Ansatz der Bayes-Statistik

Dies ist anders in der *Bayes-Statistik*: Man wählt eine Wahrscheinlichkeitsverteilung α auf Θ, die *a priori*-Verteilung (auch *Vorbewertung*) und stellt sich vor, dass die Daten einem zweistufigen Experiment entstammen:

- Zunächst wird der Parameter ϑ gemäß der a priori-Verteilung α erzeugt (insbesondere ist ϑ jetzt selbst eine Zufallsvariable),
- dann werden die Beobachtungen X zufällig erzeugt mit einer Verteilung, die vom gewählten ϑ abhängt.

Insbesondere besitzt in dieser Formulierung das Paar (X, ϑ) eine *gemeinsame Verteilung*.

Es gelte: Die a priori-Verteilung auf Θ hat Dichte bzw. Gewichte $\alpha(\vartheta)$

(je nachdem, ob ϑ kontinuierlich oder diskret verteilt ist; wir betrachten im Folgenden nur den Fall, dass $\Theta \subset \mathbb{R}$ ein Intervall ist und ϑ eine Dichte besitzt)

Interpretation: Ohne Kenntnis der Beobachtungen nehmen wir an, dass ϑ die a priori-Verteilung besitzt (z.B. aus „Erfahrung“ oder aus „Expertenwissen“).

Es gelte: Die a priori-Verteilung auf Θ hat Dichte bzw. Gewichte $\alpha(\vartheta)$

(je nachdem, ob ϑ kontinuierlich oder diskret verteilt ist; wir betrachten im Folgenden nur den Fall, dass $\Theta \subset \mathbb{R}$ ein Intervall ist und ϑ eine Dichte besitzt)

Interpretation: Ohne Kenntnis der Beobachtungen nehmen wir an, dass ϑ die a priori-Verteilung besitzt (z.B. aus „Erfahrung“ oder aus „Expertenwissen“).

Wir interpretieren die Likelihood-Funktion $\rho : S \times \Theta \to [0, \infty)$ als

$$\rho(x, p) = P(X = x \mid \vartheta = p)$$

(bzw. $P(X \in dx \mid \vartheta = p) = \rho(x, p)\, dx$ falls X eine Dichte besitzt)

Mit Formel von der totalen Wahrscheinlichkeit (Satz 1.41, 1.) ist

$$P(X = x) = \int_\Theta \rho(x,t)\,\alpha(t)\,dt$$

(bzw. $P(X \in dx) = \int_\Theta \rho(x,t)\,\alpha(t)\,dt\,dx$, d.h.
$P(X \leq x) = \int_\Theta \int_{-\infty}^{x} \rho(y,t)\,dy\,\alpha(t)\,dt$, wenn X eine Dichte besitzt),

Mit Formel von der totalen Wahrscheinlichkeit (Satz 1.41, 1.) ist

$$P(X = x) = \int_\Theta \rho(x,t)\,\alpha(t)\,dt$$

(bzw. $P(X \in dx) = \int_\Theta \rho(x,t)\,\alpha(t)\,dt\,dx$, d.h. $P(X \le x) = \int_\Theta \int_{-\infty}^{x} \rho(y,t)\,dy\,\alpha(t)\,dt$, wenn X eine Dichte besitzt),

mit der Formel von Bayes (Satz 1.41, 2.) ist

$$P(\vartheta \in dp \mid X = x) = \frac{\rho(x,p)\alpha(p)\,dp}{\int_\Theta \alpha(\vartheta')\rho(x,\vartheta')\,d\vartheta'}$$

Die *a posteriori-Dichte* (bzw. a posteriori-Gewicht, wenn ϑ diskret) bei Beobachtung x,

$$\pi_x(\vartheta) = \frac{\alpha(\vartheta)\rho(x,\vartheta)}{\int_\Theta \alpha(\vartheta')\rho(x,\vartheta')\,d\vartheta'},$$

ist die Dichte von ϑ, bedingt auf Beobachtung $X = x$, d.h.

$$P(\vartheta \le u \mid X = x) = \int_{\Theta\cap(-\infty,u]} \pi_x(p)\,dp$$

Die *a posteriori-Dichte* (bzw. a posteriori-Gewicht, wenn ϑ diskret) bei Beobachtung x,

$$\pi_x(\vartheta) = \frac{\alpha(\vartheta)\rho(x,\vartheta)}{\int_\Theta \alpha(\vartheta')\rho(x,\vartheta')\,d\vartheta'},$$

ist die Dichte von ϑ, bedingt auf Beobachtung $X = x$, d.h.

$$P(\vartheta \le u \mid X = x) = \int_{\Theta\cap(-\infty,u]} \pi_x(p)\,dp$$

Definition 2.11

Der *Bayes-Schätzer* (zur a priori-Verteilung α) ist

$$\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}} = \widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(x) := \mathbb{E}_{\pi_x}[\vartheta] = \int_\Theta \vartheta\,\pi_x(\vartheta)\,d\vartheta$$

(d.h. der Erwartungswert von ϑ bedingt auf $X = x$).

(Wir betrachten hier nur den Fall, dass Θ ein Intervall ist.)

Definition 2.12

Für einen Schätzer $Y = Y(X)$ (für ϑ) ist

$$F_\alpha(Y) := \int_\Theta \mathbb{E}\big[(Y - \vartheta)^2 \,\big|\, \vartheta = p\big]\alpha(p)\,dp$$

der erwartete quadratische Fehler (zur Vorbewertung α).

Definition 2.12

Für einen Schätzer $Y = Y(X)$ (für ϑ) ist

$$F_\alpha(Y) := \int_\Theta \mathbb{E}\big[(Y-\vartheta)^2 \,\big|\, \vartheta = p\big]\alpha(p)\,dp$$

der erwartete quadratische Fehler (zur Vorbewertung α).

Der Bayes-Schätzer minimiert den erwarteten quadratischen Fehler (zur Vorbewertung α) :

Satz 2.13

Stets gilt $F_\alpha(Y) \geq F_\alpha(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X))$.

$F_\alpha(Y) \geq F_\alpha(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X))$.

Beweis.

$$
\begin{aligned}
&F_\alpha(Y(X)) - F_\alpha(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)) \\
&= \int_\Theta \mathbb{E}\Big[(Y(X)-\vartheta)^2 - (\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)-\vartheta)^2 \,\Big|\, \vartheta = p\Big]\alpha(p)\,dp \\
&= \int_\Theta \mathbb{E}\Big[Y(X)^2 - 2Y(X)\vartheta - \widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)^2 + 2\vartheta\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X) \,\Big|\, \vartheta = p\Big]\alpha(p)\,dp \\
&= \mathbb{E}\Big[Y(X)^2 - 2Y(X)\vartheta - \widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)^2 + 2\vartheta\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\Big] \\
&= \mathbb{E}\Big[Y(X)^2 - \widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)^2\Big] - 2\mathbb{E}\Big[Y(X)\vartheta\Big] + 2\mathbb{E}\Big[\vartheta\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\Big]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&F_\alpha(Y(X)) - F_\alpha(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)) \\
&= \mathbb{E}\big[Y(X)^2 - \widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)^2\big] - 2\mathbb{E}\big[Y(X)\vartheta\big] + 2\mathbb{E}\big[\vartheta\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\big]
\end{aligned}
$$

Weiter ist

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}\big[\vartheta\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\big] \\
&= \sum_{x\in S} \mathbb{E}\big[\vartheta\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X) I_{\{X=x\}}\big] = \sum_{x\in S} P(X=x)\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(x)\mathbb{E}[\vartheta \mid X=x] \\
&= \sum_{x\in S} P(X=x)\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(x)\mathbb{E}_{\pi_x}[\vartheta] = \sum_{x\in S} P(X=x)\big(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(x)\big)^2 \\
&= \mathbb{E}\big[\big(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\big)^2\big]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&F_\alpha(Y(X)) - F_\alpha(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)) \\
&= \mathbb{E}\big[Y(X)^2 - \widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)^2\big] - 2\mathbb{E}\big[Y(X)\vartheta\big] + 2\mathbb{E}\big[\vartheta\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\big]
\end{aligned}
$$

Weiter ist

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{E}\big[\vartheta\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\big] \\
&= \sum_{x\in S} \mathbb{E}\big[\vartheta\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X) I_{\{X=x\}}\big] = \sum_{x\in S} P(X=x)\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(x)\mathbb{E}[\vartheta \mid X=x] \\
&= \sum_{x\in S} P(X=x)\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(x)\mathbb{E}_{\pi_x}[\vartheta] = \sum_{x\in S} P(X=x)\big(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(x)\big)^2 \\
&= \mathbb{E}\big[\big(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\big)^2\big]
\end{aligned}
$$

und analog

$$
\mathbb{E}\big[\vartheta Y(X)\big] = \mathbb{E}\big[Y(X)\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\big].
$$

Insgesamt:

$$
\begin{aligned}
& F_\alpha(Y(X)) - F_\alpha(\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)) \\
&= \mathbb{E}\big[\, Y(X)^2 - \widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)^2 - 2Y(X)\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X) + 2\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)^2 \big] \\
&= \mathbb{E}\Big[\big(Y(X) - \widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(X)\big)^2\Big] \geq 0.
\end{aligned}
$$

□

Inhalt

Beispiel 2.14 (Münzwurf mit zufälliger Erfolgswahrscheinlichkeit)

ϑ wird gemäß einer Verteilung α auf $\Theta := [0,1]$ „ausgewürfelt“, dann:

$n \in \mathbb{N}$, gegeben $\vartheta = u \in [0,1]$ seinen $X_1, X_2, \ldots, X_n$ unabhängig und jeweils $\sim \mathrm{Ber}_u$
(d.h. $P(X_i = 1 \mid \vartheta = u) = u = 1 - P(X_i = 0 \mid \vartheta = u)$).

