

# Wahrscheinlichkeitsrechnung und Statistik für Biologen

## **Lineare Regression**

Dirk Metzler & Martin Hutzenthaler

[http://evol.bio.lmu.de/\\_statgen](http://evol.bio.lmu.de/_statgen)

17. Juni 2010

# Übersicht

- 1 Lineare Regression: wozu und wie?
- 2 t-Test fuer lineare Zusammenhänge
- 3 Skalierung der Daten
  - Beispiel: Körper- und Gehirngewicht
  - Beispiel: Mortalität und Einwohnerzahl

# Übersicht

- 1 Lineare Regression: wozu und wie?
- 2 t-Test fuer lineare Zusammenhänge
- 3 Skalierung der Daten
  - Beispiel: Körper- und Gehirngewicht
  - Beispiel: Mortalität und Einwohnerzahl



photo (c) by Jörg Hempel

Englisch: Grif-  
fon Vulture  
*Gyps fulvus*  
Gänsegeier



Prinzinger, R., E. Karl, R. Bögel, Ch. Walzer (1999): Energy metabolism, body temperature, and cardiac work in the Griffon vulture *Gyps vulvus* - telemetric investigations in the laboratory and in the field.

*Zoology* **102**, Suppl. II: 15

- Daten aus der Arbeitsgruppe Stoffwechselfysiologie (Prof. Prinzinger) der Frankfurter Goethe-Universität.
- Telemetrisches System zur Messung der Herzfrequenz bei Vögeln auch während des Fluges.



Prinzinger, R., E. Karl, R. Bögel, Ch. Walzer (1999): Energy metabolism, body temperature, and cardiac work in the Griffon vulture *Gyps vulvus* - telemetric investigations in the laboratory and in the field.

*Zoology* **102**, Suppl. II: 15

- Daten aus der Arbeitsgruppe Stoffwechselphysiologie (Prof. Prinzinger) der Frankfurter Goethe-Universität.
- Telemetrisches System zur Messung der Herzfrequenz bei Vögeln auch während des Fluges.
- Wichtig für ökologische Fragen: die Stoffwechselrate



Prinzinger, R., E. Karl, R. Bögel, Ch. Walzer (1999): Energy metabolism, body temperature, and cardiac work in the Griffon vulture *Gyps vulvus* - telemetric investigations in the laboratory and in the field.  
*Zoology* **102**, Suppl. II: 15

- Daten aus der Arbeitsgruppe Stoffwechselfysiologie (Prof. Prinzinger) der Frankfurter Goethe-Universität.
- Telemetrisches System zur Messung der Herzfrequenz bei Vögeln auch während des Fluges.
- Wichtig für ökologische Fragen: die Stoffwechselrate
- Messung der Stoffwechselrate aufwändig und nur im Labor möglich.

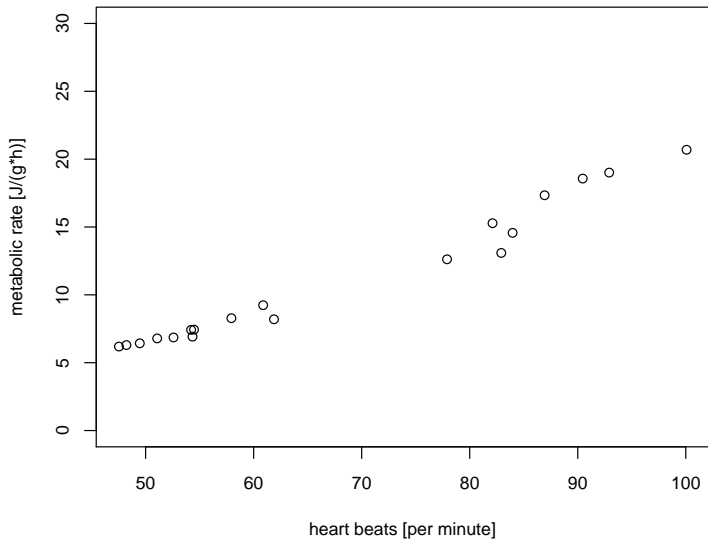


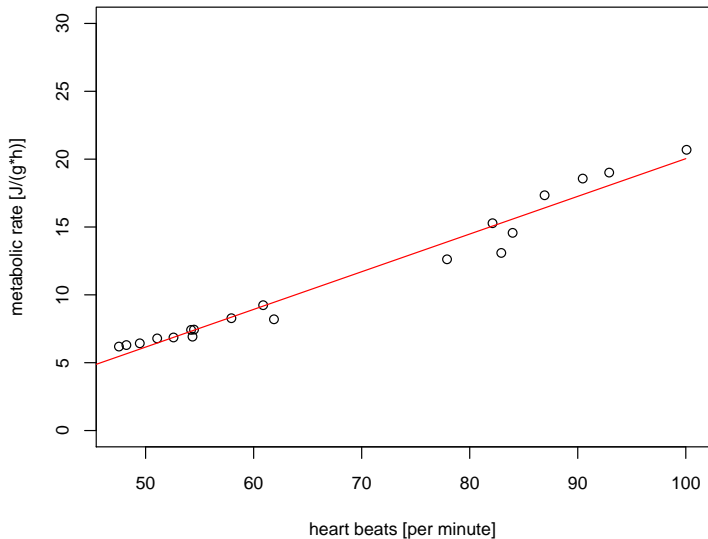
Prinzinger, R., E. Karl, R. Bögel, Ch. Walzer (1999): Energy metabolism, body temperature, and cardiac work in the Griffon vulture *Gyps vulvus* - telemetric investigations in the laboratory and in the field.

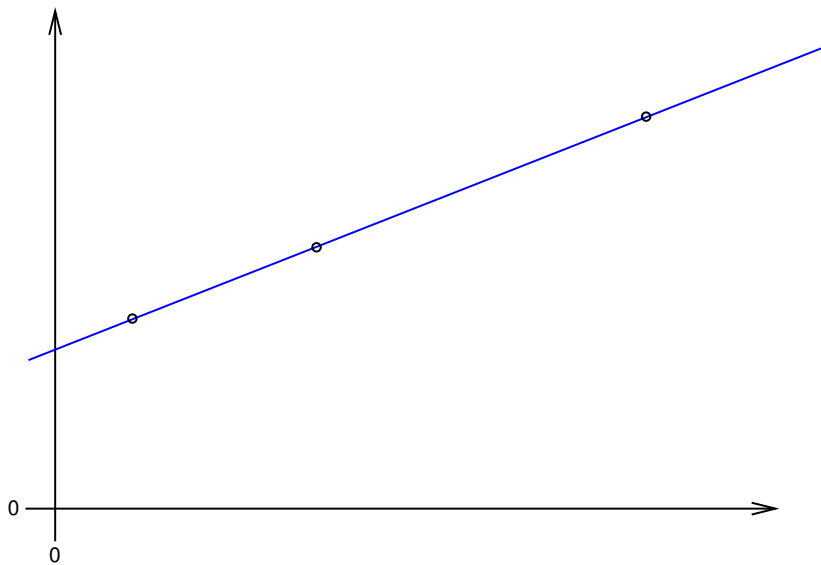
*Zoology* **102**, Suppl. II: 15

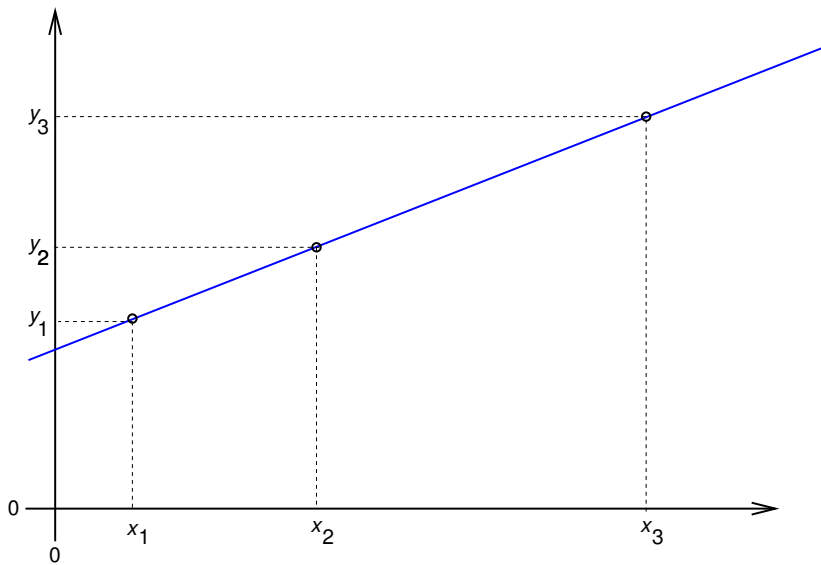
- Daten aus der Arbeitsgruppe Stoffwechselphysiologie (Prof. Prinzinger) der Frankfurter Goethe-Universität.
- Telemetrisches System zur Messung der Herzfrequenz bei Vögeln auch während des Fluges.
- Wichtig für ökologische Fragen: die Stoffwechselrate
- Messung der Stoffwechselrate aufwändig und nur im Labor möglich.
- Können wir von der Herzfrequenz auf die Stoffwechselrate schließen?

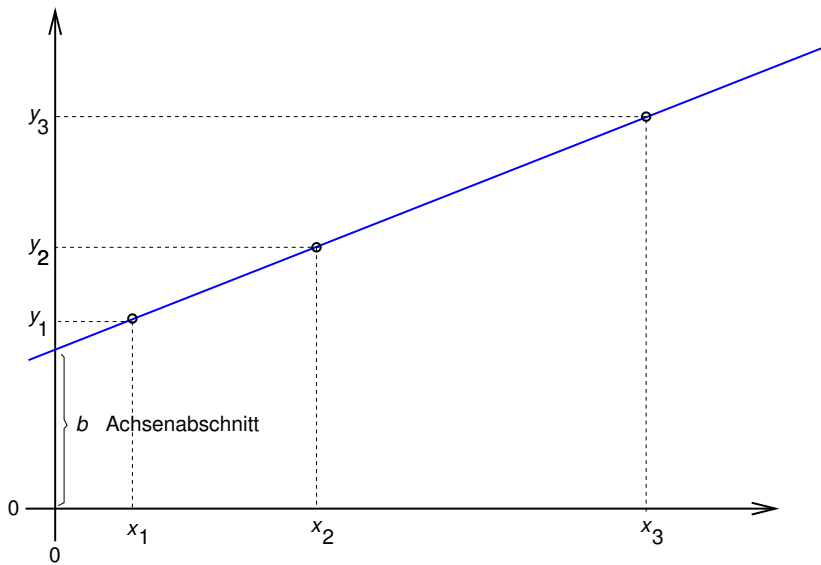


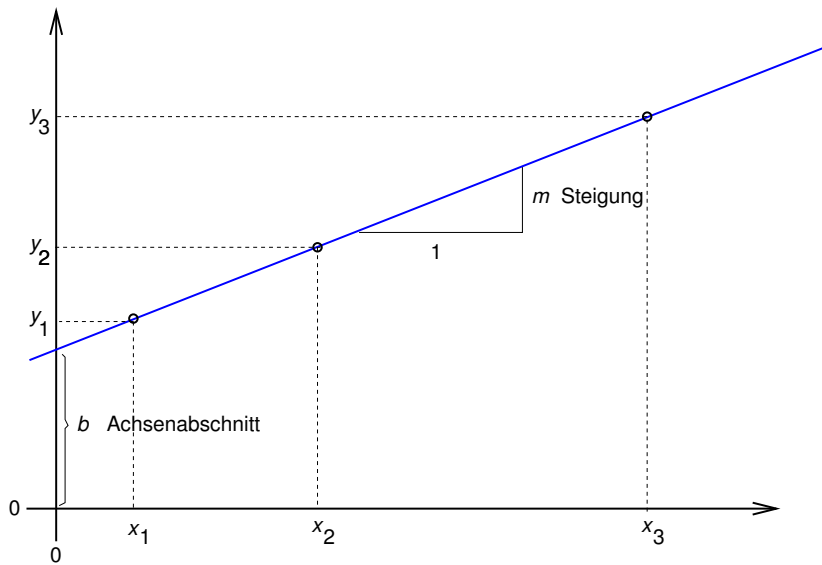
**griffon vulture, 17.05.99, 16 degrees C**

