind gleich”.


```
> modell0 <- lm(richness ~ angle2+NAP+grainsize+humus,
+               data = rikz)
> modell <- lm(richness ~ angle2+NAP+grainsize+humus
+              +factor(week), data = rikz)
> anova(modell0, modell)
```

Analysis of Variance Table

Model 1: richness ~ angle2 + NAP + grainsize + humus

Model 2: richness ~ angle2 + NAP + grainsize + humus + factor

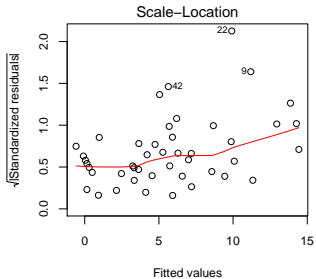
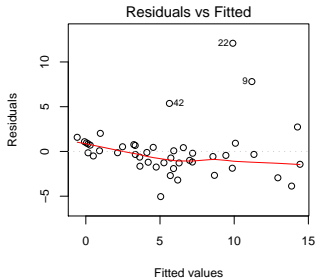
	Res.Df	RSS	Df	Sum of Sq	F	Pr(>F)
1	40	531.17				
2	37	353.66	3	177.51	6.1902	0.00162 **

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

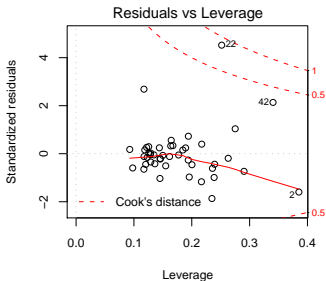
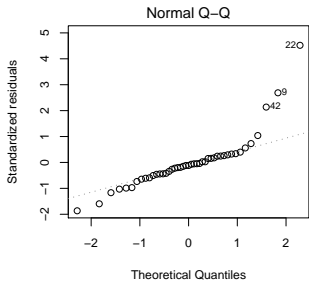
Also verwerfen wir die Nullhypothese, dass die Wochen keinen Effekt haben, mit dem p -Wert 0.00162.

Also verwerfen wir die Nullhypothese, dass die Wochen keinen Effekt haben, mit dem p -Wert 0.00162.

Aber Moment mal! Das können wir nur guten Gewissens tun, wenn das komplexere Modell gut passt. Das überprüfen wir graphisch.



```
plot(modell)
```



Als Ausreißer werden uns die Proben 22, 42, und 9 angezeigt.

Als Ausreißer werden uns die Proben 22, 42, und 9 angezeigt.

Können wir die durch Hinzunahme weiterer Parameter besser erklären oder handelt es sich um “echte Ausreißer”, die atypisch sind? Dann sollte man sie evtl. von der Analyse ausschließen und gesondert untersuchen.

Gibt es eine Interaktion zwischen NAP und angle2?

Gibt es eine Interaktion zwischen NAP und angle2?

$$\begin{aligned} \text{richness} = & a + b_1 \cdot \text{angle2} + b_2 \cdot \text{NAP} + b_3 \cdot \text{grainsize} + \\ & + b_4 \cdot \text{humus} + \\ & + b_5 \cdot I_{\text{week}=2} + b_6 \cdot I_{\text{week}=3} + b_7 \cdot I_{\text{week}=4} \\ & + b_8 \cdot \text{angle2} \cdot \text{NAP} + \varepsilon \end{aligned}$$

in R-Notation:

```
richness ~ angle2 + NAP + angle2:NAP+grainsize + humus  
+ factor(week)
```


Gibt es eine Interaktion zwischen NAP und angle2?

$$\begin{aligned} \text{richness} = & a + b_1 \cdot \text{angle2} + b_2 \cdot \text{NAP} + b_3 \cdot \text{grainsize} + \\ & + b_4 \cdot \text{humus} + \\ & + b_5 \cdot I_{\text{week}=2} + b_6 \cdot I_{\text{week}=3} + b_7 \cdot I_{\text{week}=4} \\ & + b_8 \cdot \text{angle2} \cdot \text{NAP} + \varepsilon \end{aligned}$$

in R-Notation:

```
richness ~ angle2 + NAP + angle2:NAP+grainsize + humus  
+ factor(week)
```

oder auch so abgekürzt:

```
richness ~ angle2*NAP+grainsize + humus + factor(week)
```

```

> modell3 <- lm(richness ~ angle2*NAP+grainsize+humus
+               +factor(week), data = rikz)
> summary(modell3)
[...]
```

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	10.438985	8.148756	1.281	0.208366	
angle2	0.007846	0.044714	0.175	0.861697	
NAP	-3.011876	1.099885	-2.738	0.009539	**
grainsize	0.001109	0.021236	0.052	0.958658	
humus	0.387333	8.754526	0.044	0.964955	
factor(week)2	-7.444863	1.839364	-4.048	0.000262	***
factor(week)3	-6.052928	1.888789	-3.205	0.002831	**
factor(week)4	-1.854893	2.778334	-0.668	0.508629	
angle2:NAP	0.013255	0.017292	0.767	0.448337	

Signif. codes: 0 *** 0.001 ** 0.01 * 0.05 . 0.1 1

Warnhinweise und Nebenwirkungen

Wendet man den R-Befehl `anova` auf ein einzelnes Modell aus, werden die Variablen in der Reihenfolge, in der sie angegeben wurden, nach und nach hinzugefügt und die p -Werte beziehen sich jeweils darauf, ob das Modell durch das Hinzufügen dieses Parameters signifikant besser wird. Es wird also nur mit dem Modell verglichen, das aus den vorherigen Parametern besteht. Im Gegensatz dazu beziehen sich die p -Werte, die von `summary` oder dem Befehl `dropterm` aus der Bibliothek `MASS` ausgegeben werden immer auf einen Vergleich zwischen dem gegebenen Modell und einem Modell, bei dem ausschließlich die entsprechende Variable auf 0 gesetzt wird. Daher hängen die von `anova` gegebenen p -Werte von der Eingabereihenfolge ab, bei `summary` und `dropterm` aber nicht. Diese verschiedenen Optionen gibt es auch in anderen Statistik-Software-Paketen. Bei einigen muss man sich zwischen "Typ I", "Typ II" und "Typ III" und zum Teil weiteren Anova-Typen entscheiden. In Zweifelsfällen fragen Sie Ihre(n) Hausstatistiker oder Übungsgruppenleiter(in).