Somit: Für $x = (x_1, \ldots, x_n) \in \{0,1\}^n$ ist

$$\rho(x, \vartheta) = \vartheta^{\#\{i \le n : x_i = 1\}} (1 - \vartheta)^{\#\{i \le n : x_i = 0\}}.$$

Beispiel 2.14 (Münzwurf mit zufälliger Erfolgswahrscheinlichkeit)

Eine Situation, in der dieses Modell sinnvoll ist, könnte folgende sein: Nehmen wir an, ein Versicherungsnehmer hat jedes Jahr mit einer gewissen (zu ihm „gehörigen“) Wahrscheinlichkeit ϑ einen Schadensfall (unabhängig über die Jahre), und $\alpha(\vartheta)\, d\vartheta$ beschreibt die Verteilung der Schadenswahrscheinlichkeiten aller Kunden dieser Versicherung (diese Verteilung sei der Versicherung aus Erfahrungswerten bekannt).

Beispiel 2.14 (Münzwurf mit zufälliger Erfolgswahrscheinlichkeit)

Eine Situation, in der dieses Modell sinnvoll ist, könnte folgende sein: Nehmen wir an, ein Versicherungsnehmer hat jedes Jahr mit einer gewissen (zu ihm „gehörigen“) Wahrscheinlichkeit ϑ einen Schadensfall (unabhängig über die Jahre), und $\alpha(\vartheta)\,d\vartheta$ beschreibt die Verteilung der Schadenswahrscheinlichkeiten aller Kunden dieser Versicherung (diese Verteilung sei der Versicherung aus Erfahrungswerten bekannt).

Mit $\rho(x,\vartheta) = \mathrm{Bin}_{n,\vartheta}(x)$ ist dann die Wahrscheinlichkeit, dass ein „typischer Kunde“ in n Jahren k Schadensfälle verursacht $\int_0^1 \alpha(\vartheta)\rho(k,\vartheta)\,d\vartheta$, und $\pi_k(\vartheta)$ ist die Verteilung der Schadenswahrscheinlichkeit pro Jahr eines Kunden, bedingt darauf, dass er in den letzten n Jahren k Schäden hatte. Diese Information kann die Versicherung beispielsweise für Vertragsverlängerung, Tarifanpassung, etc. benutzen.

Wir betrachten hier (nur) den Fall $\alpha = \mathrm{unif}_{[0,1]}$.

Gehe über zu $Y = X_1 + \cdots + X_n$, dann ist gegeben $\vartheta = u$, $Y \sim \mathrm{Bin}_{n,u}$ und für $k \in \{0, 1, \ldots, n\}$

$$P(Y = k) = \int_0^1 \binom{n}{k} u^k (1-u)^{n-k}\, du$$
$$= \frac{n!}{k!(n-k)!} \frac{k!(n-k)!}{(n+1)!} = \frac{1}{n+1}$$

(d.h. Y ist uniform auf $\{0, 1, \ldots, n\}$).

$$= \int_0^1 u^k (1-u)^{n-k}\, du$$

(Für obiges Integral brauchen wir eine kleine Nebenrechnung, siehe folgende Folie.)

Definition und Lemma 2.15 (Beta-Verteilungen)

Für $a, b \in (0, \infty)$ ist die Beta-Funktion gegeben durch

$$B(a,b) = \int_0^1 u^{a-1}(1-u)^{b-1}\,du = \frac{\Gamma(a)\Gamma(b)}{\Gamma(a+b)},$$

wobei $\Gamma(a) = \int_0^\infty y^{a-1}e^{-y}\,dy$ die Gamma-Funktion ist

(beachte: $\Gamma(a+1) = a\Gamma(a)$, speziell für $a \in \mathbb{N}$ ist $\Gamma(a) = (a-1)!$, wie man mit partieller Integration nachrechnen kann).

Für $a, b \in \mathbb{N}$ kann man explizit rechnen:

Es ist dann $B(a,b) = \frac{(a-1)!(b-1)!}{(a+b-1)!}$, denn

$$B(a,1) = \int_0^1 u^{a-1}\,du = \left[\frac{1}{a}u^a\right]_{u=0}^{u=1} = \frac{1}{a}$$

Für $a, b \in \mathbb{N}$ kann man explizit rechnen:

Es ist dann $B(a,b) = \frac{(a-1)!(b-1)!}{(a+b-1)!}$, denn

$B(a,1) = \int_0^1 u^{a-1}\,du = \left[\frac{1}{a}u^a\right]_{u=0}^{u=1} = \frac{1}{a}$ und für $b \in \{2,3,\dots\}$ ist (mit partieller Integration)

$$\int_0^1 u^{a-1}(1-u)^{b-1}\,du$$

$$= \left[\tfrac{1}{a}u^a(1-u)^{b-1}\right]_{u=0}^{u=1} - \int_0^1 \tfrac{1}{a}u^a \cdot (b-1)(1-u)^{b-2}(-1)\,du$$

$$= \frac{b-1}{a}\int_0^1 u^a(1-u)^{b-2}\,du$$

Für $a, b \in \mathbb{N}$ kann man explizit rechnen:

Es ist dann $B(a,b) = \frac{(a-1)!(b-1)!}{(a+b-1)!}$, denn

$B(a,1) = \int_0^1 u^{a-1}\,du = \left[\frac{1}{a}u^a\right]_{u=0}^{u=1} = \frac{1}{a}$ und für $b \in \{2,3,\dots\}$ ist (mit partieller Integration)

$$\int_0^1 u^{a-1}(1-u)^{b-1}\,du$$

$$= \left[\tfrac{1}{a}u^a(1-u)^{b-1}\right]_{u=0}^{u=1} - \int_0^1 \tfrac{1}{a}u^a \cdot (b-1)(1-u)^{b-2}(-1)\,du$$

$$= \frac{b-1}{a}\int_0^1 u^a(1-u)^{b-2}\,du$$

also

$$B(a,b) = \frac{b-1}{a}B(a+1,b-1) = \frac{(b-1)\cdot(b-2)\cdots 2\cdot 1\cdot B(a+b-1,1)}{a\cdot(a+1)\cdots(a+b-3)\cdots(a+b-2)}$$

$$= \frac{(b-1)\cdot(b-2)\cdots 2\cdot 1}{a\cdot(a+1)\cdots(a+b-2)\cdots(a+b-1)} = \frac{(a-1)!(b-1)!}{(a+b-1)!}$$

Definition und Lemma 2.15 (Beta-Verteilungen)

$r, s > 0$. Eine ZV V mit Werten in $[0,1]$ ist *Beta-verteilt* mit Parametern $r, s > 0$, in Formeln $V \sim \beta_{r,s}$, wenn V die Dichte

$$\frac{\Gamma(r+s)}{\Gamma(r)\Gamma(s)} v^{r-1}(1-v)^{s-1}\mathbf{1}_{(0,1)}(v)$$

besitzt. Es gilt dann

$$\mathbb{E}[V] = \frac{r}{r+s}$$

Definition und Lemma 2.15 (Beta-Verteilungen)

$r, s > 0$. Eine ZV V mit Werten in $[0,1]$ ist *Beta-verteilt* mit Parametern $r, s > 0$, in Formeln $V \sim \beta_{r,s}$, wenn V die Dichte