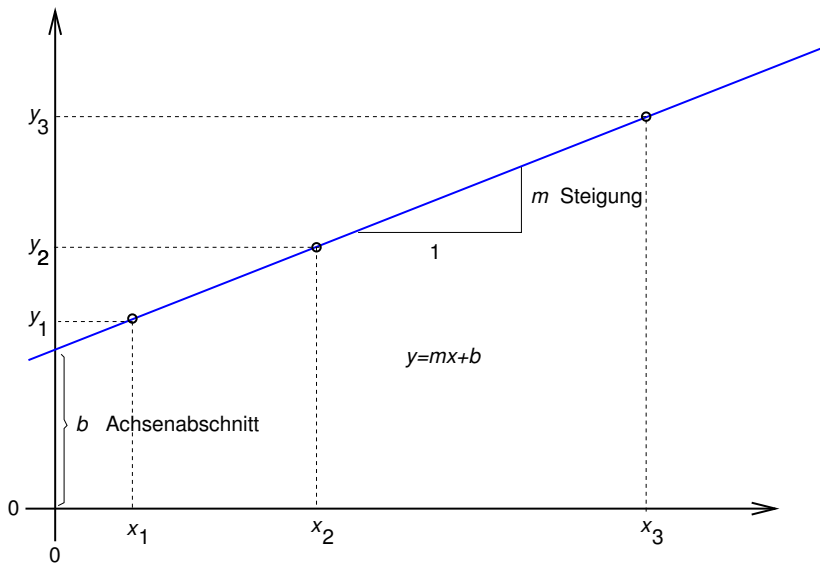
**griffon vulture, 17.05.99, 16 degrees C**

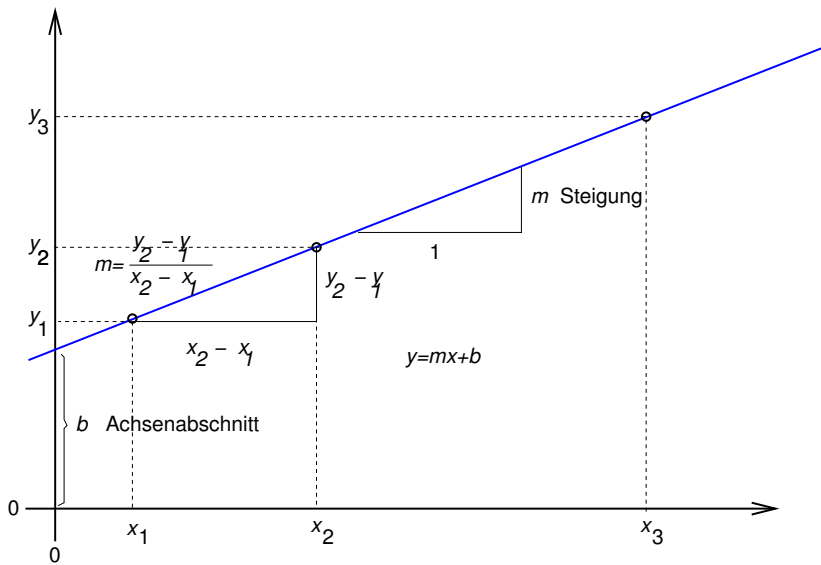




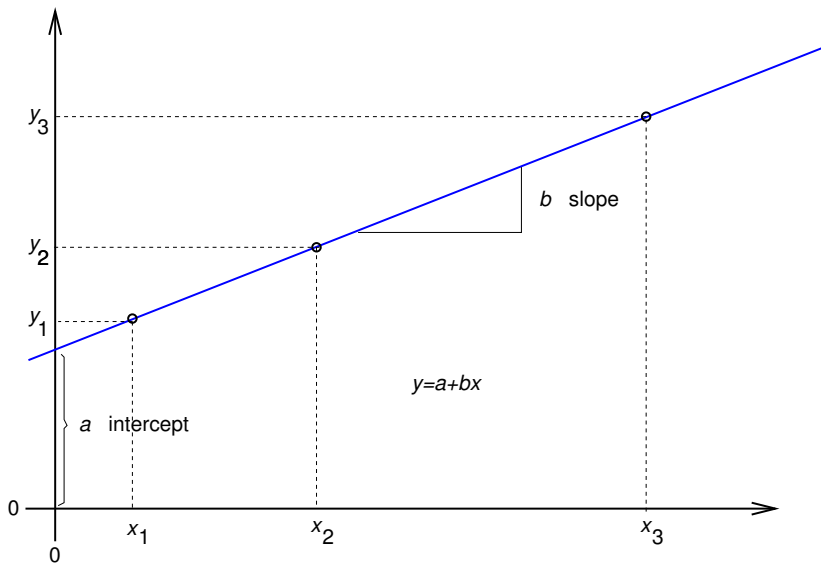


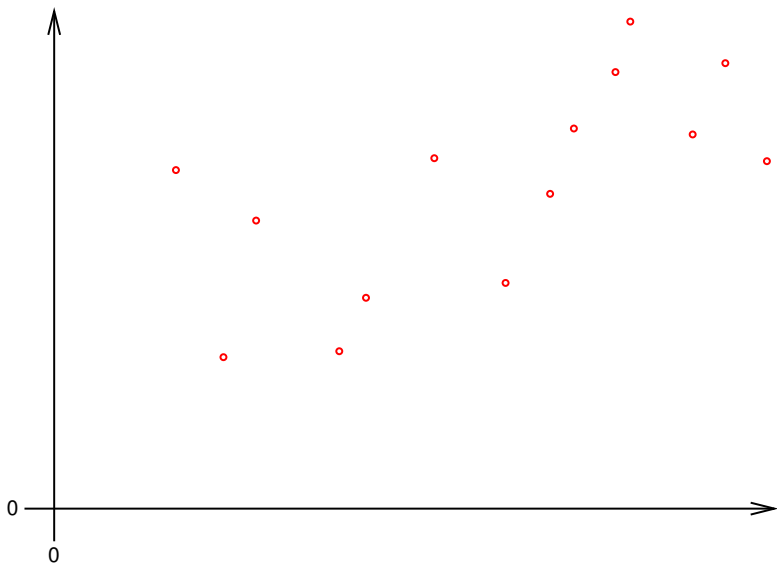


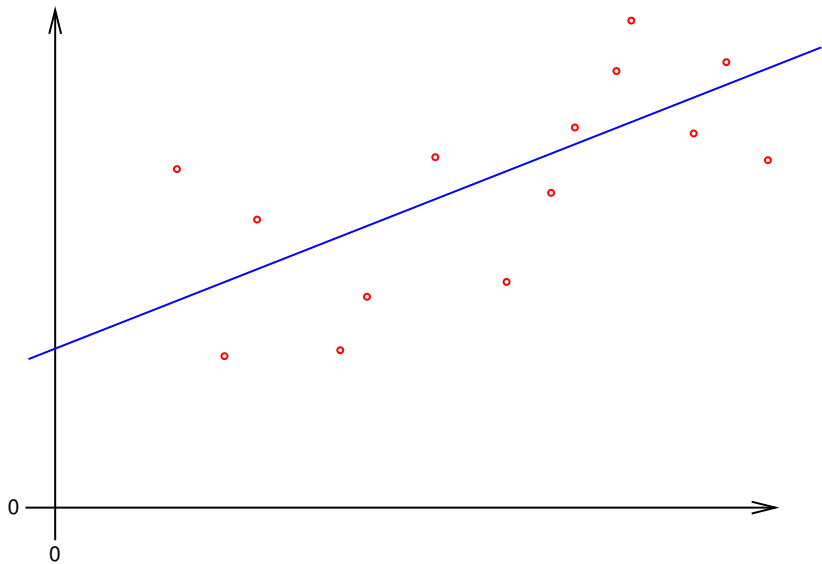


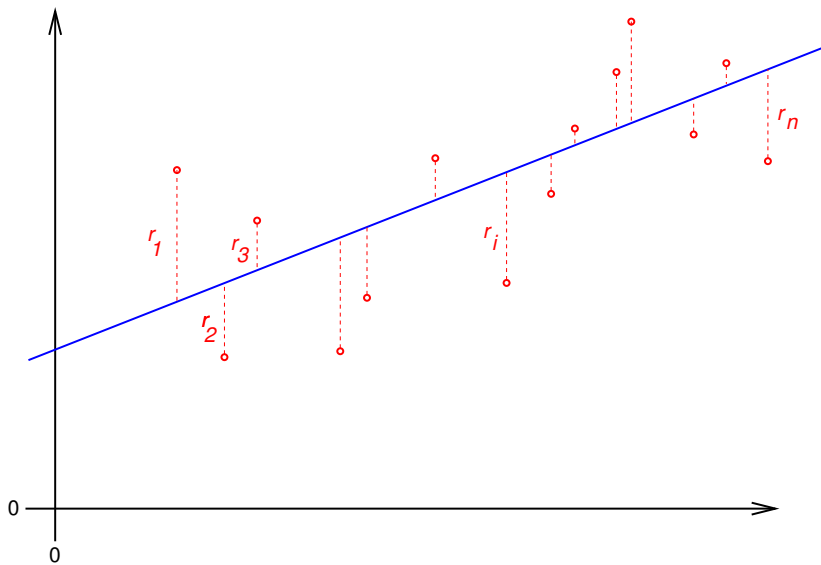


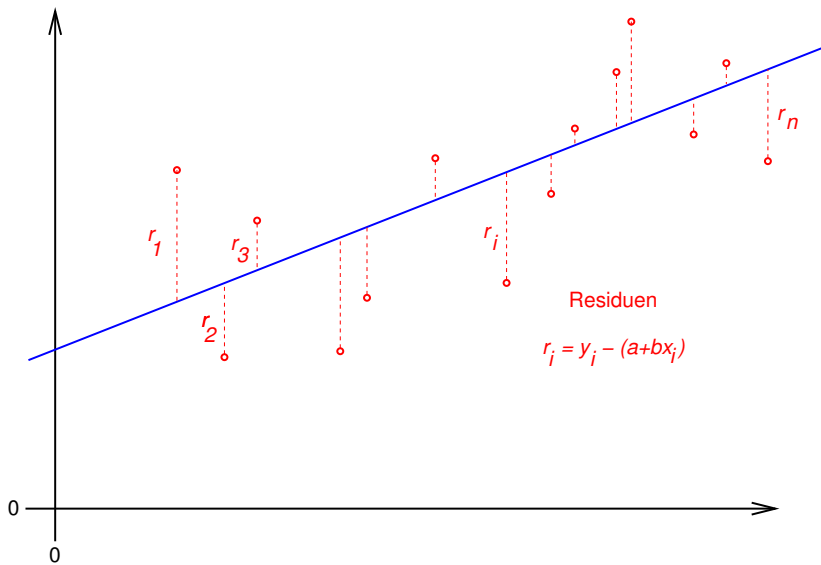


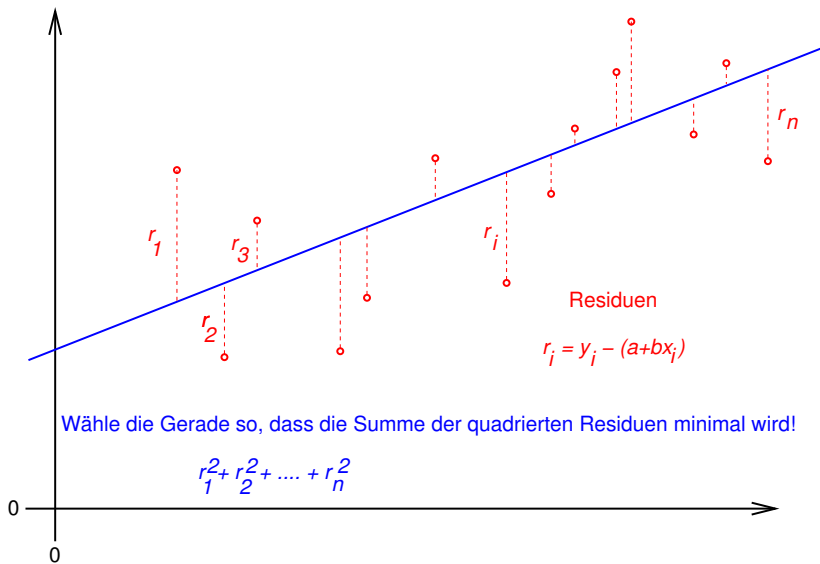












Definiere die Regressionsgerade

$$y = \hat{a} + \hat{b} \cdot x$$

durch die Minimierung der Summe der quadrierten Residuen:

$$(\hat{a}, \hat{b}) = \arg \min_{(a,b)} \sum_i (y_i - (a + b \cdot x_i))^2$$

Dahinter steckt die Modellvorstellung, dass Werte  $a, b$  existieren, so dass für alle Datenpaare  $(x_i, y_i)$  gilt

$$y_i = a + b \cdot x_i + \varepsilon_i,$$

wobei alle  $\varepsilon_i$  unabhängig und normalverteilt sind und alle dieselbe Varianz  $\sigma^2$  haben.