Warnhinweise und Nebenwirkungen

Wendet man den R-Befehl `anova` auf ein einzelnes Modell aus, werden die Variablen in der Reihenfolge, in der sie angegeben wurden, nach und nach hinzugefügt und die p -Werte beziehen sich jeweils darauf, ob das Modell durch das Hinzufügen dieses Parameters signifikant besser wird. Es wird also nur mit dem Modell verglichen, das aus den vorherigen Parametern besteht. Im Gegensatz dazu beziehen sich die p -Werte, die von `summary` oder dem Befehl `dropterm` aus der Bibliothek `MASS` ausgegeben werden immer auf einen Vergleich zwischen dem gegebenen Modell und einem Modell, bei dem ausschließlich die entsprechende Variable auf 0 gesetzt wird. Daher hängen die von `anova` gegebenen p -Werte von der Eingabereihenfolge ab, bei `summary` und `dropterm` aber nicht. Diese verschiedenen Optionen gibt es auch in anderen Statistik-Software-Paketen. Bei einigen muss man sich zwischen "Typ I", "Typ II" und "Typ III" und zum Teil weiteren Anova-Typen entscheiden. In Zweifelsfällen fragen Sie Ihre(n) Hausstatistiker oder Übungsgruppenleiter(in).

Die nachfolgenden Beispiele sollen die Problematik verdeutlichen.

Hier wird zweimal das selbe Modell spezifiziert:

```
> modellA <- lm(richness ~ angle2+NAP+humus
+               +factor(week)+grainsize,data = rikz)
> modellB <- lm(richness ~ angle2+grainsize
+               +NAP+humus+factor(week), data = rikz)
```

Man beachte bei den folgenden Seiten den p -Wert von grainsize

```
> anova(modellA)
```

Analysis of Variance Table

Response: richness

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)	
angle2	1	124.86	124.86	13.0631	0.0008911	***
NAP	1	319.32	319.32	33.4071	1.247e-06	***
humus	1	35.18	35.18	3.6804	0.0627983	.
factor(week)	3	268.51	89.50	9.3638	9.723e-05	***
grainsize	1	0.11	0.11	0.0114	0.9155704	
Residuals	37	353.66	9.56			

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '1'

```
> anova(modellB)
```

```
Analysis of Variance Table
```

```
Response: richness
```

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)	
angle2	1	124.86	124.86	13.0631	0.00089	***
grainsize	1	35.97	35.97	3.7636	0.06003	.
NAP	1	390.11	390.11	40.8127	1.8e-07	***
humus	1	19.53	19.53	2.0433	0.16127	
factor(week)	3	177.51	59.17	6.1902	0.00162	**
Residuals	37	353.66	9.56			

```
---
```

```
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
> library(MASS)
> dropterm(modellA,test="F")
Single term deletions
```

Model:

```
richness ~ angle2 + NAP + humus + factor(week) + grainsize
              Df Sum of Sq    RSS    AIC  F Value      Pr(F)
<none>                353.66 108.78
angle2           1         1.46 355.12 106.96      0.15 0.6984
NAP              1       176.37 530.03 124.98     18.45 0.0001 ***
humus            1          0.03 353.70 106.78  0.003565 0.9527
factor(week)    3       177.51 531.17 121.08      6.19 0.0016 **
grainsize       1          0.11 353.77 106.79      0.01 0.9155
---
Signif. codes:  0 *** 0.001 ** 0.01 * 0.05 . 0.1 1
```



```
> dropterm(modellB, test="F")
```

```
Single term deletions
```

```
Model:
```

```
richness ~ angle2 + grainsize + NAP + humus + factor(week)
```

	Df	Sum of Sq	RSS	AIC	F Value	Pr(F)
<none>			353.66	108.78		
angle2	1	1.46	355.12	106.96	0.15	0.6984
grainsize	1	0.11	353.77	106.79	0.01	0.9155
NAP	1	176.37	530.03	124.98	18.45	0.0001 ***
humus	1	0.03	353.70	106.78	0.003565	0.9527
factor(week)	3	177.51	531.17	121.08	6.19	0.0016 **

```
---
```

```
Signif. codes:  0 *** 0.001 ** 0.01 * 0.05 . 0.1 1
```

```
> summary(modellA)
```

```
[...]
```

```
Coefficients:
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	9.298448	7.967002	1.167	0.2506	
angle2	0.016760	0.042934	0.390	0.6984	
NAP	-2.274093	0.529411	-4.296	0.0001	***
humus	0.519686	8.703910	0.060	0.9527	
factor(week)2	-7.065098	1.761492	-4.011	0.0002	***
factor(week)3	-5.719055	1.827616	-3.129	0.0034	**
factor(week)4	-1.481816	2.720089	-0.545	0.5891	
grainsize	0.002249	0.021066	0.107	0.9155	