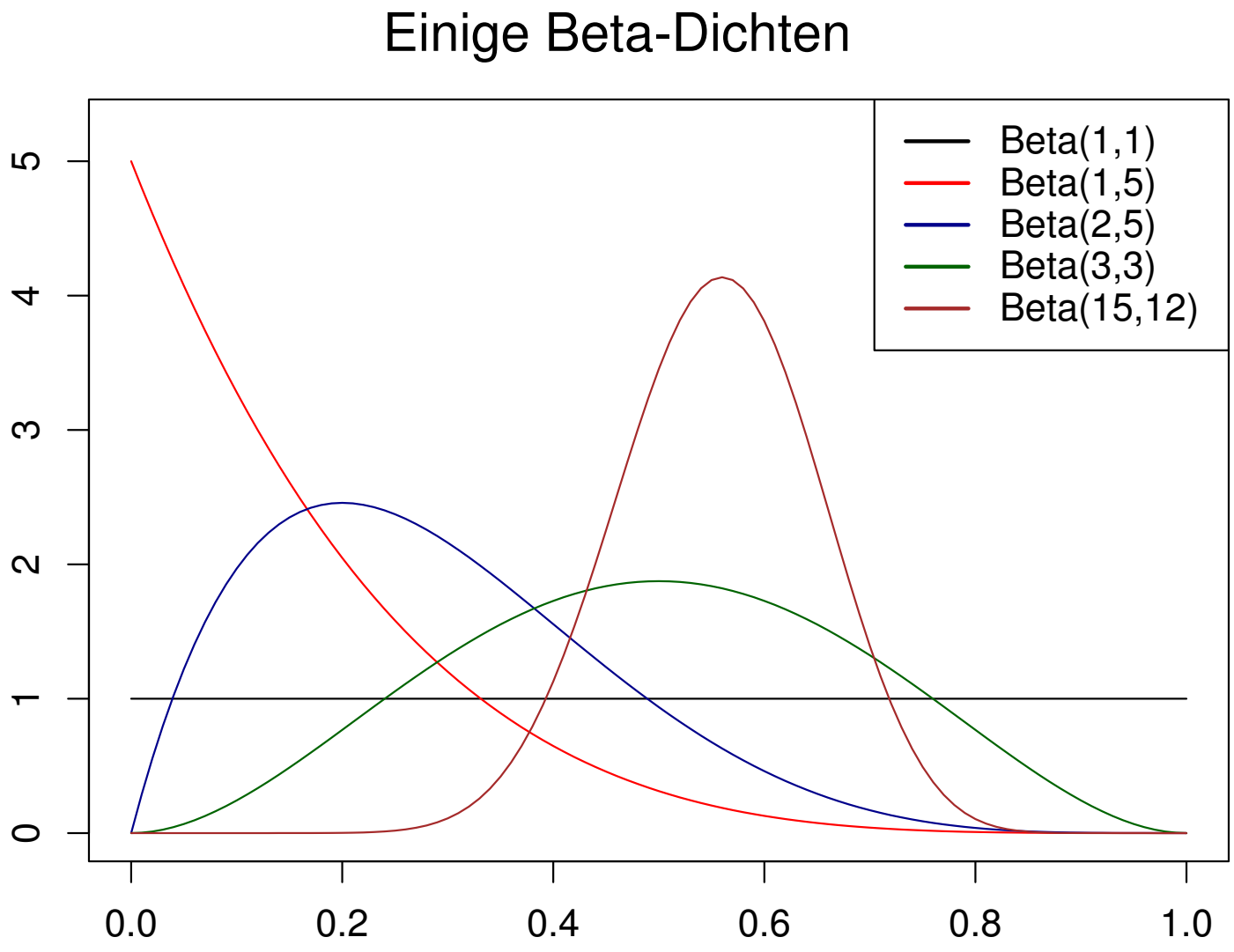
$$\frac{\Gamma(r+s)}{\Gamma(r)\Gamma(s)} v^{r-1}(1-v)^{s-1}\mathbf{1}_{(0,1)}(v)$$

besitzt. Es gilt dann

$$\mathbb{E}[V] = \frac{r}{r+s}$$

Denn

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[V] &= \frac{\Gamma(r+s)}{\Gamma(r)\Gamma(s)} \int_0^1 v \cdot v^{r-1}(1-v)^{s-1}\, dv \\ &= \frac{\Gamma(r+s)}{\Gamma(r)\Gamma(s)} \frac{\Gamma(r+1)\Gamma(s)}{\Gamma(r+s+1)} = \frac{\Gamma(r+s)}{\Gamma(r+s+1)} \frac{\Gamma(r+1)}{\Gamma(r)} = \frac{r}{r+s}\end{aligned}$$


Einige Beta-Dichten
Beta(1,1)
Beta(1,5)
Beta(2,5)
Beta(3,3)
Beta(15,12)
0
1
2
3
4
5
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0

Zurück zum **Beispiel** „Münzwürfe mit zufälliger Erfolgsw'keit“:

Die a posteriori-Verteilung ist $\mathcal{L}(\vartheta \mid Y = k) = \beta_{k+1,n-k+1}$:

$$\begin{aligned} P(\vartheta \in dp \mid Y = k) &= \frac{P(\vartheta \in dp, Y = k)}{P(Y = k)} \\ &= \frac{1}{1/(n+1)} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}\, dp \\ &= \frac{(n+1)!}{k!(n-k)!} p^k (1-p)^{n-k}\, dp \end{aligned}$$

Zurück zum **Beispiel** „Münzwürfe mit zufälliger Erfolgsw'keit":

Die a posteriori-Verteilung ist $\mathcal{L}(\vartheta \mid Y = k) = \beta_{k+1,n-k+1}$:

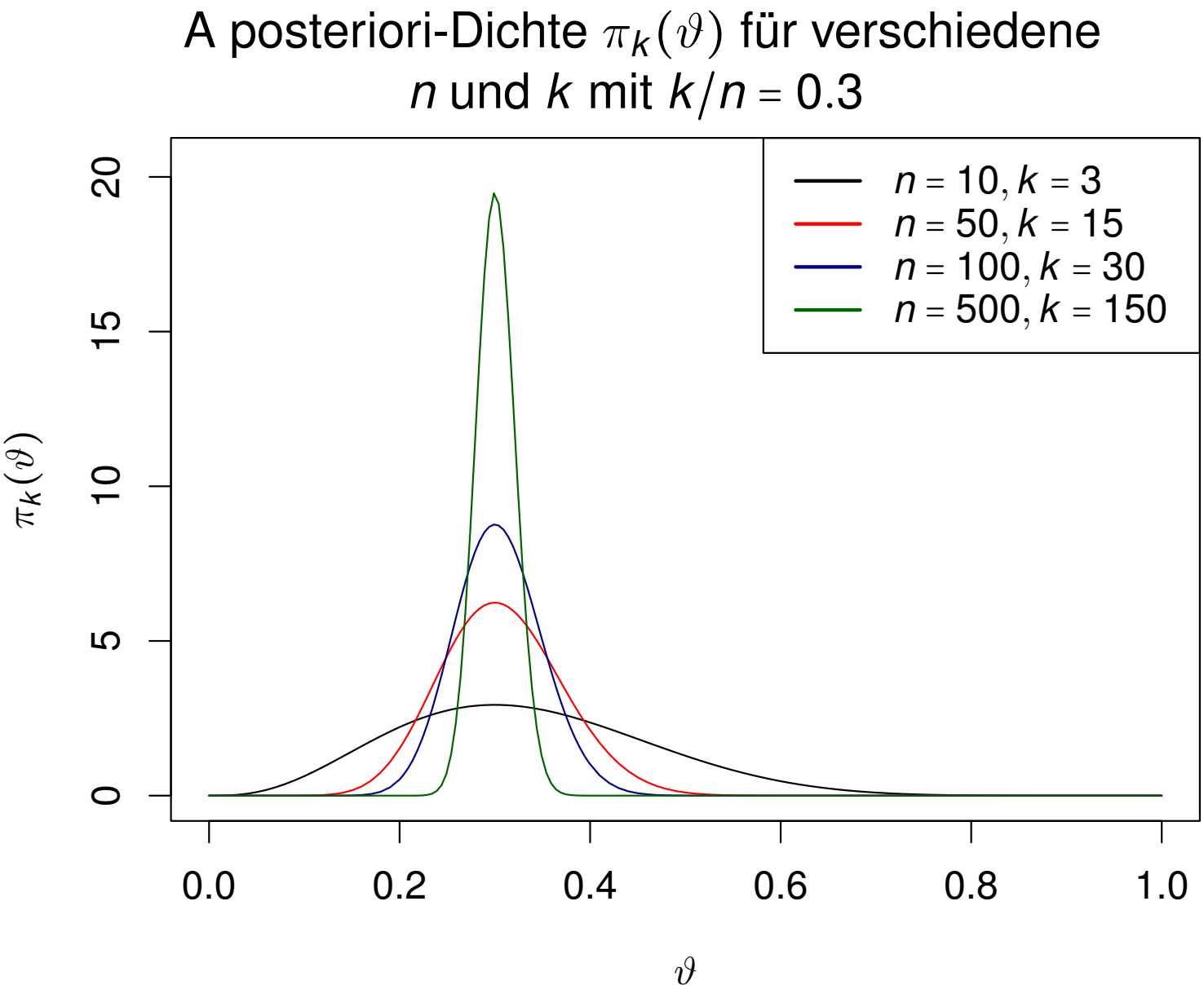
$$\begin{aligned} P(\vartheta \in dp \mid Y = k) &= \frac{P(\vartheta \in dp, Y = k)}{P(Y = k)} \\ &= \frac{1}{1/(n+1)} \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}\, dp \\ &= \frac{(n+1)!}{k!(n-k)!} p^k (1-p)^{n-k}\, dp \end{aligned}$$