gegebene Daten:

**Y**

**X**

$y_1$

$x_1$

$y_2$

$x_2$

$y_3$

$x_3$

$\vdots$

$\vdots$

$y_n$

$x_n$



gegebene Daten:

<b>Y</b>	<b>X</b>
$y_1$	$x_1$
$y_2$	$x_2$
$y_3$	$x_3$
$\vdots$	$\vdots$
$y_n$	$x_n$

Modell: es gibt Zahlen  
 $a, b, \sigma^2$ , so dass

$$\begin{aligned}y_1 &= a + b \cdot x_1 + \varepsilon_1 \\y_2 &= a + b \cdot x_2 + \varepsilon_2 \\y_3 &= a + b \cdot x_3 + \varepsilon_3 \\&\vdots \\&\vdots \\y_n &= a + b \cdot x_n + \varepsilon_n\end{aligned}$$

gegebene Daten:

<b>Y</b>	<b>X</b>
$y_1$	$x_1$
$y_2$	$x_2$
$y_3$	$x_3$
$\vdots$	$\vdots$
$y_n$	$x_n$

Modell: es gibt Zahlen  
 $a, b, \sigma^2$ , so dass

$$y_1 = a + b \cdot x_1 + \varepsilon_1$$

$$y_2 = a + b \cdot x_2 + \varepsilon_2$$

$$y_3 = a + b \cdot x_3 + \varepsilon_3$$

$$\vdots \quad \vdots$$

$$y_n = a + b \cdot x_n + \varepsilon_n$$

Dabei sind  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$  unabhängig  $\sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ .

gegebene Daten:

<b>Y</b>	<b>X</b>
$y_1$	$x_1$
$y_2$	$x_2$
$y_3$	$x_3$
$\vdots$	$\vdots$
$y_n$	$x_n$

Modell: es gibt Zahlen  
 $a, b, \sigma^2$ , so dass

$$\begin{aligned}
 y_1 &= a + b \cdot x_1 + \varepsilon_1 \\
 y_2 &= a + b \cdot x_2 + \varepsilon_2 \\
 y_3 &= a + b \cdot x_3 + \varepsilon_3 \\
 &\vdots \\
 y_n &= a + b \cdot x_n + \varepsilon_n
 \end{aligned}$$

Dabei sind  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$  unabhängig  $\sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ .

$\Rightarrow y_1, y_2, \dots, y_n$  sind unabhängig  $y_i \sim \mathcal{N}(a + b \cdot x_i, \sigma^2)$ .

gegebene Daten:

<b>Y</b>	<b>X</b>
$y_1$	$x_1$
$y_2$	$x_2$
$y_3$	$x_3$
$\vdots$	$\vdots$
$y_n$	$x_n$

Modell: es gibt Zahlen  
 $a, b, \sigma^2$ , so dass

$$y_1 = a + b \cdot x_1 + \varepsilon_1$$

$$y_2 = a + b \cdot x_2 + \varepsilon_2$$

$$y_3 = a + b \cdot x_3 + \varepsilon_3$$

$$\vdots \quad \vdots$$

$$y_n = a + b \cdot x_n + \varepsilon_n$$

Dabei sind  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$  unabhängig  $\sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$ .

$\Rightarrow y_1, y_2, \dots, y_n$  sind unabhängig  $y_i \sim \mathcal{N}(a + b \cdot x_i, \sigma^2)$ .

$a, b, \sigma^2$  sind unbekannt, aber **nicht zufällig**.

Wir schätzen  $a$  und  $b$ , indem wir

$$(\hat{a}, \hat{b}) := \arg \min_{(a,b)} \sum_i (y_i - (a + b \cdot x_i))^2 \quad \text{berechnen.}$$

Wir schätzen  $a$  und  $b$ , indem wir

$$(\hat{a}, \hat{b}) := \arg \min_{(a,b)} \sum_i (y_i - (a + b \cdot x_i))^2 \quad \text{berechnen.}$$

## Theorem

*Man kann  $\hat{a}$  und  $\hat{b}$  berechnen durch*

$$\hat{b} = \frac{\sum_i (y_i - \bar{y}) \cdot (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} = \frac{\sum_i y_i \cdot (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$$

*und*

$$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b} \cdot \bar{x}.$$

Wir schätzen  $a$  und  $b$ , indem wir

$$(\hat{a}, \hat{b}) := \arg \min_{(a,b)} \sum_i (y_i - (a + b \cdot x_i))^2 \quad \text{berechnen.}$$

## Theorem

Man kann  $\hat{a}$  und  $\hat{b}$  berechnen durch

$$\hat{b} = \frac{\sum_i (y_i - \bar{y}) \cdot (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} = \frac{\sum_i y_i \cdot (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$$

und

$$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b} \cdot \bar{x}.$$

## Bitte merken:

Die Gerade  $y = \hat{a} + \hat{b} \cdot x$  geht genau durch den Schwerpunkt der Punktwolke  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ .

# Beweisskizze zum Theorem

Sei  $g(a, b) = \sum_i (y_i - (a + b \cdot x_i))^2$ . Wir optimieren  $g$ , indem wir die Ableitungen von  $g$

$$\frac{\partial g(a, b)}{\partial a} = \sum_i 2 \cdot (y_i - (a + bx_i)) \cdot (-1)$$

$$\frac{\partial g(a, b)}{\partial b} = \sum_i 2 \cdot (y_i - (a + bx_i)) \cdot (-x_i)$$

nach beiden Variablen auf 0 setzen, und erhalten:

$$0 = \sum_i (y_i - (\hat{a} + \hat{b}x_i)) \cdot (-1)$$

$$0 = \sum_i (y_i - (\hat{a} + \hat{b}x_i)) \cdot (-x_i)$$



$$0 = \sum_i (y_i - (\hat{a} + \hat{b}x_i))$$

$$0 = \sum_i (y_i - (\hat{a} + \hat{b}x_i)) \cdot x_i$$

kann man ausmultiplizieren zu

$$0 = \left( \sum_i y_i \right) - n \cdot \hat{a} - \hat{b} \cdot \left( \sum_i x_i \right)$$

$$0 = \left( \sum_i y_i x_i \right) - \hat{a} \cdot \left( \sum_i x_i \right) - \hat{b} \cdot \left( \sum_i x_i^2 \right)$$

und das Theorem folgt durch Auflösen nach  $\hat{a}$  und  $\hat{b}$ . □

vulture

	day	heartbpm	metabol	minTemp	maxTemp	medtemp
1	01.04./02.04.	70.28	11.51	-6	2	-2.0
2	01.04./02.04.	66.13	11.07	-6	2	-2.0
3	01.04./02.04.	58.32	10.56	-6	2	-2.0
4	01.04./02.04.	58.63	10.62	-6	2	-2.0
5	01.04./02.04.	58.05	9.52	-6	2	-2.0
6	01.04./02.04.	66.37	7.19	-6	2	-2.0
7	01.04./02.04.	62.43	8.78	-6	2	-2.0
8	01.04./02.04.	65.83	8.24	-6	2	-2.0
9	01.04./02.04.	47.90	7.47	-6	2	-2.0
10	01.04./02.04.	51.29	7.83	-6	2	-2.0
11	01.04./02.04.	57.20	9.18	-6	2	-2.0
.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.
.	.	.	.	.	.	.

(14 different days)

```

> model <- lm(metabol~heartbpm,data=vulture,
              subset=day=="17.05.")
> summary(model)
Call:
lm(formula = metabol ~ heartbpm, data = vulture,
    subset = day == "17.05.")
Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-2.2026 -0.2555  0.1005  0.6393  1.1834
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -7.73522     0.84543  -9.149 5.60e-08 ***
heartbpm     0.27771     0.01207  23.016 2.98e-14 ***
---
Signif. codes:  0 *** 0.001 ** 0.01 * 0.05 . 0.1 1
Residual standard error: 0.912 on 17 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9689, Adjusted R-squared:  0.9671
F-statistic: 529.7 on 1 and 17 DF,  p-value: 2.979e-14

```

# Optimierung der Gelegegröße

Beispiel:

Der Erbsensamenkäfer

*Callosobruchus maculatus*

englisch: *Cowpea weevil* oder auch *bruchid beetle*

# Optimierung der Gelegegröße

Beispiel:

Der Erbsensamenkäfer

*Callosobruchus maculatus*

englisch: *Cowpea weevil* oder auch *bruchid beetle*



Wilson, K. (1994) Evolution of clutch size in insects. II. A test of static optimality models using the beetle *Callosobruchus maculatus* (Coleoptera: Bruchidae).

*Journal of Evolutionary Biology* **7**: 365–386.

Wie hängt die Überlebenswahrscheinlichkeit von der Gelegegröße ab?

# Optimierung der Gelegegröße

Beispiel:

Der Erbsensamenkäfer

*Callosobruchus maculatus*

englisch: *Cowpea weevil* oder auch *bruchid beetle*

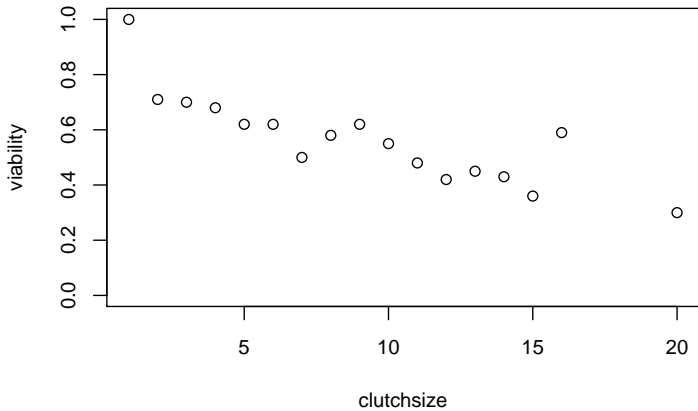


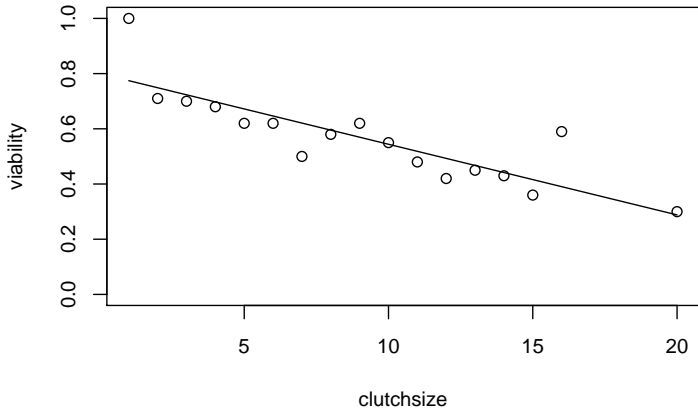
Wilson, K. (1994) Evolution of clutch size in insects. II. A test of static optimality models using the beetle *Callosobruchus maculatus* (Coleoptera: Bruchidae).