```
---
```

```
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
> summary(modellB)
```

```
[...]
```

```
Coefficients:
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	9.298448	7.967002	1.167	0.2506	
angle2	0.016760	0.042934	0.390	0.6984	
grainsize	0.002249	0.021066	0.107	0.9155	
NAP	-2.274093	0.529411	-4.296	0.0001	***
humus	0.519686	8.703910	0.060	0.9527	
factor(week)2	-7.065098	1.761492	-4.011	0.0002	***
factor(week)3	-5.719055	1.827616	-3.129	0.0034	**
factor(week)4	-1.481816	2.720089	-0.545	0.5891	

```
---
```

```
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

Übersicht

- 1 Regression zur Mitte
- 2 **Multivariate Regression**
 - Beispiel: Artenreichtum an Sandstränden
 - **Beispiel: Wirksamkeit von Therapien**
- 3 Modellwahl: AIC und Kreuzvalidierung
 - Beispiel: (Schnabel-)Größen der Darwin-Finken
 - Beispiel: Wasserflöhe
- 4 Zur Klausur

Vergleiche bei jugendlichen Magersuchtpatientinnen den Behangserfolg von Familientherapie (FT) und kognitiver Verhaltenstherapie (CBT) mit einer Kontrollgruppe (Cont) indem das Gewicht (in lbs.) vor (Prewt) und nach (Postwt) der Behandlung (Treat) verglichen wird.

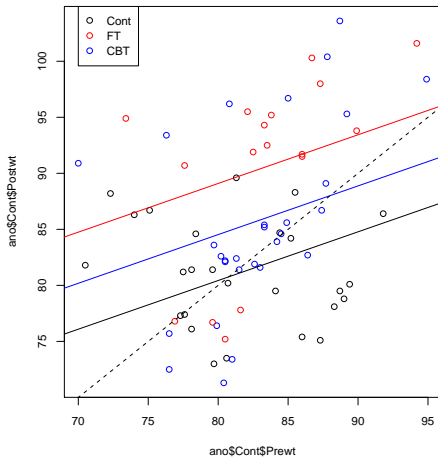


Hand, D. J., Daly, F., McConway, K., Lunn, D. and Ostrowski, E. eds (1993) *A Handbook of Small Data Sets*. Chapman & Hall

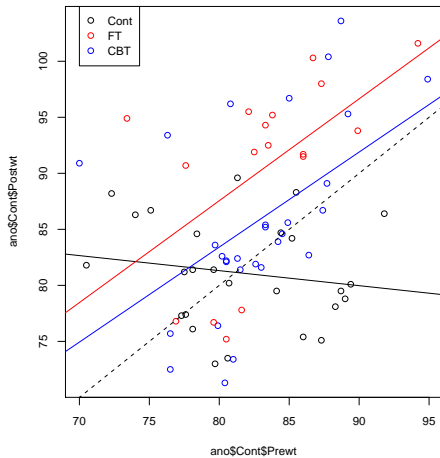
Modell Im1 Es gibt zusätzlich einen linearen Zusammenhang mit dem Gewicht vor der Therapie. Jede Behandlungsform erhöht (oder vermindert) das Gewicht um einen Wert, der von der Behandlung, aber nicht vom Gewicht vor der Behandlung abhängt.

Modell Im2 Interaktion zwischen Treat und Prwt: Das Gewicht vor der Behandlung wirkt sich bei den verschiedenen Behandlungsarten (einschließlich "keine Therapie") unterschiedlich stark aus.

lm1



lm2



```
> lm1 <- lm(Postwt~Prewt+Treat,anorexia)
> lm2 <- lm(Postwt~Prewt*Treat,anorexia)
> anova(lm1,lm2)
```

Analysis of Variance Table

Model 1: Postwt ~ Prewt + Treat

Model 2: Postwt ~ Prewt * Treat

	Res.Df	RSS	Df	Sum of Sq	F	Pr(>F)
1	68	3311.3				
2	66	2844.8	2	466.5	5.4112	0.006666 **

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 '1'

Ergebnis: Das komplexere Modell passt signifikant besser auf die Daten als das eingebettete Modell.

Ergebnis: Das komplexere Modell passt signifikant besser auf die Daten als das eingebettete Modell.

Interpretation: Welche Rolle das Gewicht vor der Behandlung spielt, hängt von der Behandlung ab.

Ergebnis: Das komplexere Modell passt signifikant besser auf die Daten als das eingebettete Modell.

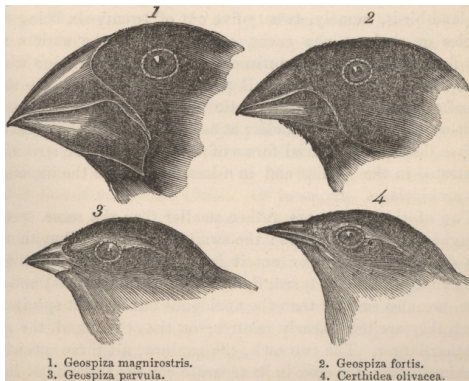
Interpretation: Welche Rolle das Gewicht vor der Behandlung spielt, hängt von der Behandlung ab.
oder auch: Der Unterschied zwischen den Wirkungen der verschiedenen Behandlungen hängt vom Gewicht vor der Therapie ab.

Übersicht

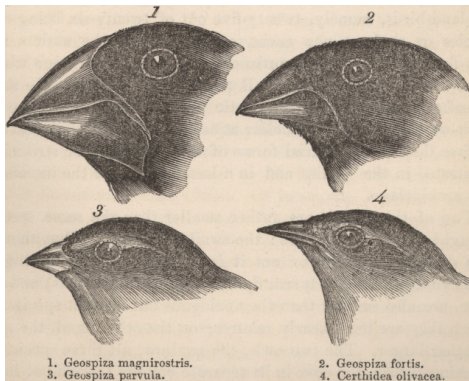
- 1 Regression zur Mitte
- 2 Multivariate Regression
 - Beispiel: Artenreichtum an Sandstränden
 - Beispiel: Wirksamkeit von Therapien
- 3 Modellwahl: AIC und Kreuzvalidierung**
 - Beispiel: (Schnabel-)Größen der Darwin-Finken
 - Beispiel: Wasserflöhe
- 4 Zur Klausur

Übersicht

- 1 Regression zur Mitte
- 2 Multivariate Regression
 - Beispiel: Artenreichtum an Sandstränden
 - Beispiel: Wirksamkeit von Therapien
- 3 Modellwahl: AIC und Kreuzvalidierung**
 - Beispiel: (Schnabel-)Größen der Darwin-Finken**
 - Beispiel: Wasserflöhe
- 4 Zur Klausur

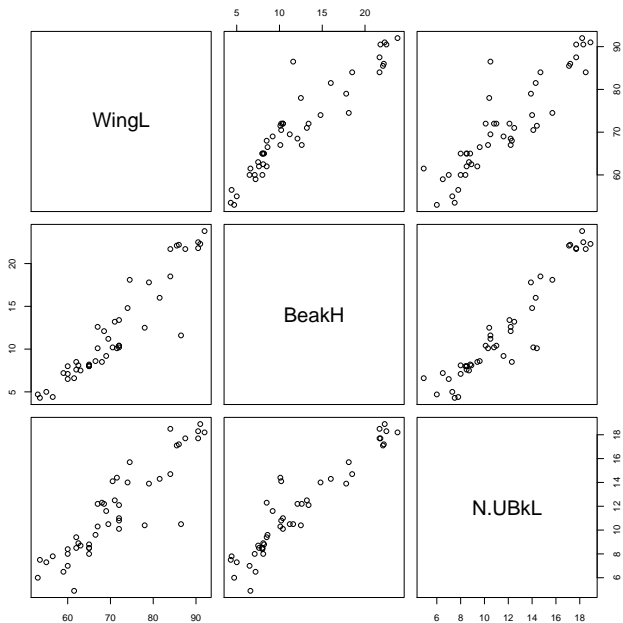


Sie finden den Schnabel eines Darwinfinken. Der Schnabel ist 14 mm lang und 10 mm hoch. Wie gut können Sie die Spannweite des Vogels schätzen?



Sie finden den Schnabel eines Darwinfinken. Der Schnabel ist 14 mm lang und 10 mm hoch. Wie gut können Sie die Spannweite des Vogels schätzen?

Als “Lerndaten” stehen Ihnen Spannweiten (WingL), Schnabelhöhen (BeakH) und Schnabellängen (N.UBkL) von 46 Darwinfinken zur Verfügung.



Sollen wir nur die Schnabelhöhe, nur die Schnabellänge oder beides einbeziehen?