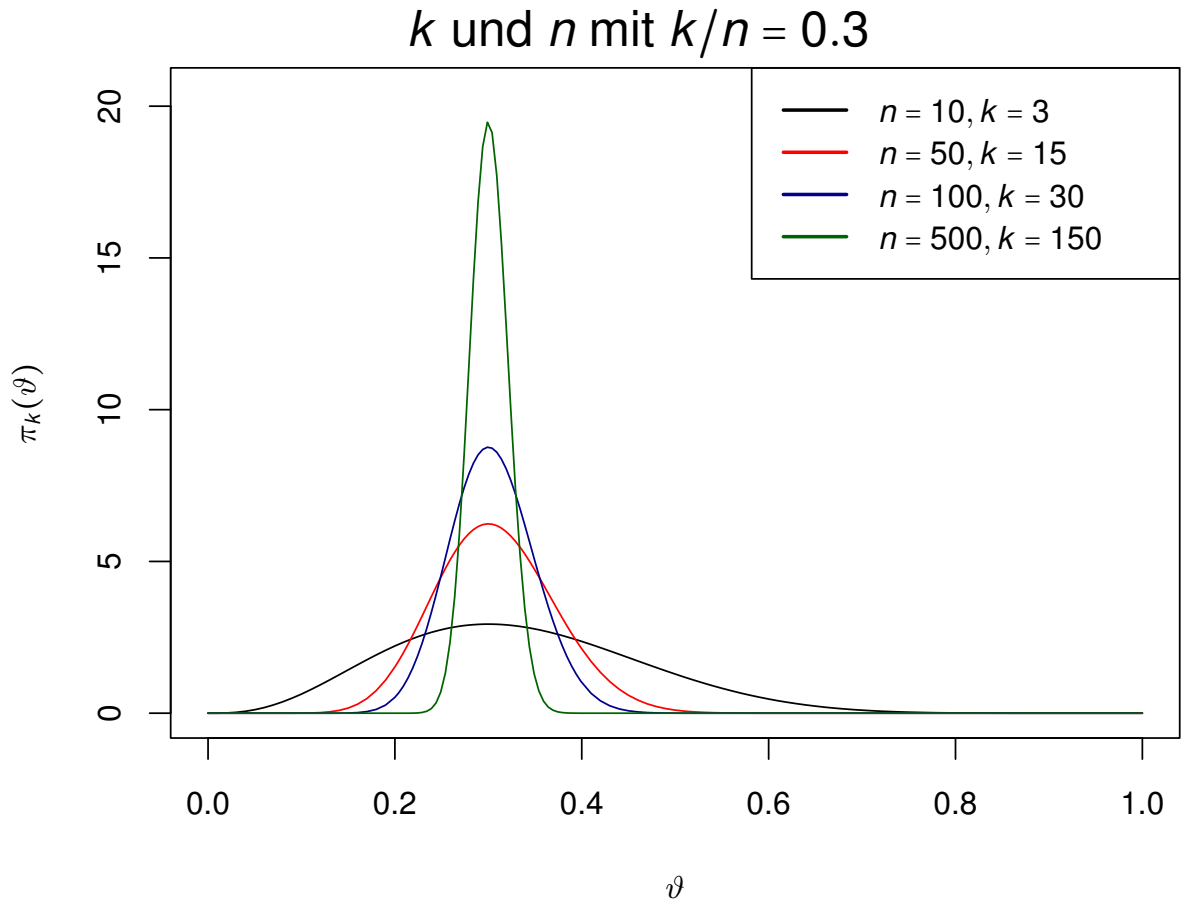
(Beta $(k+1, n-k+1)$,

Demnach (mit obigem Lemma zur Beta-Verteilung) ist

$$\widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}} = \widehat{\vartheta}_{\mathrm{B}}(Y) = \frac{Y+1}{n+2}$$

hat EW $= \frac{k+1}{k+1+n-k+1} = \frac{k+1}{n+2}$)


A posteriori-Dichte $\pi_k(\vartheta)$ für verschiedene
n und k mit $k/n = 0.3$
$n = 10, k = 3$
$n = 50, k = 15$
$n = 100, k = 30$
$n = 500, k = 150$
$\pi_k(\vartheta)$
0
5
10
15
20
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
ϑ



Wir sehen, dass für großes n die a posteriori-Verteilung recht eng um $\frac{Y+1}{n+2} \approx \frac{Y}{n}$ konzentriert ist.

Zudem: die frequentistische und die Bayes'sche „Antwort" stimmen für große n „nahezu" überein.

Bemerkung. Laplace[1] antwortete auf die die von ihm (vielleicht mit einem Augenzwinkern) gestellte Frage:

„Angenommen die Sonne ist bis heute *n*-mal aufgegangen. Mit welcher Wahrscheinlichkeit geht sie morgen auf?“

[1] Pierre-Simon Laplace, 1749–1827; zitiert nach Kersting & Wakolbinger, *Elementare Stochastik*, 2. Aufl., Birkhäuser 2010, S. 127

Bemerkung. Laplace[1] antwortete auf die die von ihm (vielleicht mit einem Augenzwinkern) gestellte Frage:

„Angenommen die Sonne ist bis heute n-mal aufgegangen. Mit welcher Wahrscheinlichkeit geht sie morgen auf?“

$$\frac{n+1}{n+2}$$

[1] Pierre-Simon Laplace, 1749–1827; zitiert nach Kersting & Wakolbinger, *Elementare Stochastik*, 2. Aufl., Birkhäuser 2010, S. 127

Bemerkung. Laplace[1] antwortete auf die die von ihm (vielleicht mit einem Augenzwinkern) gestellte Frage:

„Angenommen die Sonne ist bis heute n-mal aufgegangen. Mit welcher Wahrscheinlichkeit geht sie morgen auf?“

$$\frac{n+1}{n+2}$$

Dies passt zur Antwort des Bayes-Schätzers in obigem Beispiel.

[1] Pierre-Simon Laplace, 1749–1827; zitiert nach Kersting & Wakolbinger, *Elementare Stochastik*, 2. Aufl., Birkhäuser 2010, S. 127

Inhalt

Der sogenannte kleinste-Quadrate-Ansatz ist ebenfalls ein recht allgemeines Prinzip zur Konstruktion von Schätzern, wir betrachten ihn hier am Beispiel des linearen Regressionsmodells:

Der sogenannte kleinste-Quadrate-Ansatz ist ebenfalls ein recht allgemeines Prinzip zur Konstruktion von Schätzern, wir betrachten ihn hier am Beispiel des linearen Regressionsmodells:

Nehmen wir an, die Beobachtungen bestehen aus n Messwertpaaren (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$ (Werte in $\mathbb{R}^2$) und wir vermuten aus theoretischen Gründen einen zumindest „ungefähren“ (affin-)linearen Zusammenhang, d.h. bei „perfekter“ Messung und „perfektem“ Zusammenhang gälte

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i$$

für gewisse (uns unbekannte) Zahlen β_0 und β_1.