*Journal of Evolutionary Biology* **7**: 365–386.

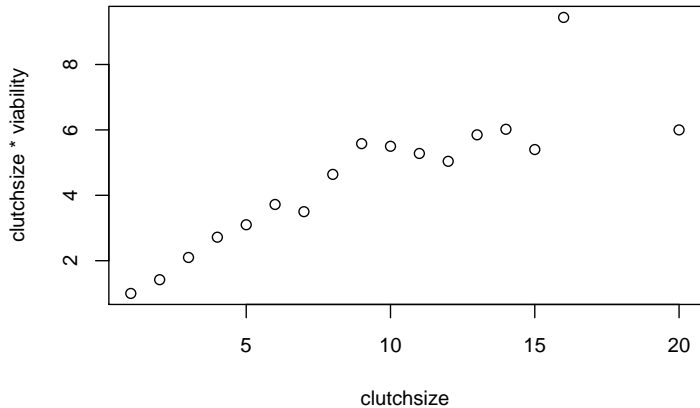
Wie hängt die Überlebenswahrscheinlichkeit von der Gelegegröße ab?

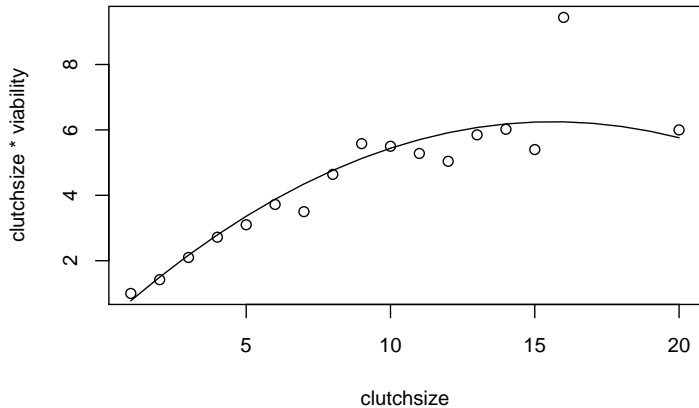
Mit welcher Gelegegröße wird die erwartete Anzahl Nachkommen optimiert?











# Übersicht

- 1 Lineare Regression: wozu und wie?
- 2 t-Test fuer lineare Zusammenhänge**
- 3 Skalierung der Daten
  - Beispiel: Körper- und Gehirngewicht
  - Beispiel: Mortalität und Einwohnerzahl

# Beispiel: Rothirsch (*Cervus elaphus*)

Theorie: Hirschkühe können das Geschlecht ihrer Nachkommen beeinflussen.

# Beispiel: Rothirsch (*Cervus elaphus*)

Theorie: Hirschkühe können das Geschlecht ihrer Nachkommen beeinflussen.

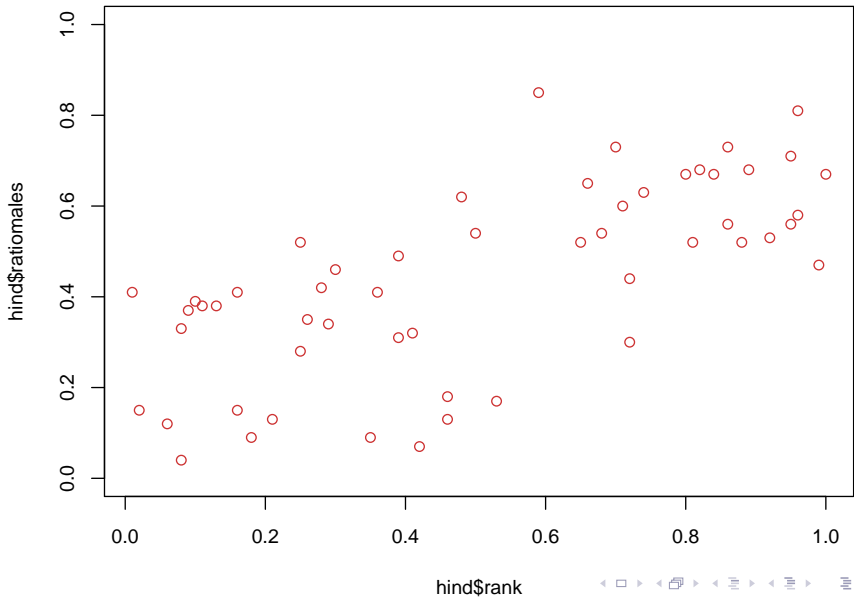
Unter dem Gesichtspunkt evolutionär stabiler Strategien ist zu erwarten, dass schwache Tiere eher zu weiblichem und starke Tiere eher zu männlichem Nachwuchs tendieren.

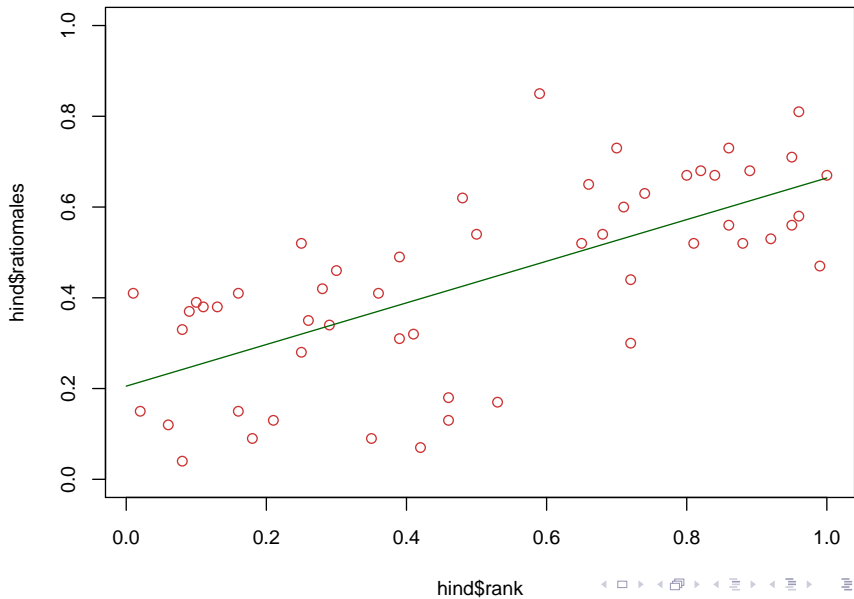


Clutton-Brock, T. H. , Albon, S. D., Guinness, F. E. (1986)  
Great expectations: dominance, breeding success and  
offspring sex ratios in red deer.  
*Anim. Behav.* **34**, 460-471.

```
> hind
  rank rationales
1 0.01      0.41
2 0.02      0.15
3 0.06      0.12
4 0.08      0.04
5 0.08      0.33
6 0.09      0.37
.  .        .
.  .        .
.  .        .
52 0.96     0.81
53 0.99     0.47
54 1.00     0.67
```

**ACHTUNG:** Simulierte Daten, die sich an den Daten aus der Originalpublikation lediglich orientieren.







```
> mod <- lm(ratiomales~rank,data=hind)
```

```
> summary(mod)
```

```
Call:
```

```
lm(formula = ratiomales ~ rank, data = hind)
```

```
Residuals:
```

	Min	1Q	Median	3Q	Max
	-0.32798	-0.09396	0.02408	0.11275	0.37403

```
Coefficients:
```

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t )	
(Intercept)	0.20529	0.04011	5.119	4.54e-06	***
rank	0.45877	0.06732	6.814	9.78e-09	***

```
---
```

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

```
Residual standard error: 0.154 on 52 degrees of freedom
```

```
Multiple R-squared: 0.4717, Adjusted R-squared: 0.4616
```

```
F-statistic: 46.44 on 1 and 52 DF, p-value: 9.78e-09
```

Modell:

$$Y = a + b \cdot X + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

Modell:

$$Y = a + b \cdot X + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

Wie berechnet man die Signifikanz eines Zusammenhangs zwischen dem *erklärenden Merkmal*  $X$  und der *Zielgröße*  $Y$ ?

Modell:

$$Y = a + b \cdot X + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

Wie berechnet man die Signifikanz eines Zusammenhangs zwischen dem *erklärenden Merkmal*  $X$  und der *Zielgröße*  $Y$ ?

Anders formuliert: Mit welchem Test können wir der Nullhypothese  $b = 0$  zu Leibe rücken?

Modell:

$$Y = a + b \cdot X + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

Wie berechnet man die Signifikanz eines Zusammenhangs zwischen dem *erklärenden Merkmal*  $X$  und der *Zielgröße*  $Y$ ?

Anders formuliert: Mit welchem Test können wir der Nullhypothese  $b = 0$  zu Leibe rücken?

Wir haben  $b$  durch  $\hat{b}$  geschätzt (und gehen jetzt mal von  $\hat{b} \neq 0$  aus). Könnte das wahre  $b$  auch 0 sein?

Modell:

$$Y = a + b \cdot X + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

Wie berechnet man die Signifikanz eines Zusammenhangs zwischen dem *erklärenden Merkmal*  $X$  und der *Zielgröße*  $Y$ ?

Anders formuliert: Mit welchem Test können wir der Nullhypothese  $b = 0$  zu Leibe rücken?

Wir haben  $b$  durch  $\hat{b}$  geschätzt (und gehen jetzt mal von  $\hat{b} \neq 0$  aus). Könnte das wahre  $b$  auch 0 sein?

Wie groß ist der Standardfehler unserer Schätzung  $\hat{b}$ ?

$$y_i = a + b \cdot x_i + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

nicht zufällig:  $a, b, x_i, \sigma^2$       zufällig:  $\varepsilon, y_i$

$$\text{var}(y_i) = \text{var}(a + b \cdot x_i + \varepsilon) = \text{var}(\varepsilon) = \sigma^2$$

und  $y_1, y_2, \dots, y_n$  sind stochastisch unabhängig.

$$y_i = a + b \cdot x_i + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

nicht zufällig:  $a, b, x_i, \sigma^2$       zufällig:  $\varepsilon, y_i$

$$\text{var}(y_i) = \text{var}(a + b \cdot x_i + \varepsilon) = \text{var}(\varepsilon) = \sigma^2$$

und  $y_1, y_2, \dots, y_n$  sind stochastisch unabhängig.

$$\hat{b} = \frac{\sum_i y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$$



$$y_i = a + b \cdot x_i + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

nicht zufällig:  $a, b, x_i, \sigma^2$       zufällig:  $\varepsilon, y_i$

$$\text{var}(y_i) = \text{var}(a + b \cdot x_i + \varepsilon) = \text{var}(\varepsilon) = \sigma^2$$

und  $y_1, y_2, \dots, y_n$  sind stochastisch unabhängig.

$$\hat{b} = \frac{\sum_i y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$$

$$\text{var}(\hat{b}) = \text{var}\left(\frac{\sum_i y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}\right) = \frac{\text{var}(\sum_i y_i (x_i - \bar{x}))}{(\sum_i (x_i - \bar{x})^2)^2}$$

$$y_i = a + b \cdot x_i + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

nicht zufällig:  $a, b, x_i, \sigma^2$       zufällig:  $\varepsilon, y_i$

$$\text{var}(y_i) = \text{var}(a + b \cdot x_i + \varepsilon) = \text{var}(\varepsilon) = \sigma^2$$

und  $y_1, y_2, \dots, y_n$  sind stochastisch unabhängig.