```
> modH <- lm(WingL~BeakH)
> summary(modH)
```

```
Call:
lm(formula = WingL ~ BeakH)
```

```
Residuals:
```

```
      Min       1Q   Median       3Q      Max
-7.1882 -2.5327 -0.2796  1.8325 16.2702
```

```
Coefficients:
```

```
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  49.78083    1.33103   37.40  <2e-16 ***
BeakH         1.76284    0.09961   17.70  <2e-16 ***
```

```
---
```

```
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
Residual standard error: 3.868 on 44 degrees of freedom
```

```
Multiple R-squared:  0.8768, Adjusted R-squared:  0.874
```

```
F-statistic: 313.2 on 1 and 44 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

```
> predict(modH,newdata=data.frame(BeakH=10))
```

```
      1
67.40924
```

```
> modL <- lm(WingL~N.UBkL)
> summary(modL)
```

```
Call:
lm(formula = WingL ~ N.UBkL)
```

```
Residuals:
```

Min	1Q	Median	3Q	Max
-7.1321	-3.3974	0.4737	2.2966	18.2299

```
Coefficients:
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	41.5371	2.2884	18.15	<2e-16 ***
N.UBkL	2.5460	0.1875	13.58	<2e-16 ***

```
---
```

```
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
Residual standard error: 4.838 on 44 degrees of freedom
```

```
Multiple R-squared: 0.8074, Adjusted R-squared: 0.803
```

```
F-statistic: 184.4 on 1 and 44 DF, p-value: < 2.2e-16
```

```
> predict(modL,newdata=data.frame(N.UBkL=14))
```

```
1
77.18117
```

```
> modHL <- lm(WingL~BeakH+N.UBkL)
> summary(modHL)
```

```
Call:
lm(formula = WingL ~ BeakH + N.UBkL)
```

```
Residuals:
```

```
      Min       1Q   Median       3Q      Max
-7.3185 -2.5022 -0.2752  1.5352 16.5893
```

```
Coefficients:
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	48.1740	2.2572	21.343	< 2e-16 ***
BeakH	1.5133	0.2999	5.047	8.69e-06 ***
N.UBkL	0.3984	0.4513	0.883	0.382

```
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
Residual standard error: 3.878 on 43 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.879, Adjusted R-squared:  0.8734
F-statistic: 156.2 on 2 and 43 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