Der sogenannte kleinste-Quadrate-Ansatz ist ebenfalls ein recht allgemeines Prinzip zur Konstruktion von Schätzern, wir betrachten ihn hier am Beispiel des linearen Regressionsmodells:

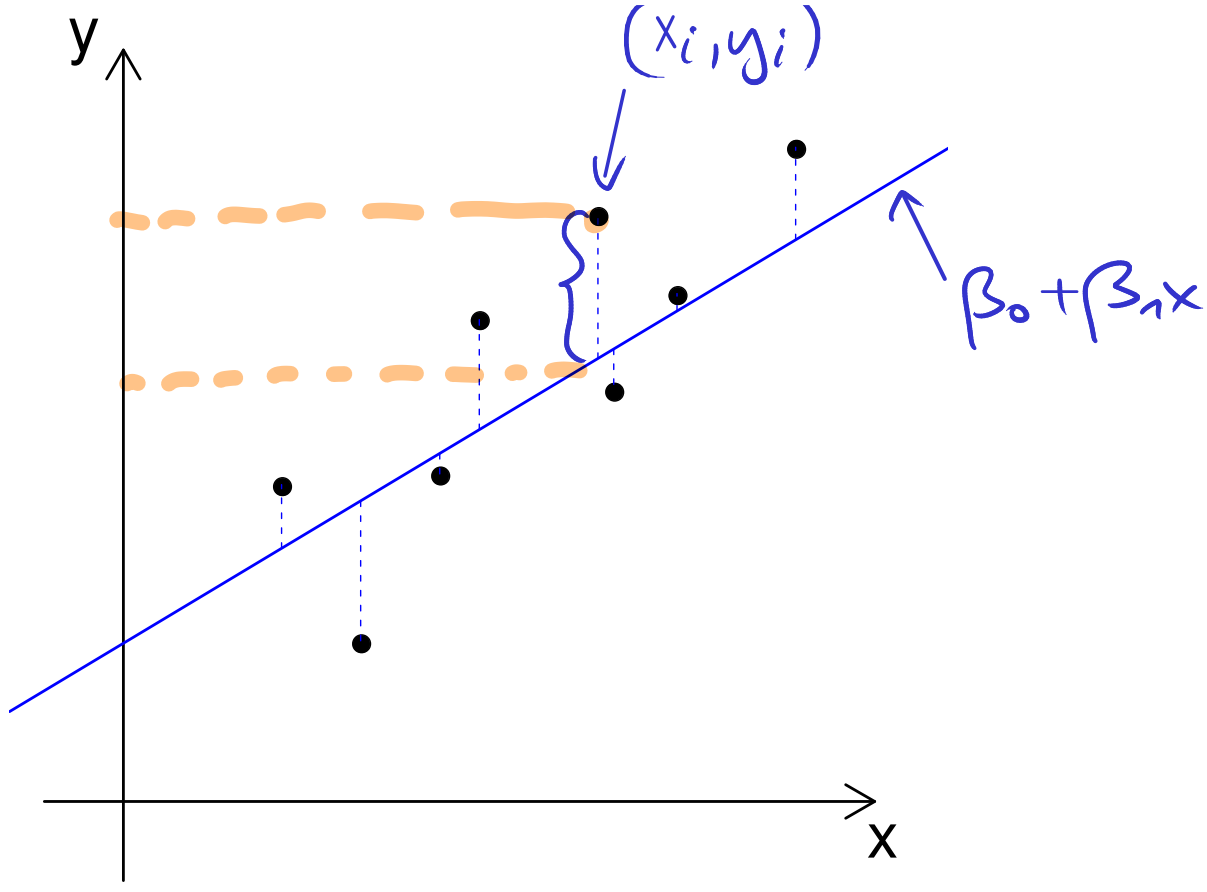
Nehmen wir an, die Beobachtungen bestehen aus n Messwertpaaren (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$ (Werte in $\mathbb{R}^2$) und wir vermuten aus theoretischen Gründen einen zumindest „ungefähren“ (affin-)linearen Zusammenhang, d.h. bei „perfekter“ Messung und „perfektem“ Zusammenhang gälte

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i$$

für gewisse (uns unbekannte) Zahlen β_0 und β_1.

(Ein „Lehrbuchbeispiel“: y_i ist die Länge einer Stahlfeder bei Zugbelastung mit Gewicht x_i innerhalb des Gültigkeitsbereich des Hooke’schen Gesetzes.)

Aufgrund beispielsweise von Messungenauigkeiten (oder womöglich auch weil der lineare Zusammenhang in Wirklichkeit nur approximativ gilt) werden die realen Datenpunkte typischerweise nicht auf einer Geraden liegen.



Formulierung als statistisches Modell:

$x_1, \ldots, x_n$ seien feste (bekannte) Werte (x ist die „erklärende Variable“), für $\vartheta = (\beta_0, \beta_1) \in \Theta = \mathbb{R}^2$ sei unter P_ϑ

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i, \ i = 1, \ldots, n$$

mit ε_i u.i.v. mit $\mathbb{E}[\varepsilon_i] = 0, \ \mathrm{Var}[\varepsilon_i] = \sigma^2$

und wir fassen die beobachteten y_i-Werte als Realisierungen der Y_i auf (y ist die „abhängige Variable“ oder „Zielgröße“).

Formulierung als statistisches Modell:

$x_1, \ldots, x_n$ seien feste (bekannte) Werte (x ist die „erklärende Variable“), für $\vartheta = (\beta_0, \beta_1) \in \Theta = \mathbb{R}^2$ sei unter P_ϑ

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \varepsilon_i, \ i = 1, \ldots, n$$

mit ε_i u.i.v. mit $\mathbb{E}[\varepsilon_i] = 0, \ \mathrm{Var}[\varepsilon_i] = \sigma^2$

und wir fassen die beobachteten y_i-Werte als Realisierungen der Y_i auf (y ist die „abhängige Variable“ oder „Zielgröße“).

Ein naheliegender Ansatz, $\vartheta = (\beta_0, \beta_1)$ zu schätzen, ist der *kleinste-Quadrate-Schätzer*: Finde $\widehat{\beta}_0, \widehat{\beta}_1$ so, dass

$$\sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (\widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_i)\right)^2 = \min_{(\beta_0, \beta_1) \in \mathbb{R}^2} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\right)^2$$

Die Lösung kennen wir schon (vgl. Beob. 1.84), die wir hier gewissermaßen nur „statistisch aussprechen“): Mit

$$\overline{x} := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i, \quad \overline{y} := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i,$$

$$\sigma_x^2 := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2, \quad \sigma_y^2 := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y})^2$$

$$\mathrm{cov}_{x,y} := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})$$

($\mathrm{cov}_{x,y}$ ist die „empirische Kovarianz“ der x- und der y-Werte) ist

$$\widehat{\beta}_1 = \frac{\mathrm{cov}_{x,y}}{\sigma_x^2}, \quad \widehat{\beta}_0 = \overline{y} - \widehat{\beta}_1 \overline{x}.$$

(insbes. $\overline{y} = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 \overline{x}$)

Die Gerade $x \mapsto \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x$ heißt auch die *Ausgleichsgerade*, der Wert $\widehat{y}_i = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_i$ der anhand von x_i „vorhergesagte Wert“ oder „Ausgleichswert“.

Man nennt weiter

$$r_i := y_i - \widehat{y}_i = y_i - (\widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_i)$$

das *Residuum* zum i-ten Beobachtungswert (der „Rest“ der Abweichung, die von dem Modell (nur) durch den „Rauschterm“ erklärt wird).

$$\kappa_{x,y} := \frac{\mathrm{cov}_{x,y}}{\sigma_x \sigma_y}$$

ist der (empirische) Korrelationskoeffizient, auch *Pearsons Korrelationskoeffizient*[2].

[2] nach Karl Pearson, 1858–1936

$$\kappa_{X,Y} := \frac{\mathrm{cov}_{X,Y}}{\sigma_X \sigma_Y}$$

(stets ist $-1 \leq \kappa_{X,Y} \leq 1$, nach Cauchy-Schwarz-Ungleichung).

$$\kappa_{x,y} := \frac{\mathrm{cov}_{x,y}}{\sigma_x \sigma_y}$$

(stets ist $-1 \leq \kappa_{x,y} \leq 1$, nach Cauchy-Schwarz-Ungleichung).

$R = \kappa_{x,y}^2$ nennt man auch das *Bestimmtheitsmaß*.

Je näher R an 1 liegt, um so besser passt die lineare Approximation der y-Werte durch die x-Werte.

$$\kappa_{x,y} := \frac{\mathrm{cov}_{x,y}}{\sigma_x \sigma_y}$$

(stets ist $-1 \leq \kappa_{x,y} \leq 1$, nach Cauchy-Schwarz-Ungleichung).

$R = \kappa_{x,y}^2$ nennt man auch das *Bestimmtheitsmaß*.

Je näher R an 1 liegt, um so besser passt die lineare Approximation der y-Werte durch die x-Werte.