$$\hat{b} = \frac{\sum_i y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$$

$$\begin{aligned} \text{var}(\hat{b}) &= \text{var} \left( \frac{\sum_i y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} \right) = \frac{\text{var}(\sum_i y_i (x_i - \bar{x}))}{(\sum_i (x_i - \bar{x})^2)^2} \\ &= \frac{\sum_i \text{var}(y_i) (x_i - \bar{x})^2}{(\sum_i (x_i - \bar{x})^2)^2} = \sigma^2 \cdot \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}{(\sum_i (x_i - \bar{x})^2)^2} \end{aligned}$$

$$y_i = a + b \cdot x_i + \varepsilon \quad \text{mit } \varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2)$$

nicht zufällig:  $a, b, x_i, \sigma^2$       zufällig:  $\varepsilon, y_i$

$$\text{var}(y_i) = \text{var}(a + b \cdot x_i + \varepsilon) = \text{var}(\varepsilon) = \sigma^2$$

und  $y_1, y_2, \dots, y_n$  sind stochastisch unabhängig.

$$\hat{b} = \frac{\sum_i y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}$$

$$\begin{aligned} \text{var}(\hat{b}) &= \text{var} \left( \frac{\sum_i y_i (x_i - \bar{x})}{\sum_i (x_i - \bar{x})^2} \right) = \frac{\text{var}(\sum_i y_i (x_i - \bar{x}))}{(\sum_i (x_i - \bar{x})^2)^2} \\ &= \frac{\sum_i \text{var}(y_i) (x_i - \bar{x})^2}{(\sum_i (x_i - \bar{x})^2)^2} = \sigma^2 \cdot \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}{(\sum_i (x_i - \bar{x})^2)^2} \\ &= \sigma^2 / \sum_i (x_i - \bar{x})^2 \end{aligned}$$

Tatsächlich ist  $\hat{b}$  Normalverteilt mit Mittelwert  $b$  und

$$\text{var}(\hat{b}) = \sigma^2 / \sum_i (x_i - \bar{x})^2$$

Tatsächlich ist  $\hat{b}$  Normalverteilt mit Mittelwert  $b$  und

$$\text{var}(\hat{b}) = \sigma^2 / \sum_i (x_i - \bar{x})^2$$

**Problem:** Wir kennen  $\sigma^2$  nicht.

Tatsächlich ist  $\hat{b}$  Normalverteilt mit Mittelwert  $b$  und

$$\text{var}(\hat{b}) = \sigma^2 / \sum_i (x_i - \bar{x})^2$$

**Problem:** Wir kennen  $\sigma^2$  nicht.

Wir schätzen  $\sigma^2$  mit Hilfe der beobachteten Residuenvarianz durch

$$s^2 := \frac{\sum_i (y_i - \hat{a} - \hat{b} \cdot x_i)^2}{n - 2}$$

Tatsächlich ist  $\hat{b}$  Normalverteilt mit Mittelwert  $b$  und

$$\text{var}(\hat{b}) = \sigma^2 / \sum_i (x_i - \bar{x})^2$$

**Problem:** Wir kennen  $\sigma^2$  nicht.

Wir schätzen  $\sigma^2$  mit Hilfe der beobachteten Residuenvarianz durch

$$s^2 := \frac{\sum_i (y_i - \hat{a} - \hat{b} \cdot x_i)^2}{n - 2}$$

Zu beachten ist, dass durch  $n - 2$  geteilt wird. Das hat damit zu tun, dass zwei Modellparameter  $a$  und  $b$  bereits geschätzt wurden, und somit 2 Freiheitsgrade verloren gegangen sind.

$$\text{var}(\hat{b}) = \sigma^2 / \sum_i (x_i - \bar{x})^2$$

Schätze  $\sigma^2$  durch

$$s^2 = \frac{\sum_i (y_i - \hat{a} - \hat{b} \cdot x_i)^2}{n - 2}$$

Dann ist

$$\frac{\hat{b} - b}{s / \sqrt{\sum_i (x_i - \bar{x})^2}}$$

Student- $t$ -verteilt mit  $n - 2$  Freiheitsgraden und wir können den  $t$ -Test anwenden, um die Nullhypothese  $b = 0$  zu testen.



# Übersicht

- 1 Lineare Regression: wozu und wie?
- 2 t-Test fuer lineare Zusammenhänge
- 3 Skalierung der Daten**
  - Beispiel: Körper- und Gehirngewicht
  - Beispiel: Mortalität und Einwohnerzahl

# Übersicht

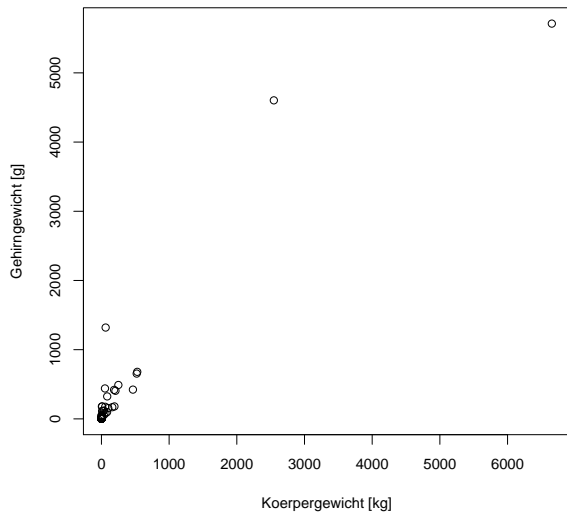
- 1 Lineare Regression: wozu und wie?
- 2 t-Test fuer lineare Zusammenhänge
- 3 Skalierung der Daten**
  - Beispiel: Körper- und Gehirngewicht
  - Beispiel: Mortalität und Einwohnerzahl

# Daten: Typisches Körpergewicht [kg] und Gehirngewicht [g] von 62 Säugetierarten (und 3 Dinosaurierarten)

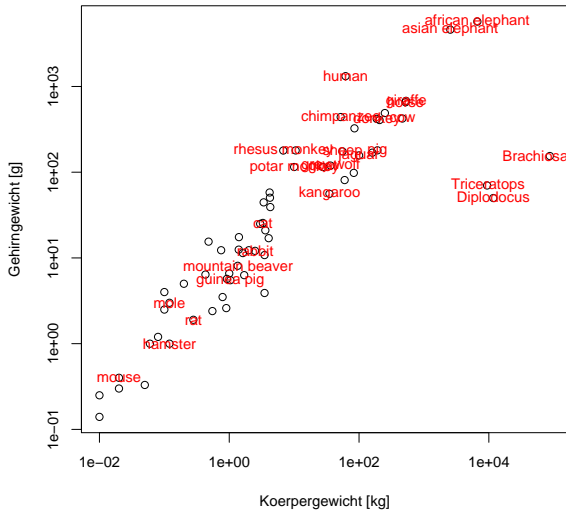
```
> data
```

```
weight.kg. brain.weight.g      species extinct
1      6654.00      5712.00 african elephant  no
2         1.00         6.60                no
3         3.39        44.50                no
4         0.92         5.70                no
5     2547.00      4603.00  asian elephant  no
6        10.55       179.50                no
7         0.02         0.30                no
8       160.00       169.00                no
9         3.30        25.60                cat  no
10       52.16       440.00 chimpanzee  no
11        0.43         6.40
.         .         .         .
.         .         .         .
.         .         .         .
```

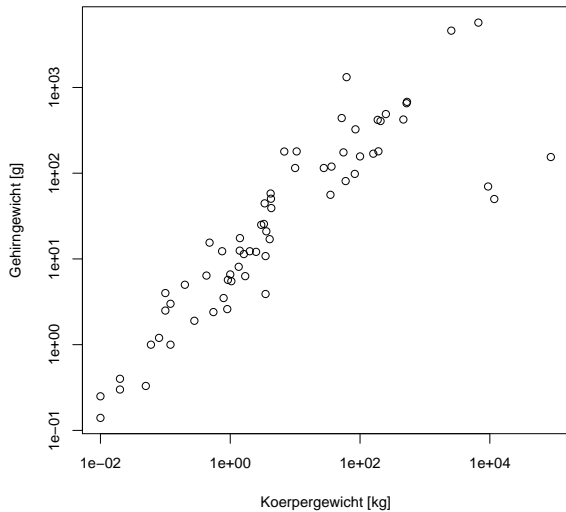
## typische Werte bei 62 Saeugeierarten



## typische Werte bei 65 Säugetierarten



## typische Werte bei 65 Saeugeierarten



```
> modell <- lm(brain.weight.g~weight.kg.,subset=extinct=="no")
> summary(modell)
Call:
lm(formula = brain.weight.g ~ weight.kg., subset = extinct ==
    "no")
Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-809.95  -87.43  -78.55  -31.17 2051.05
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)  89.91213   43.58134    2.063  0.0434 *
weight.kg.    0.96664    0.04769   20.269 <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 *** 0.001 ** 0.01 * 0.05 . 0.1 1
Residual standard error: 334.8 on 60 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8726, Adjusted R-squared:  0.8704
F-statistic: 410.8 on 1 and 60 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Wie gut passt das Modell  $Y_i = a + b \cdot X_i + \varepsilon_i$ ?



Wie gut passt das Modell  $Y_i = a + b \cdot X_i + \varepsilon_i$ ?

Sind die Residuen  $r_i = Y_i - (\hat{a} + \hat{b} \cdot X_i)$  einigermaßen normalverteilt?

Wie gut passt das Modell  $Y_i = a + b \cdot X_i + \varepsilon_i$ ?

Sind die Residuen  $r_i = Y_i - (\hat{a} + \hat{b} \cdot X_i)$  einigermaßen normalverteilt?

Graphische Methode: vergleiche die theoretischen Quantile der Standardnormalverteilung  $\mathcal{N}(0, 1)$  mit denen der Residuen.

Wie gut passt das Modell  $Y_i = a + b \cdot X_i + \varepsilon_i$ ?

Sind die Residuen  $r_i = Y_i - (\hat{a} + \hat{b} \cdot X_i)$  einigermaßen normalverteilt?

Graphische Methode: vergleiche die theoretischen Quantile der Standardnormalverteilung  $\mathcal{N}(0, 1)$  mit denen der Residuen.

Hintergrund: trägt man die Quantile von  $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$  gegen die von  $\mathcal{N}(0, 1)$  auf, so erhält man die Gerade  $y(x) = \mu + \sigma \cdot x$ .

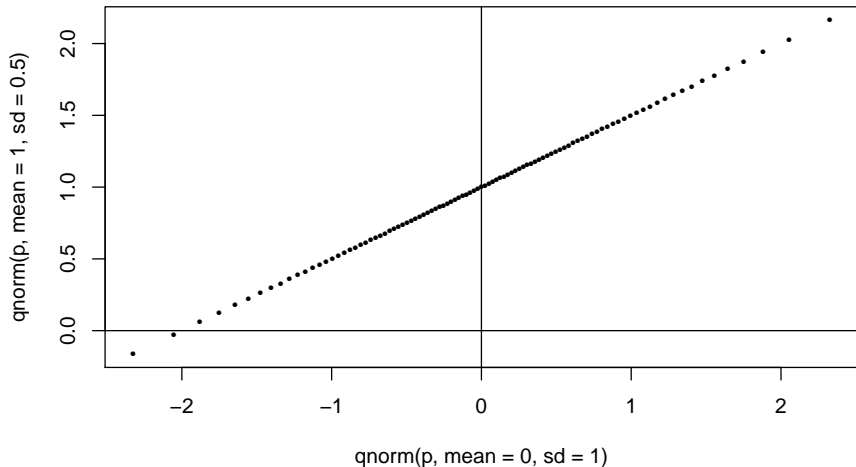
Wie gut passt das Modell  $Y_i = a + b \cdot X_i + \varepsilon_i$ ?

Sind die Residuen  $r_i = Y_i - (\hat{a} + \hat{b} \cdot X_i)$  einigermaßen normalverteilt?

Graphische Methode: vergleiche die theoretischen Quantile der Standardnormalverteilung  $\mathcal{N}(0, 1)$  mit denen der Residuen.

Hintergrund: trägt man die Quantile von  $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$  gegen die von  $\mathcal{N}(0, 1)$  auf, so erhält man die Gerade  $y(x) = \mu + \sigma \cdot x$ . (Grund: Ist  $X$  standardnormalverteilt und  $Y = a + b \cdot X$ , so ist  $Y$  normalverteilt mit Mittelwert  $a$  and Varianz  $b^2$ .)