```
> predict(modHL,newdata=data.frame(BeakH=10,N.UBkL=14))
      1
68.88373
```

Welche der drei Vorhersagen 67.4mm, 77.2mm und 68.9mm für die Flügelänge ist am genauesten?

Welche der drei Vorhersagen 67.4mm, 77.2mm und 68.9mm für die Flügellänge ist am genauesten?

Im Modell modHL (mit Schnabellänge und -höhe) ist der Einfluss der Schnabellänge nicht signifikant.

Welche der drei Vorhersagen 67.4mm, 77.2mm und 68.9mm für die Flügellänge ist am genauesten?

Im Modell modHL (mit Schnabellänge und -höhe) ist der Einfluss der Schnabellänge nicht signifikant.

Das muss aber nichts heißen, denn aus Nichtsignifikanz kann man keine Schlüsse ziehen. Die Schnabellänge könnte die Vorhersage verbessern.

Welche der drei Vorhersagen 67.4mm, 77.2mm und 68.9mm für die Flügellänge ist am genauesten?

Im Modell modHL (mit Schnabellänge und -höhe) ist der Einfluss der Schnabellänge nicht signifikant.

Das muss aber nichts heißen, denn aus Nichtsignifikanz kann man keine Schlüsse ziehen. Die Schnabellänge könnte die Vorhersage verbessern.

Sollte man einfach alle verfügbaren Daten einbeziehen?

Welche der drei Vorhersagen 67.4mm, 77.2mm und 68.9mm für die Flügelänge ist am genauesten?

Im Modell modHL (mit Schnabellänge und -höhe) ist der Einfluss der Schnabellänge nicht signifikant.

Das muss aber nichts heißen, denn aus Nichtsignifikanz kann man keine Schlüsse ziehen. Die Schnabellänge könnte die Vorhersage verbessern.

Sollte man einfach alle verfügbaren Daten einbeziehen?

Problem könnte "overfitting" sein: Wenn sehr viele Parameter verfügbar sind wird das Modell auch an die Zufallsschwankungen angepasst. Die Daten werden sozusagen auswendig gelernt. Vorhersagen für andere Daten werden dann schlechter.

Wir könnten die Modelle anhand der Standardabweichung der ε_i verwenden, die wir aus der Standardabweichung der Residuen r_i schätzen.

Wir könnten die Modelle anhand der Standardabweichung der ε_i verwenden, die wir aus der Standardabweichung der Residuen r_i schätzen.

Dabei müssen wir der Unterschiedlichen Anzahl d an Modellparametern Rechnung tragen, denn für jeden geschätzten Parameter verlieren wir einen Freiheitsgrad:

$$\hat{\sigma}_\varepsilon = \sqrt{\frac{1}{n-d} \sum_i r_i^2} = \sigma_r \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n-d}}$$

Wir könnten die Modelle anhand der Standardabweichung der ε_i verwenden, die wir aus der Standardabweichung der Residuen r_i schätzen.

Dabei müssen wir der Unterschiedlichen Anzahl d an Modellparametern Rechnung tragen, denn für jeden geschätzten Parameter verlieren wir einen Freiheitsgrad:

$$\hat{\sigma}_\varepsilon = \sqrt{\frac{1}{n-d} \sum_i r_i^2} = \sigma_r \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n-d}}$$

Diese Werte werden bei R vom Befehl `summary` ausgegeben:

`modH:`

Residual standard error: 3.868 on 44 degrees of freedom

`modL:`

Residual standard error: 4.838 on 44 degrees of freedom

`modHL:`

Residual standard error: 3.878 on 43 degrees of freedom

Eine weitere Möglichkeit, die Vorhersagegenauigkeit eines Modells zu beurteilen, ist die *Kreuzvalidierung* (auch *Jackknife* genannt).

Eine weitere Möglichkeit, die Vorhersagegenauigkeit eines Modells zu beurteilen, ist die *Kreuzvalidierung* (auch *Jackknife* genannt).

Idee: Entferne einen der 46 Vögel aus dem Datensatz und passe das Modell an die anderen 45 an. Wie gut kann man mit dem so angepassten Modell die Flügelänge des einen Vogels vorhersagen?

Eine weitere Möglichkeit, die Vorhersagegenauigkeit eines Modells zu beurteilen, ist die *Kreuzvalidierung* (auch *Jackknife* genannt).

Idee: Entferne einen der 46 Vögel aus dem Datensatz und passe das Modell an die anderen 45 an. Wie gut kann man mit dem so angepassten Modell die Flügellänge des einen Vogels vorhersagen?

Wiederhole das für alle 46 Vögel.

Eine weitere Möglichkeit, die Vorhersagegenauigkeit eines Modells zu beurteilen, ist die *Kreuzvalidierung* (auch *Jackknife* genannt).

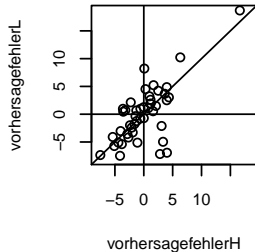
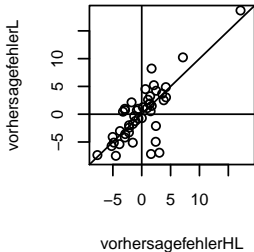
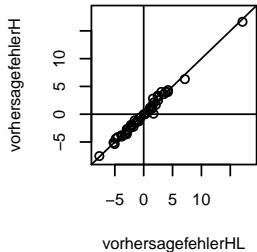
Idee: Entferne einen der 46 Vögel aus dem Datensatz und passe das Modell an die anderen 45 an. Wie gut kann man mit dem so angepassten Modell die Flügelänge des einen Vogels vorhersagen?

Wiederhole das für alle 46 Vögel.

Man muss dann entscheiden, wie Fehler “bestraft” werden. (Ist ein Modell, das häufig kleine Fehler macht besser als eins, das selten große macht?) Wir verwenden hier die Wurzel aus der Summe der quadrierten Fehler.