Das sieht man auch gut an der alternativen Formel

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n (\widehat{y}_i - \overline{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \overline{y})^2} = 1 - \frac{\left(\frac{1}{n}\right) \sum_{i=1}^n r_i^2}{\left(\frac{1}{n}\right) \sum_{i=1}^n (y_i - \overline{y})^2}$$

Zu den Formeln: Betrachte eine ZV $(\widetilde{X}, \widetilde{Y})$ mit Werten in $\mathbb{R}^2$, deren Verteilung die empirische Verteilung der Datenpunkte $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \delta_{(x_i,y_i)}$ ist, so ist

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}[\widetilde{X}] = \overline{x}, \quad \mathbb{E}[\widetilde{Y}] = \overline{y},\\
&\mathrm{Var}[\widetilde{X}] = \sigma_x^2, \quad \mathrm{Var}[\widetilde{Y}] = \sigma_y^2,\\
&\mathrm{Cov}[\widetilde{X}, \widetilde{Y}] = \mathrm{cov}_{x,y}, \quad \kappa_{\widetilde{X},\widetilde{Y}} = \kappa_{x,y}
\end{aligned}$$

und die Behauptung folgt wörtlich aus Beob. 1.84, dort hatten wir gerechnet:

$$\min_{\beta_0,\beta_1\in\mathbb{R}} \mathbb{E}\big[(\widetilde{Y} - \beta_1\widetilde{X} - \beta_0)^2\big] = (1 - \kappa^2_{\widetilde{X},\widetilde{Y}}) \min_{\beta_0\in\mathbb{R}} \mathbb{E}\big[(\widetilde{Y} - \beta_0)^2\big]$$

$$\Big(= (1 - \kappa^2_{\widetilde{X},\widetilde{Y}})\mathrm{Var}[\widetilde{Y}]\Big)$$

$$\min_{\beta_0,\beta_1\in\mathbb{R}} \mathbb{E}\big[(\widetilde{Y}-\beta_1\widetilde{X}-\beta_0)^2\big] = (1-\kappa^2_{\widetilde{X},\widetilde{Y}}) \min_{\beta_0\in\mathbb{R}} \mathbb{E}\big[(\widetilde{Y}-\beta_0)^2\big]$$

denn der Ausdruck auf der linken Seite ist

$$\begin{aligned}
&\mathrm{Var}[\widetilde{Y}-\beta_1\widetilde{X}-\beta_0] + \big(\mathbb{E}[\widetilde{Y}]-\beta_1\mathbb{E}[\widetilde{X}]-\beta_0\big)^2\\
&= \mathrm{Var}[\widetilde{Y}] - 2\beta_1\mathrm{Cov}[\widetilde{X},\widetilde{Y}] + \beta_1^2\mathrm{Var}[\widetilde{X}] + \big(\mathbb{E}[\widetilde{Y}]-\beta_1\mathbb{E}[\widetilde{X}]-\beta_0\big)^2\\
&= \sigma^2_{\widetilde{Y}} - 2\beta_1\sigma_{\widetilde{X}}\sigma_{\widetilde{Y}}\kappa_{\widetilde{X},\widetilde{Y}} + \beta_1^2\sigma^2_{\widetilde{X}} + \big(\mathbb{E}[\widetilde{Y}]-\beta_1\mathbb{E}[\widetilde{X}]-\beta_0\big)^2\\
&= \sigma^2_{\widetilde{Y}}\big(1-\kappa^2_{\widetilde{X},\widetilde{Y}}\big) + \sigma^2_{\widetilde{X}}\Big(\beta_1 - \frac{\sigma_{\widetilde{Y}}}{\sigma_{\widetilde{X}}}\kappa_{\widetilde{X},\widetilde{Y}}\Big)^2 + \big(\mathbb{E}[\widetilde{Y}]-\beta_1\mathbb{E}[\widetilde{X}]-\beta_0\big)^2,
\end{aligned}$$

was offensichtlich minimal wird für die Wahl

$$\beta_1 = \beta_1^* := \frac{\sigma_{\widetilde{Y}}}{\sigma_{\widetilde{X}}}\kappa_{\widetilde{X},\widetilde{Y}}, \qquad \beta_0 = \beta_0^* := \mathbb{E}[\widetilde{Y}] - \beta_1^*\mathbb{E}[\widetilde{X}]$$

und dann den Wert $(1-\kappa^2_{\widetilde{X},\widetilde{Y}})\sigma^2_{\widetilde{Y}}$ hat.

$$\min_{\beta_0,\beta_1\in\mathbb{R}} \mathbb{E}\big[(\widetilde{Y}-\beta_1\widetilde{X}-\beta_0)^2\big] = (1-\kappa^2_{\widetilde{X},\widetilde{Y}}) \min_{\beta_0\in\mathbb{R}} \mathbb{E}\big[(\widetilde{Y}-\beta_0)^2\big]$$

$$\Big(= (1-\kappa^2_{\widetilde{X},\widetilde{Y}})\mathrm{Var}[\widetilde{Y}]\Big)$$

Für den Zusatz beachte analog:

$$\mathbb{E}\big[(\widetilde{Y}-\beta_0)^2\big] = \mathbb{E}[\widetilde{Y}^2] - 2\beta\mathbb{E}[\widetilde{Y}] + \beta^2 = \mathrm{Var}[\widetilde{Y}] + \big(\beta - \mathbb{E}[\widetilde{Y}]\big)^2$$

ist minimal für die Wahl $\beta = \mathbb{E}[\widetilde{Y}]$.

$$\min_{\beta_0,\beta_1\in\mathbb{R}} \mathbb{E}\big[(\widetilde{Y}-\beta_1\widetilde{X}-\beta_0)^2\big] = (1-\kappa^2_{\widetilde{X},\widetilde{Y}}) \min_{\beta_0\in\mathbb{R}} \mathbb{E}\big[(\widetilde{Y}-\beta_0)^2\big]$$
$$\Big(= (1-\kappa^2_{\widetilde{X},\widetilde{Y}})\mathrm{Var}[\widetilde{Y}]\Big)$$

Für den Zusatz beachte analog:

$$\mathbb{E}\big[(\widetilde{Y}-\beta_0)^2\big] = \mathbb{E}[\widetilde{Y}^2] - 2\beta\mathbb{E}[\widetilde{Y}] + \beta^2 = \mathrm{Var}[\widetilde{Y}] + \big(\beta - \mathbb{E}[\widetilde{Y}]\big)^2$$

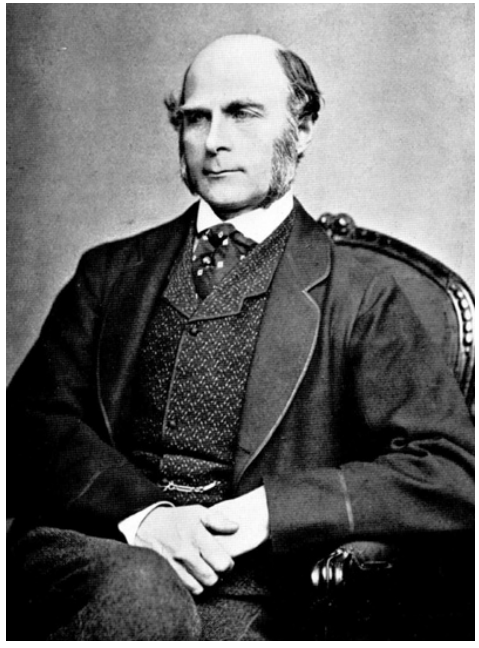
ist minimal für die Wahl $\beta = \mathbb{E}[\widetilde{Y}]$.

Übrigens: Wenn man zusätzlich annimmt, dass die ε_i u.i.v. $\sim \mathcal{N}_{0,\sigma^2}$ sind, so ist der kleinste-Quadrate-Schätzer hier auch zugleich der Maximum-Likelihood-Schätzer
(mit einer Rechnung analog zum Beispiel für den Erwartungswert-ML-Schätzer).

Inhalt

Woher kommt der Name „Regression“
(nach lat. regressio, Zurückkommen)?