```
p <- seq(from=0,to=1,by=0.01)
plot(qnorm(p,mean=0,sd=1),qnorm(p,mean=1,sd=0.5),
      pch=16,cex=0.5)
abline(v=0,h=0)
```



Seien  $R_1, R_2, \dots, R_n$  unabhängig gemäß einer Normalverteilung erzeugt.

Seien  $R_1, R_2, \dots, R_n$  unabhängig gemäß einer Normalverteilung erzeugt.

Trägt man statt der theoretischen Quantile die empirischen Quantile von  $R_1, \dots, R_n$  gegen die Quantile einer Normalverteilung auf, so liegen die Werte nicht genau auf einer Geraden, aber in der Nähe einer Geraden.

Seien  $R_1, R_2, \dots, R_n$  unabhängig gemäß einer Normalverteilung erzeugt.

Trägt man statt der theoretischen Quantile die empirischen Quantile von  $R_1, \dots, R_n$  gegen die Quantile einer Normalverteilung auf, so liegen die Werte nicht genau auf einer Geraden, aber in der Nähe einer Geraden.

Es sollten keine *systematischen* Abweichungen von einer imaginären Geraden erkennbar sein.



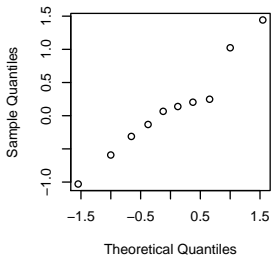
Seien  $R_1, R_2, \dots, R_n$  unabhängig gemäß einer Normalverteilung erzeugt.

Trägt man statt der theoretischen Quantile die empirischen Quantile von  $R_1, \dots, R_n$  gegen die Quantile einer Normalverteilung auf, so liegen die Werte nicht genau auf einer Geraden, aber in der Nähe einer Geraden.

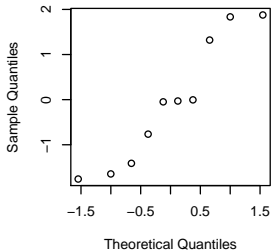
Es sollten keine *systematischen* Abweichungen von einer imaginären Geraden erkennbar sein.

Die nächsten Seiten zeigen qqnorm-Plots von simulierten, unabhängig standardnormalverteilten Daten mit  $n=10$ ,  $n=30$  und  $n=100$ .

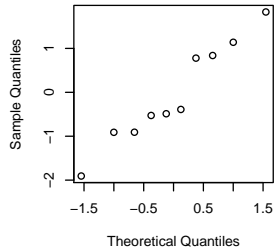
Normal Q-Q Plot



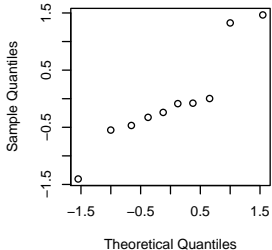
Normal Q-Q Plot



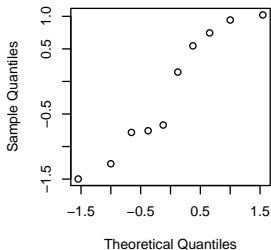
Normal Q-Q Plot



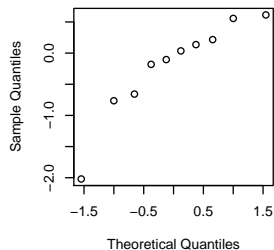
Normal Q-Q Plot



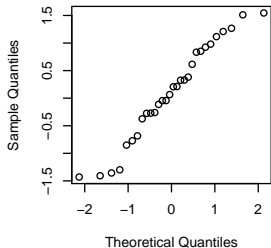
Normal Q-Q Plot



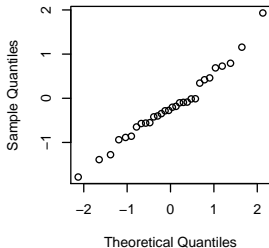
Normal Q-Q Plot



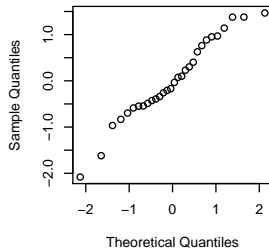
Normal Q-Q Plot



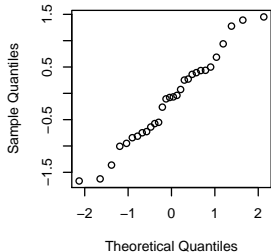
Normal Q-Q Plot



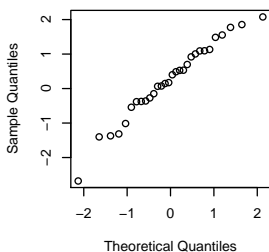
Normal Q-Q Plot



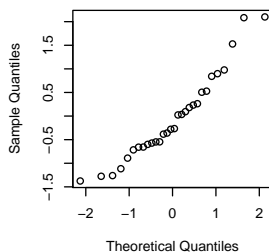
Normal Q-Q Plot



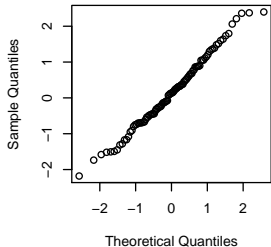
Normal Q-Q Plot



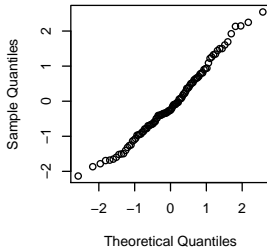
Normal Q-Q Plot



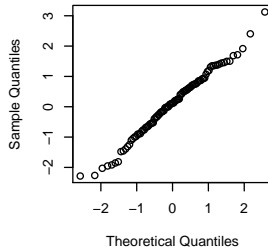
Normal Q-Q Plot



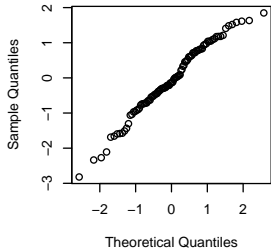
Normal Q-Q Plot



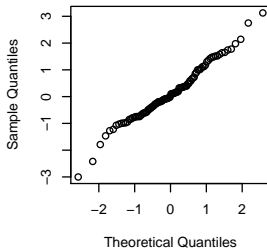
Normal Q-Q Plot



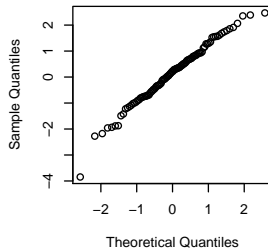
Normal Q-Q Plot



Normal Q-Q Plot



Normal Q-Q Plot



Nun zurück zur Frage ob das Modell

$$[\text{brain.weight.g}]_i = a + b \cdot [\text{weight.kg}]_i + \varepsilon_i$$

passt.

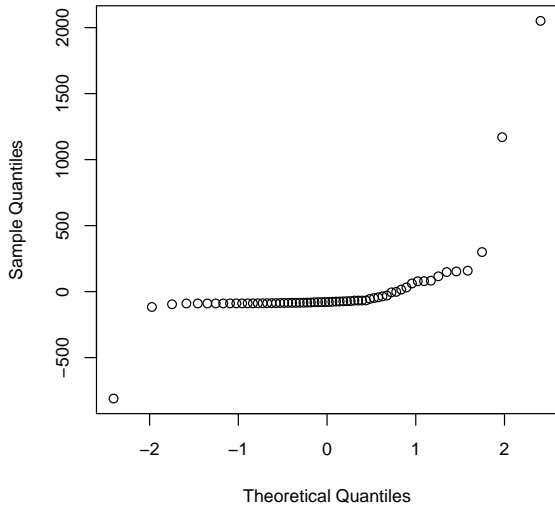
Nun zurück zur Frage ob das Modell

$$[\text{brain.weight.g}]_i = a + b \cdot [\text{weight.kg}]_i + \varepsilon_i$$

passt.

Sind die Residuen einigermaßen normalverteilt?

```
qqnorm(modell$residuals)
```

**Normal Q-Q Plot**

Die Residuen sind offensichtlich nicht normalverteilt. Zumindest gibt es extreme Ausreißer.



Die Residuen sind offensichtlich nicht normalverteilt. Zumindest gibt es extreme Ausreißer.

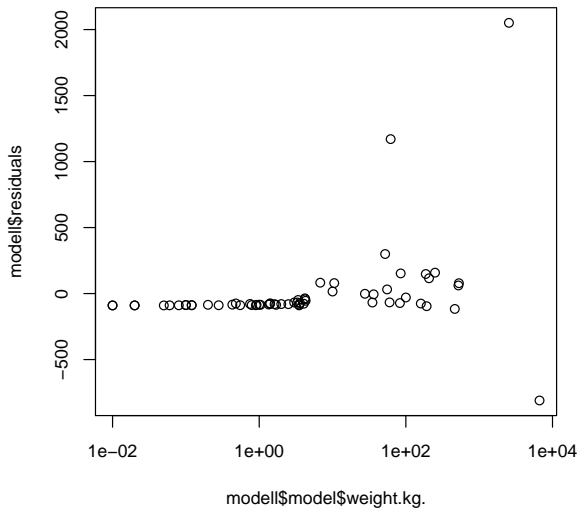
Ein weiteres Kriterium ist, dass die Residuen und ihre Varianz von anderen Anderen Größen, einschließlich der vorhergesagten Werte  $\hat{a} + \hat{b} \cdot X_i$  unabhängig sind.

Die Residuen sind offensichtlich nicht normalverteilt. Zumindest gibt es extreme Ausreißer.

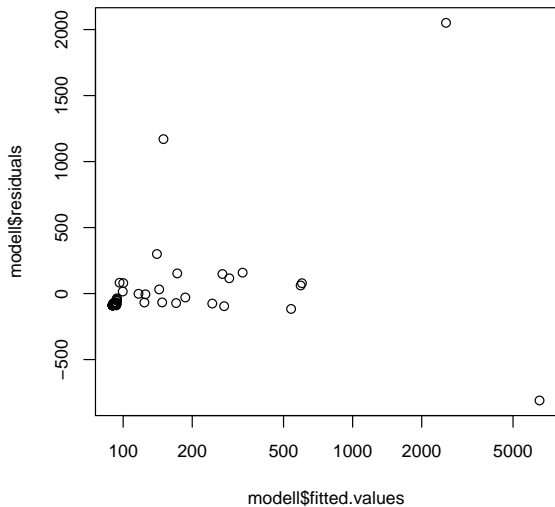
Ein weiteres Kriterium ist, dass die Residuen und ihre Varianz von anderen Anderen Größen, einschließlich der vorhergesagten Werte  $\hat{a} + \hat{b} \cdot X_i$  unabhängig sind.

Auch das überprüfen wir graphisch.

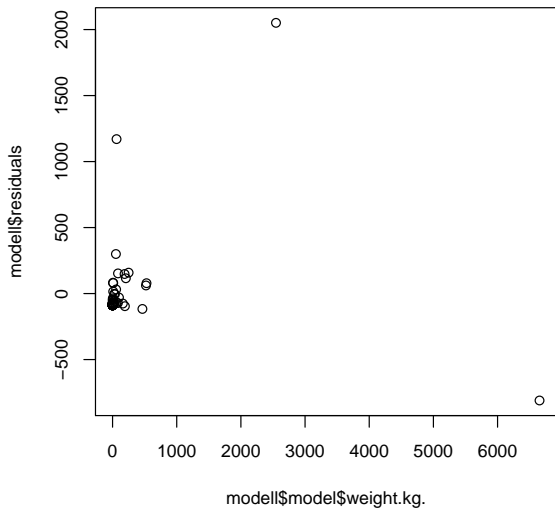
```
plot(modell$fitted.values,modell$residuals)
```



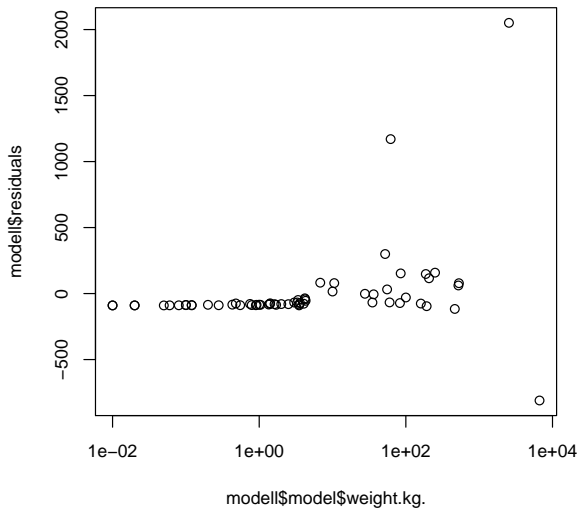
```
plot(modell$fitted.values,modell$residuals,log='x')
```