```
> vorhersagefehlerH <- numeric()
> for (i in 1:46) {
+   selection <- rep(TRUE,46)
+   selection[i] <- FALSE
+   modH.R <- lm(WingL~BeakH,subset=selection)
+   vorhersagefehlerH[i] <- WingL[i]-predict(modH.R,
+                                             finken2[i,])
+ }
> sqrt(sum(vorhersagefehlerH^2))
[1] 26.55519
```

Vergleich der Vorhersagefehler



	Höhe	Länge	Höhe und Länge
$\sigma(\text{Residuen})$	3.83	4.78	3.79

	Höhe	Länge	Höhe und Länge
$\sigma(\text{Residuen})$	3.83	4.78	3.79
$d = (\text{Anzahl Parameter})$	2	2	3

	Höhe	Länge	Höhe und Länge
$\sigma(\text{Residuen})$	3.83	4.78	3.79
$d = (\text{Anzahl Parameter})$	2	2	3
$\sigma(\text{Residuen}) \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n-d}}$	3.87	4.84	3.88

	Höhe	Länge	Höhe und Länge
$\sigma(\text{Residuen})$	3.83	4.78	3.79
$d = (\text{Anzahl Parameter})$	2	2	3
$\sigma(\text{Residuen}) \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n-d}}$	3.87	4.84	3.88
Kreuzvalid.	26.56	33.34	26.68

	Höhe	Länge	Höhe und Länge
$\sigma(\text{Residuen})$	3.83	4.78	3.79
$d = (\text{Anzahl Parameter})$	2	2	3
$\sigma(\text{Residuen}) \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n-d}}$	3.87	4.84	3.88
Kreuzvalid.	26.56	33.34	26.68
AIC	259.0	279.5	260.1

	Höhe	Länge	Höhe und Länge
$\sigma(\text{Residuen})$	3.83	4.78	3.79
$d = (\text{Anzahl Parameter})$	2	2	3
$\sigma(\text{Residuen}) \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n-d}}$	3.87	4.84	3.88
Kreuzvalid.	26.56	33.34	26.68
AIC	259.0	279.5	260.1

Akaikes Informationskriterium:

$$\text{AIC} = -2 \cdot \log L + 2 \cdot (\text{AnzahlParameter})$$

Bayessches Informationskriterium:

$$\text{BIC} = -2 \cdot \log L + \log(n) \cdot (\text{AnzahlParameter})$$

Dabei ist n die Anzahl der Beobachtungen.

	Höhe	Länge	Höhe und Länge
$\sigma(\text{Residuen})$	3.83	4.78	3.79
$d = (\text{Anzahl Parameter})$	2	2	3
$\sigma(\text{Residuen}) \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n-d}}$	3.87	4.84	3.88
Kreuzvalid.	26.56	33.34	26.68
AIC	259.0	279.5	260.1

Akaiikes Informationskriterium:

$$\text{AIC} = -2 \cdot \log L + 2 \cdot (\text{AnzahlParameter})$$

Bayessches Informationskriterium:

$$\text{BIC} = -2 \cdot \log L + \log(n) \cdot (\text{AnzahlParameter})$$

Dabei ist n die Anzahl der Beobachtungen. Für $n \geq 8$ ist $\log(n) > 2$ und BIC bestraft jeden zusätzlichen Parameter stärker als AIC. (Mit log ist wie immer der natürliche Logarithmus gemeint.)

Niedrige Werte von AIC und BIC sprechen für das Modell.

Niedrige Werte von AIC und BIC sprechen für das Modell.
(Zumindest in R. Manche Programme und Autoren geben AIC und BIC mit umgekehrtem Vorzeichen an.)

Niedrige Werte von AIC und BIC sprechen für das Modell.
(Zumindest in R. Manche Programme und Autoren geben AIC und BIC mit umgekehrtem Vorzeichen an.)

AIC basiert auf der Idee, dass ein mit Daten angepasstes Modell bei neuen Daten möglichst präzise Vorhersagen ermöglichen soll. AIC approximiert den Vorhersagefehler für neue Daten.

Niedrige Werte von AIC und BIC sprechen für das Modell.
(Zumindest in R. Manche Programme und Autoren geben AIC und BIC mit umgekehrtem Vorzeichen an.)

AIC basiert auf der Idee, dass ein mit Daten angepasstes Modell bei neuen Daten möglichst präzise Vorhersagen ermöglichen soll. AIC approximiert den Vorhersagefehler für neue Daten.

BIC ist approximiert (bis auf eine Konstante) die logarithmierte a-posteriori-Wahrscheinlichkeit des Modells, wobei a priori alle Modelle als gleich wahrscheinlich angenommen werden.

	Höhe	Länge	Höhe und Länge
$\sigma(\text{Residuen})$	3.83	4.78	3.79
$d = (\text{Anzahl Parameter})$	2	2	3
$\sigma(\text{Residuen}) \cdot \sqrt{\frac{n-1}{n-d}}$	3.87	4.84	3.88
Kreuzvalid.	26.56	33.34	26.68
AIC	259.0	279.5	260.1
BIC	264.4	285.0	267.4

Hier spricht alles dafür, nur die Schnabelhöhe zu berücksichtigen.

Übersicht

- 1 Regression zur Mitte
- 2 Multivariate Regression
 - Beispiel: Artenreichtum an Sandstränden
 - Beispiel: Wirksamkeit von Therapien
- 3 Modellwahl: AIC und Kreuzvalidierung**
 - Beispiel: (Schnabel-)Größen der Darwin-Finken
 - Beispiel: Wasserflöhe**
- 4 Zur Klausur

Fragestellung: reagieren *Daphnia magna* anders auf das Nahrungsangebot als *Daphnia galeata*?

Fragestellung: reagieren *Daphnia magna* anders auf das Nahrungsangebot als *Daphnia galeata*?

Die Daten wurden im Ökologie-Kurs 2009 erhoben und von Justina Wolinska zur Verfügung gestellt.