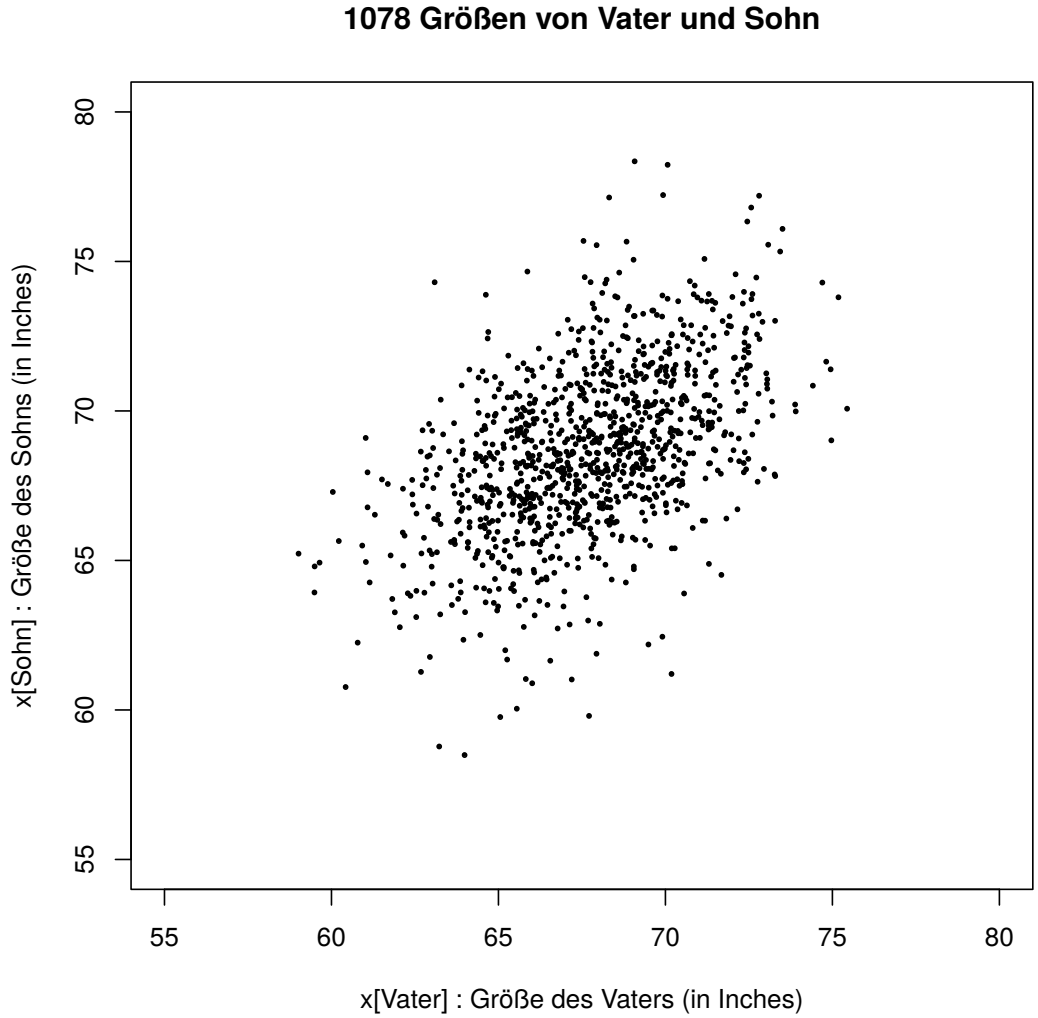
Woher kommt der Name „Regression“
(nach lat. regressio, Zurückkommen)?



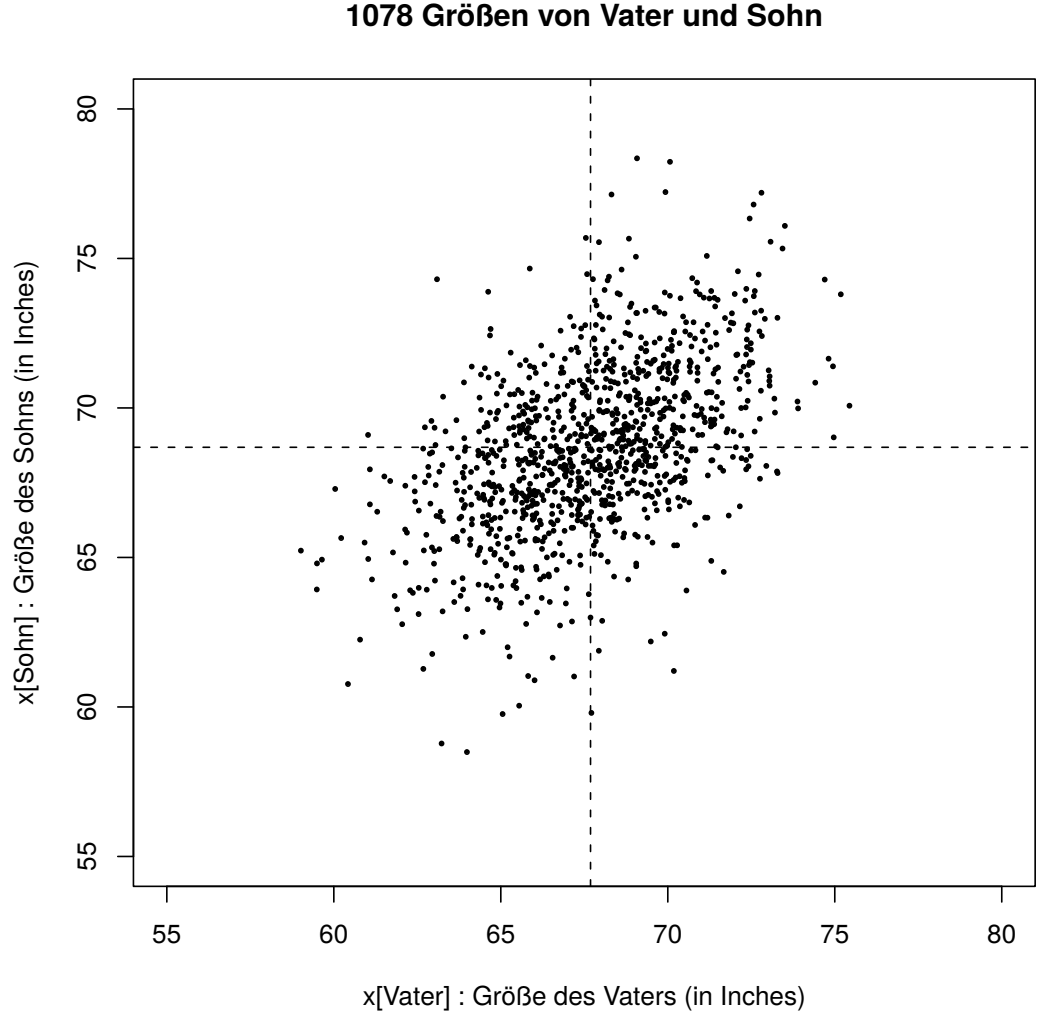
Francis Galton (1822–1911, engl. Wissenschaftler)

hat angesichts biometrischer Beobachtungen den Ausdruck
“regression towards the mean” geprägt.

Ein (relativ berühmter) Datensatz von Karl Pearson (1858-1936)

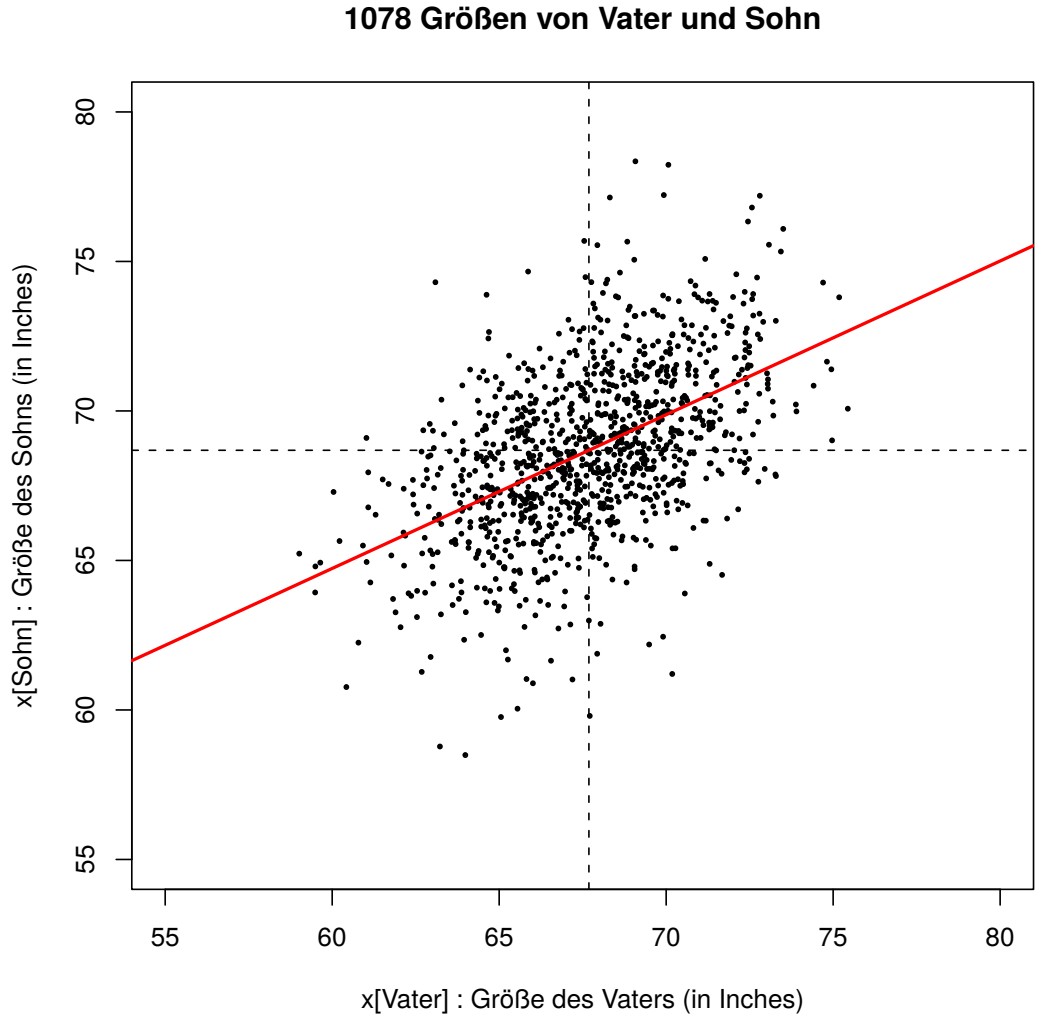


Ein (relativ berühmter) Datensatz von Karl Pearson (1858-1936)