```
plot(modell$model$weight.kg.,modell$residuals)
```



```
plot(modell$model$weight.kg.,modell$residuals,log='x' )
```



Wir sehen, dass die Varianz der Residuen von den angepassten Werten bzw. dem Körpergewicht abhängt. Man sagt, es liegt *Heteroskedastizität* vor.

Wir sehen, dass die Varianz der Residuen von den angepassten Werten bzw. dem Körpergewicht abhängt. Man sagt, es liegt *Heteroskedastizität* vor.

Das Modell geht aber von *Homoskedastizität* aus, d.h. die Residuenvarianz soll von den erklärenden Merkmalen (dem Körpergewicht) und den angepassten Werten (annähernd) unabhängig sein.



Wir sehen, dass die Varianz der Residuen von den angepassten Werten bzw. dem Körpergewicht abhängt. Man sagt, es liegt *Heteroskedastizität* vor.

Das Modell geht aber von *Homoskedastizität* aus, d.h. die Residuenvarianz soll von den erklärenden Merkmalen (dem Körpergewicht) und den angepassten Werten (annähernd) unabhängig sein.

### **Varianzstabilisierende Transformation:**

Wie können wir die Körper- und Hirnmasse umskalieren, um Homoskedastizität zu erreichen?

Eigentlich ist es ja offensichtlich: Bei Elefanten kann das typischerweise 5 kg schwere Hirn je nach Individuum auch mal 500 g schwerer oder leichter sein. Wenn bei einer Tierart das Hirn typischerweise 5 g schwer ist, wird es nicht um 500 g variieren können, sondern vielleicht ebenfalls um 10%, also  $\pm 0.5$  g. Die Varianz ist hier also nicht additiv, sondern multiplikativ:

$$\text{Hirnmasse} = (\text{erwartete Hirnmasse}) \cdot \text{Zufall}$$

Das können wir aber in etwas mit additivem Zufallsterm umwandeln, indem wir auf beiden Seiten den (natürlichen) Logarithmus ziehen:

$$\log(\text{Hirnmasse}) = \log(\text{erwartete Hirnmasse}) + \log(\text{Zufall})$$

```
> logmodell <- lm(log(brain.weight.g)~log(weight.kg.),subset=
> summary(logmodell)
```

Call:

```
lm(formula = log(brain.weight.g) ~ log(weight.kg.), subset = c
    "no")
```

Residuals:

Min	1Q	Median	3Q	Max
-1.68908	-0.51262	-0.05016	0.46023	1.97997

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t )
(Intercept)	2.11067	0.09794	21.55	<2e-16 ***
log(weight.kg.)	0.74985	0.02888	25.97	<2e-16 ***

---

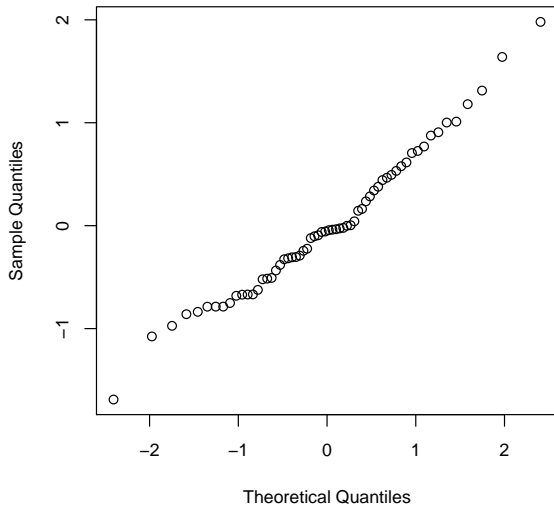
Signif. codes: 0 \*\*\* 0.001 \*\* 0.01 \* 0.05 . 0.1 1

Residual standard error: 0.7052 on 60 degrees of freedom

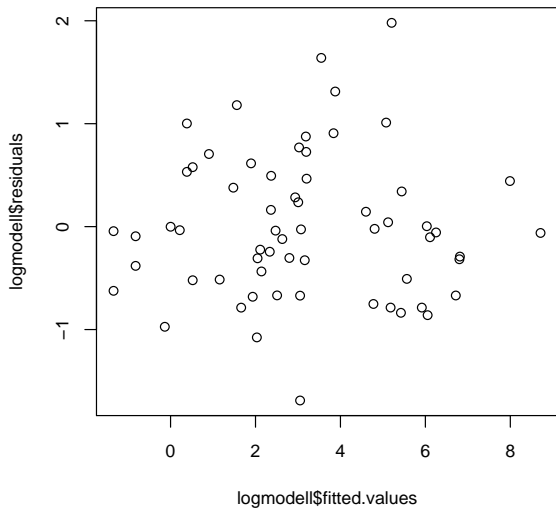
Multiple R-squared: 0.9183, Adjusted R-squared: 0.9169

F-statistic: 674.3 on 1 and 60 DF. p-value: < 2.2e-16

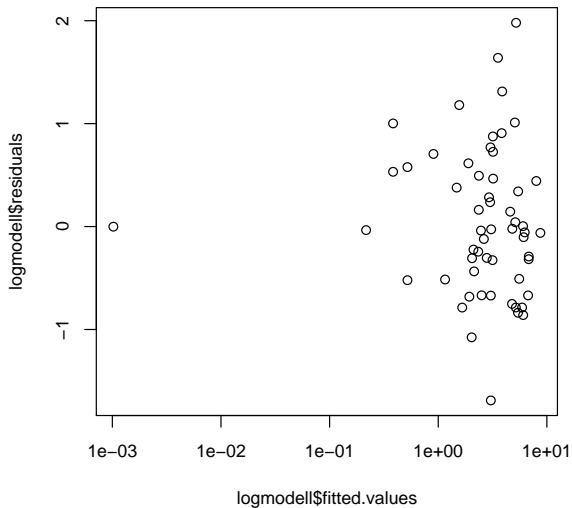
```
qqnorm(modell$residuals)
```

**Normal Q-Q Plot**

```
plot(logmodell$fitted.values, logmodell$residuals)
```

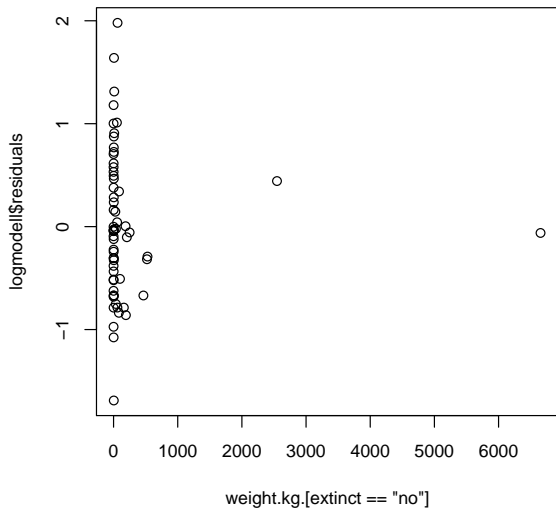


```
plot(logmodell$fitted.values, logmodell$residuals, log='x')
```

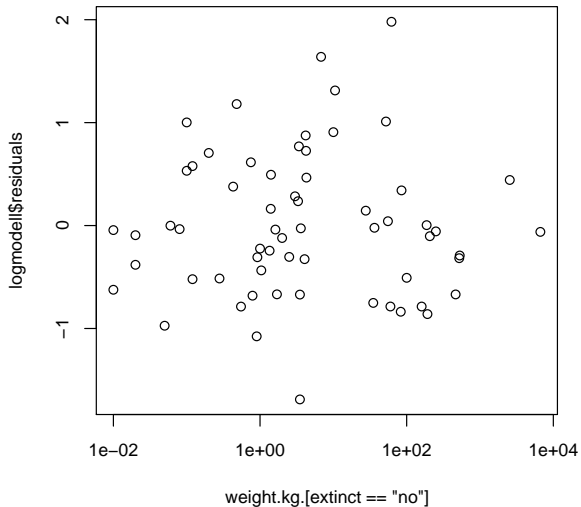


)

```
plot(weight.kg.[extinct=='no'], logmodell$residuals)
```



```
plot(weight.kg.[extinct='no'], logmodell$residuals, log='x')
```



)



# Übersicht

- 1 Lineare Regression: wozu und wie?
- 2 t-Test fuer lineare Zusammenhänge
- 3 Skalierung der Daten**
  - Beispiel: Körper- und Gehirngewicht
  - **Beispiel: Mortalität und Einwohnerzahl**

Daten: Für 301 US-amerikanische Landkreise (Counties) die Anzahl weißer Einwohnerinnen von 1960 und die Anzahl der Brustkrebstoten aus dieser Gruppe zwischen 1950 und 1960. (Aus Rice (2007) Mathematical Statistics and Data Analysis.)

```
> canc
```

```
      deaths inhabitants
1         1         445
2         0         559
3         3         677
4         4         681
5         3         746
6         4         869
.         .           .
.         .           .
.         .           .

300      248       74005
301      360       88456
```

Fragestellung: Ist die durchschnittliche Anzahl an Todesopfer proportional zur Einwohnerzahl, d.h.

$$\mathbb{E}deaths = b \cdot inhabitants$$

oder hängt das Krebsrisiko von der Größe des Bezirks ab (evtl. wegen Urbanität), so dass ein anderes Modell besser passt?  
z.B.

$$\mathbb{E}deaths = a + b \cdot inhabitants$$

mit  $a \neq 0$ .

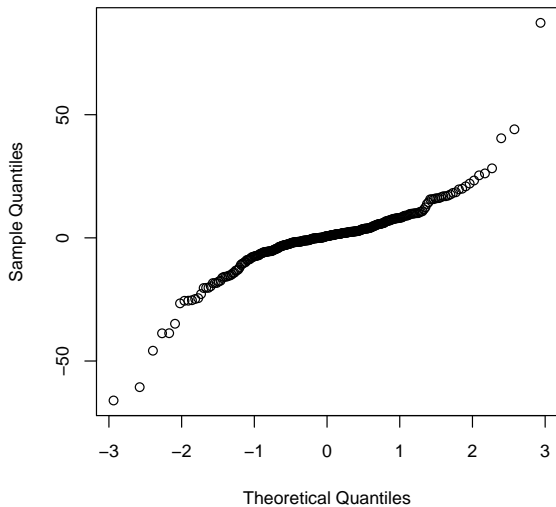
```
> modell <- lm(deaths~inhabitants,data=canc)
> summary(modell)
Call:
lm(formula = deaths ~ inhabitants, data = canc)
Residuals:
      Min       1Q   Median       3Q      Max
-66.0215  -4.1279   0.6769   5.2357  87.2989
Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -5.261e-01  9.692e-01  -0.543   0.588
inhabitants  3.578e-03  5.446e-05  65.686  <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 *** 0.001 ** 0.01 * 0.05 . 0.1 1
Residual standard error: 13 on 299 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9352, Adjusted R-squared:  0.935
F-statistic:  4315 on 1 and 299 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

Die additive Konstante (“Achsenabschnitt”) wird auf  $-0.526$  geschätzt, ist aber nicht signifikant von 0 verschieden.