```
> daph <- read.table("daphnia_justina.csv",h=T)
```

```
> daph
```

	counts	foodlevel	species
1	68	high	magna
2	54	high	magna
3	59	high	magna
4	24	high	galeata
5	27	high	galeata
6	16	high	galeata
7	20	low	magna
8	18	low	magna
9	18	low	magna
10	5	low	galeata
11	8	low	galeata
12	9	low	galeata

```
> mod1 <- lm(counts~foodlevel+species,data=daph)
> mod2 <- lm(counts~foodlevel*species,data=daph)
> anova(mod1,mod2)
```

Analysis of Variance Table

Model 1: counts ~ foodlevel + species

Model 2: counts ~ foodlevel * species

	Res.Df	RSS	Df	Sum of Sq	F	Pr(>F)
1	9	710.00				
2	8	176.67	1	533.33	24.151	0.001172 **

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

```
> summary(mod2)
[...]
```

```
Coefficients:
```

	Estimate	Std.Error	t.value	Pr(> t)	
(Intercept)	22.33	2.713	8.232	3.55e-05	***
countslow	-15.00	3.837	-3.909	0.00449	**
foodlevelmagna	38.00	3.837	9.904	9.12e-06	***
countslow:foodlevelmagna	-26.67	5.426	-4.914	0.00117	**

```
---
```

```
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

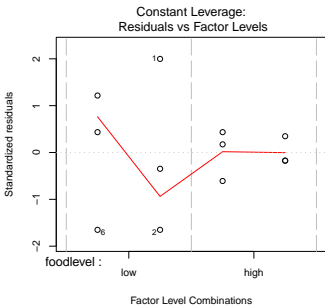
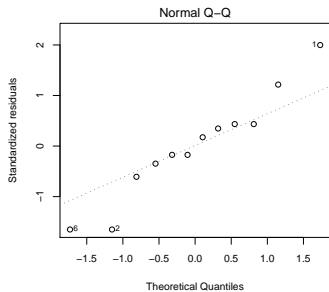
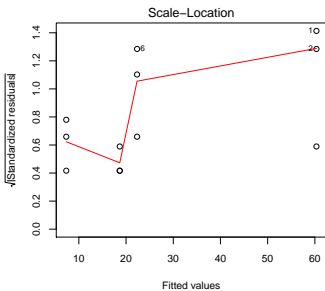
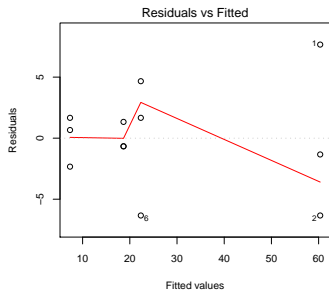
```
Residual standard error: 4.699 on 8 degrees of freedom
```

```
Multiple R-squared: 0.9643, Adjusted R-squared: 0.9509
```

```
F-statistic: 71.95 on 3 and 8 DF,  p-value: 3.956e-06
```

Ergebnis: das komplexere Modell, in dem die Verschiedenen Arten auf unterschiedliche Weise auf Nahrungsknappheit reagieren, passt signifikant besser auf die Daten.

Ergebnis: das komplexere Modell, in dem die Verschiedenen Arten auf unterschiedliche Weise auf Nahrungsknappheit reagieren, passt signifikant besser auf die Daten. Aber passt es gut genug?



```
> mod3 <- lm(log(counts)~foodlevel+species,data=daph)
> mod4 <- lm(log(counts)~foodlevel*species,data=daph)
> anova(mod3,mod4)
```

Analysis of Variance Table

Model 1: $\log(\text{counts}) \sim \text{foodlevel} + \text{species}$

Model 2: $\log(\text{counts}) \sim \text{foodlevel} * \text{species}$

	Res.Df	RSS	Df	Sum of Sq	F	Pr(>F)
1	9	0.38041				
2	8	0.37856	1	0.0018545	0.0392	0.848


```
> summary(mod3)
```

```
Call:
```

```
lm(formula = log(counts) ~ foodlevel + species, data = daph)
```

```
Residuals:
```

Min	1Q	Median	3Q	Max
-0.34017	-0.05915	0.02622	0.13153	0.24762

```
Coefficients:
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)	
(Intercept)	3.0946	0.1028	30.104	2.41e-10	***
foodlevellow	-1.1450	0.1187	-9.646	4.83e-06	***
speciesmagna	0.9883	0.1187	8.326	1.61e-05	***

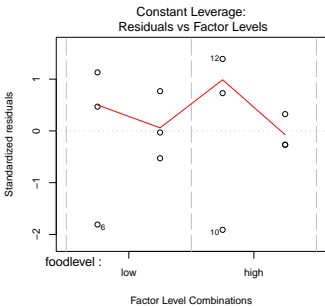
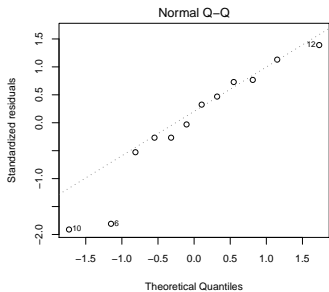
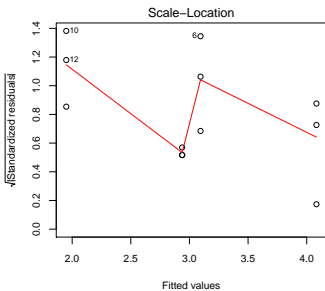
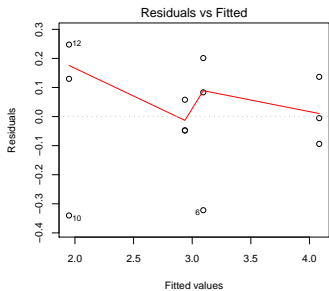
```
---
```

```
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

```
Residual standard error: 0.2056 on 9 degrees of freedom
```

```
Multiple R-squared: 0.9475, Adjusted R-squared: 0.9358
```

```
F-statistic: 81.19 on 2 and 9 DF,  p-value: 1.743e-06
```



Der qqplot sieht schon etwas besser aus, aber nicht ganz optimal.

Der qqplot sieht schon etwas besser aus, aber nicht ganz optimal.

Das liegt aber auch daran, dass wir es hier bei der Zielvariable `counts` z.T. mit kleinen ganzen Zahlen zu tun haben, auf die die Normalverteilungsannahme eigentlich nicht ganz passt.

Der qqplot sieht schon etwas besser aus, aber nicht ganz optimal.

Das liegt aber auch daran, dass wir es hier bei der Zielvariable `counts` z.T. mit kleinen ganzen Zahlen zu tun haben, auf die die Normalverteilungsannahme eigentlich nicht ganz passt.

Statt des normalen linearen Modells könnte man ein verallgemeinert-lineares Modell vom Typ Poisson mit log-Transformation anwenden, aber das geht über den Inhalt der Vorlesung hinaus.

Der qqplot sieht schon etwas besser aus, aber nicht ganz optimal.

Das liegt aber auch daran, dass wir es hier bei der Zielvariable `counts` z.T. mit kleinen ganzen Zahlen zu tun haben, auf die die Normalverteilungsannahme eigentlich nicht ganz passt.

Statt des normalen linearen Modells könnte man ein verallgemeinert-lineares Modell vom Typ Poisson mit log-Transformation anwenden, aber das geht über den Inhalt der Vorlesung hinaus.

Wir begnügen uns daher mit den normalen linearen Modellen und entscheiden uns für eines der bisher betrachteten.

```
> AIC(mod1,mod2,mod3,mod4)
      df      AIC
mod1  4 91.0188246
mod2  5 76.3268216
mod3  4  0.6376449
mod4  5  2.5790019
```

Die log-linearen Modelle haben deutlich bessere AIC-Werte als die linearen Modelle mit den nicht-transformierten Daten.

```
> AIC(mod1,mod2,mod3,mod4)
      df      AIC
mod1  4 91.0188246
mod2  5 76.3268216
mod3  4  0.6376449
mod4  5  2.5790019
```

Die log-linearen Modelle haben deutlich bessere AIC-Werte als die linearen Modelle mit den nicht-transformierten Daten. Die Interaktion in Modell mod4 ist nicht nur nicht-signifikant, das Modell mod3 ohne Interaktion mod3 hat auch einen besseren AIC-Wert.

Vieles spricht also für mod3:

$$\log(\text{counts}) = 3.09 - 1.14 \cdot I_{\text{low food}} + 0.99 \cdot I_{\text{magna}} + \varepsilon$$

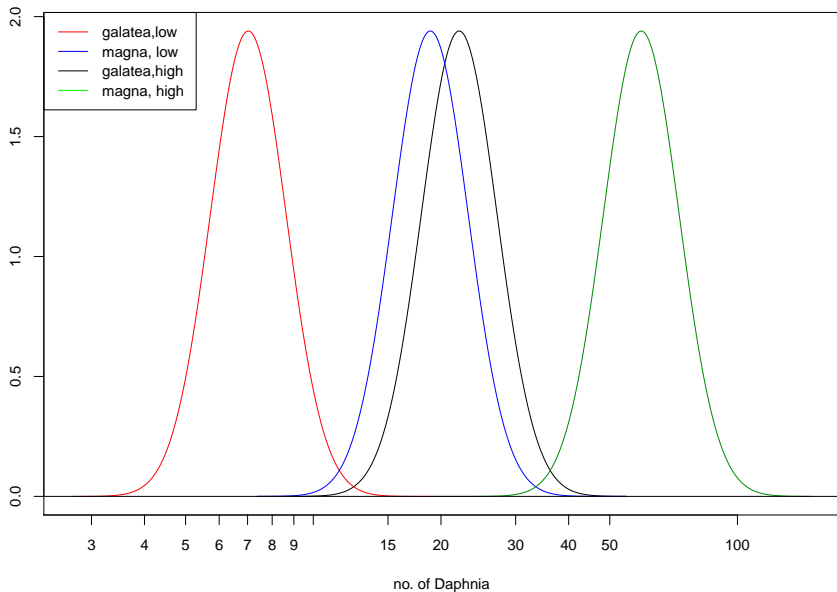
Vieles spricht also für mod3:

$$\log(\text{counts}) = 3.09 - 1.14 \cdot I_{\text{low food}} + 0.99 \cdot I_{\text{magna}} + \varepsilon$$

Anwenden der e -Funktion ergibt:

$$\text{counts} = 21.98 \cdot 0.32^{I_{\text{low food}}} \cdot 2.69^{I_{\text{magna}}} \cdot e^{\varepsilon}$$

prediction of log-linear model



Übersicht

- 1 Regression zur Mitte
- 2 Multivariate Regression
 - Beispiel: Artenreichtum an Sandstränden
 - Beispiel: Wirksamkeit von Therapien
- 3 Modellwahl: AIC und Kreuzvalidierung
 - Beispiel: (Schnabel-)Größen der Darwin-Finken
 - Beispiel: Wasserflöhe
- 4 Zur Klausur

Zur Klausur

20. Juli von 10-12 Uhr (!)

mitbringen:

- 1 Studierendenausweis (wegen der Matrikelnummer)
- 2 Personalausweis (wegen des Lichtbilds)
- 3 Formelblatt
 - DIN A 4
 - nur eigene Handschrift
 - nichts gedrucktes, nichts kopiertes
 - als Formelblatt gekennzeichnet mit abgeben
- 4 nicht programmierbaren Taschenrechner ohne Graphik-Funktion und ohne spezielle Statistik-Funktionen.
- 5 Kugelschreiber und Papier. Schmierpapier, das Sie für Nebenrechnungen verwenden, muss als solches gekennzeichnet und mit der Klausur abgegeben werden.

Klausur: bitte beachten

- Mobiltelefone, Notebooks etc. dürfen nicht mitgeführt werden.
- Jeder Täuschungsversuch führt dazu, dass die Klausur mit “nicht bestanden” bewertet wird.