Die additive Konstante (“Achsenabschnitt”) wird auf  $-0.526$  geschätzt, ist aber nicht signifikant von 0 verschieden. Man kann also nicht die Nullhypothese verwerfen, dass das Krebsrisiko von der Größe des Bezirks unabhängig ist.

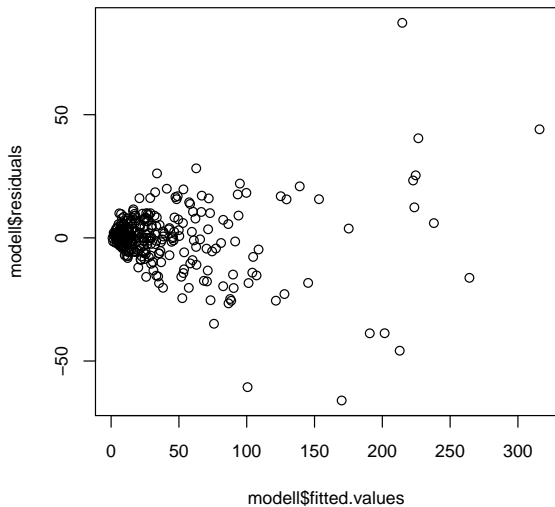
Die additive Konstante (“Achsenabschnitt”) wird auf  $-0.526$  geschätzt, ist aber nicht signifikant von 0 verschieden. Man kann also nicht die Nullhypothese verwerfen, dass das Krebsrisiko von der Größe des Bezirks unabhängig ist. Aber passt das Modell eigentlich?

```
qqnorm(modell$residuals)
```

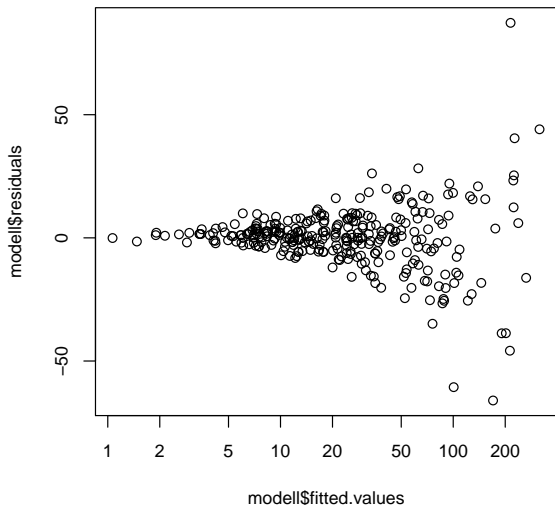
**Normal Q-Q Plot**



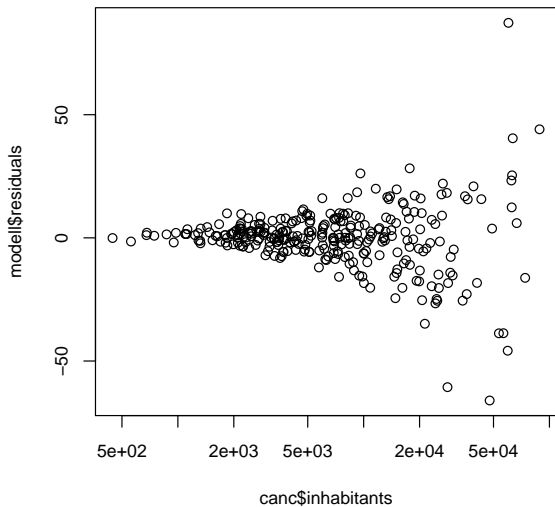
```
plot(modell$fitted.values,modell$residuals)
```



```
plot(modell$fitted.values,modell$residuals,log='x')
```



```
plot(canc$inhabitants,modell$residuals,log='x')
```



Wir sehen, dass die Varianz der Residuen von den angepassten Werten bzw. der Einwohnerzahl abhängt. Man sagt, es liegt *Heteroskedastizität* vor.

Wir sehen, dass die Varianz der Residuen von den angepassten Werten bzw. der Einwohnerzahl abhängt. Man sagt, es liegt *Heteroskedastizität* vor.

Das Modell geht aber von *Homoskedastizität* aus, d.h. die Residuenvarianz soll von den erklärenden Merkmalen (der Einwohnerzahl) und den angepassten Werten (annähernd) unabhängig sein.

Wir sehen, dass die Varianz der Residuen von den angepassten Werten bzw. der Einwohnerzahl abhängt. Man sagt, es liegt *Heteroskedastizität* vor.

Das Modell geht aber von *Homoskedastizität* aus, d.h. die Residuenvarianz soll von den erklärenden Merkmalen (der Einwohnerzahl) und den angepassten Werten (annähernd) unabhängig sein.

### **Varianzstabilisierende Transformation:**

Wie können wir die Einwohnerzahl und die Anzahl der Todesfälle umskalieren, um Homoskedastizität zu erreichen?

Woher kommt die Abhängigkeit der Varianz von der Einwohnerzahl?

Woher kommt die Abhängigkeit der Varianz von der Einwohnerzahl?

Ist  $n$  die Anzahl der (weißen) Einwohnerinnen und  $p$  die Wahrscheinlichkeit, innerhalb von 10 Jahren an Brustkrebs zu sterben, so ist  $np$  die erwartete Anzahl solcher Todesfälle, und die Varianz ist

$$n \cdot p \cdot (1 - p) \approx n \cdot p$$

(Approximation der Binomial- durch die Poissonverteilung bietet sich an). Die Standardabweichung ist also  $\sqrt{n \cdot p}$ .



Woher kommt die Abhängigkeit der Varianz von der Einwohnerzahl?

Ist  $n$  die Anzahl der (weißen) Einwohnerinnen und  $p$  die Wahrscheinlichkeit, innerhalb von 10 Jahren an Brustkrebs zu sterben, so ist  $np$  die erwartete Anzahl solcher Todesfälle, und die Varianz ist

$$n \cdot p \cdot (1 - p) \approx n \cdot p$$

(Approximation der Binomial- durch die Poissonverteilung bietet sich an). Die Standardabweichung ist also  $\sqrt{n \cdot p}$ .

In einem solchen Fall kann man die Varianz annähernd stabilisieren, indem man sowohl das erklärende Merkmal als auch die Zielgröße durch Wurzelziehen stabilisiert.

Für alle, die es etwas genauer wissen wollen:

$$\sqrt{y} = b \cdot \sqrt{x} + \varepsilon$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow y &= (b \cdot \sqrt{x} + \varepsilon)^2 \\ &= b^2 \cdot x + 2 \cdot b \cdot \sqrt{x} \cdot \varepsilon + \varepsilon^2\end{aligned}$$

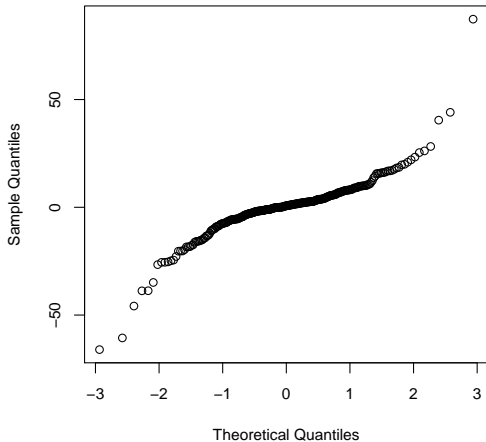
Die Standardabweichung ist hier nicht genau proportional zu  $\sqrt{x}$ , aber zumindest hat der Teil  $2 \cdot b \cdot \sqrt{x} \cdot \varepsilon$  eine zu  $\sqrt{x}$  proportionale Standardabweichung, nämlich  $2 \cdot b \cdot \sqrt{x} \cdot \sigma$ . Der Term  $\varepsilon^2$  ist hingegen das  $\sigma^2$ -fache einer  $\chi_1^2$ -verteilten Zufallsvariablen und hat Standardabweichung  $\sigma^2 \cdot \sqrt{2}$ . Zumindest wenn  $\sigma$  sehr klein ist im Vergleich zu  $b \cdot \sqrt{x}$ , gilt also die Approximation

$$y \approx b^2 \cdot x + 2 \cdot b \cdot \sqrt{x} \cdot \varepsilon$$

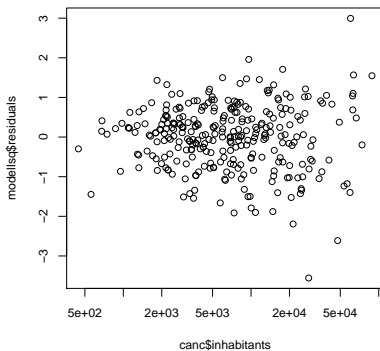
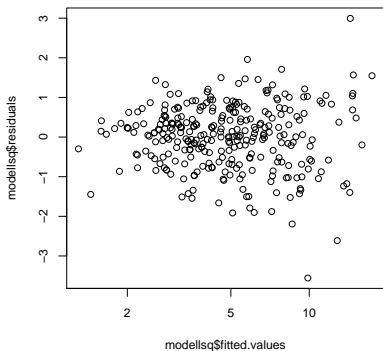
und die Standardabweichung von  $y$  ist ungefähr proportional zu  $\sqrt{x}$ .

```
> modellsq <- lm(sqrt(deaths)~sqrt(inhabitants),data=canc)
> summary(modellsq)
Call:
lm(formula = sqrt(deaths) ~ sqrt(inhabitants), data = canc)
Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-3.55639 -0.51900  0.06204  0.54277  2.99434
Coefficients:
                Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)    0.0664320  0.0974338   0.682   0.496
sqrt(inhabitants) 0.0583722  0.0009171 63.651 <2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 0.8217 on 299 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9313, Adjusted R-squared:  0.931
F-statistic:  4051 on 1 and 299 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

```
qqnorm(modell$residuals)
```

**Normal Q-Q Plot**

```
plot(modellsq$fitted.values,modellsq$residuals,log='x')  
plot(canc$inhabitants,modellsq$residuals,log='x')
```



Der QQ-Plot mit der Normalverteilung sieht nicht perfekt aus, aber immerhin ist die Varianz stabilisiert.

Der QQ-Plot mit der Normalverteilung sieht nicht perfekt aus, aber immerhin ist die Varianz stabilisiert.

Das Ergebnis bleibt aber dasselbe: Der “Intercept” ist nicht signifikant von 0 verschieden. Also kann der erwartete Wert von  $\sqrt{y}$  proportional zu  $\sqrt{x}$  sein, was bedeutet, dass auch der erwartete Wert von  $y$  ungefähr (!) proportional zu  $x$  ist. Also gibt es nach wie vor keinen deutlichen Hinweis auf eine Abhängigkeit zwischen der Einwohnerzahl und der Todesrate.

# Schlusswort

Manchmal ist die Suche nach einer geeigneten varianzstabilisierenden Transformation mit viel Herumprobieren verbunden. In vielen Fällen passt die log-Transformation einigermaßen gut.