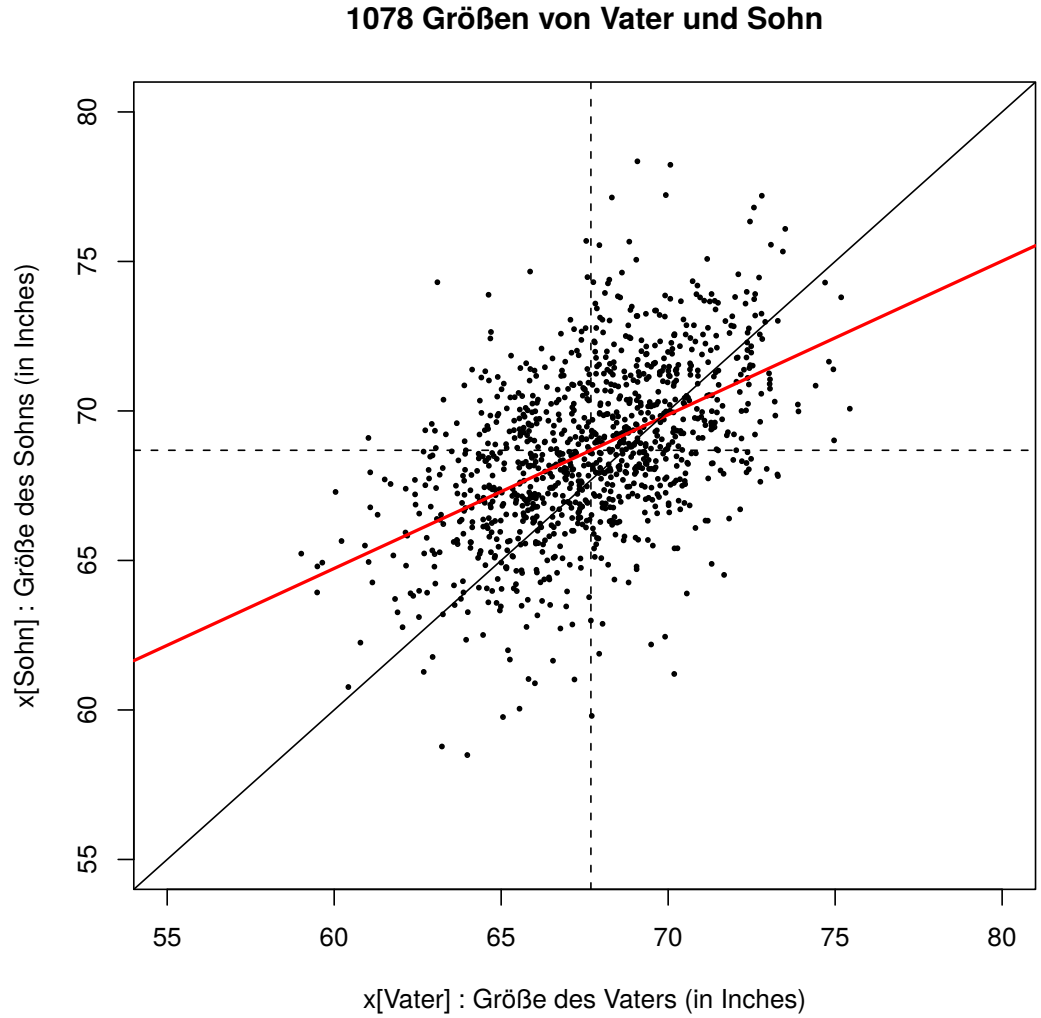
$\overline{x}_{\text{Vater}} = 67.7$, $\overline{x}_{\text{Sohn}} = 68.7$, $\sigma^2_{\text{Vater}} = 7.52$ ($\sigma_{\text{Vater}} = 2.74$, $\sigma_{\text{Sohn}} = 2.81$),
$\text{cov}(x_{\text{Vater}}, x_{\text{Sohn}}) = 3.87$
(Korrelationskoeffizient $\kappa = \text{cov}(x_{\text{Vater}}, x_{\text{Sohn}})/(\sigma_{\text{Vater}}\,\sigma_{\text{Sohn}})) = 0.50$)

Ein (relativ berühmter) Datensatz von Karl Pearson (1858-1936)

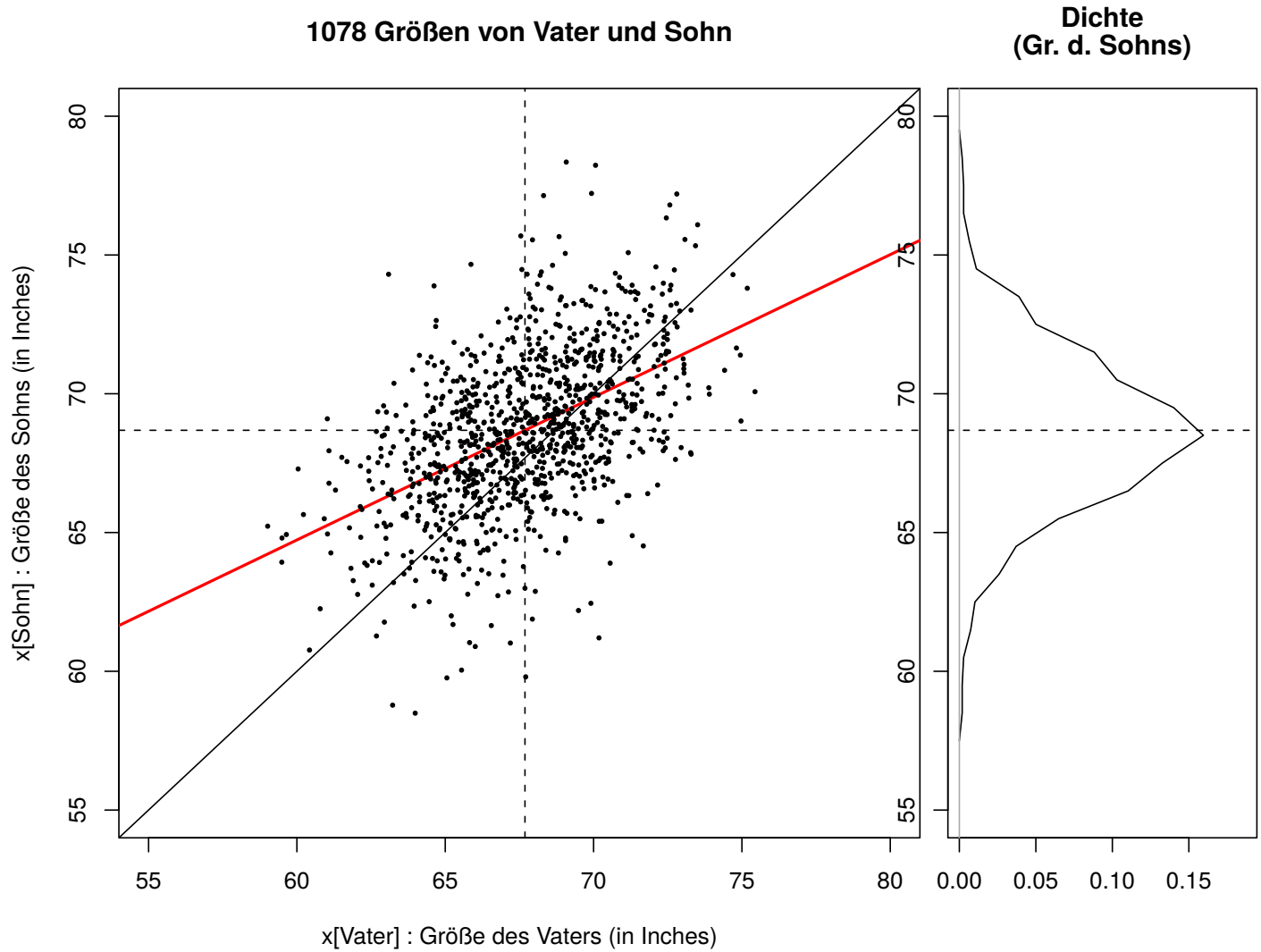


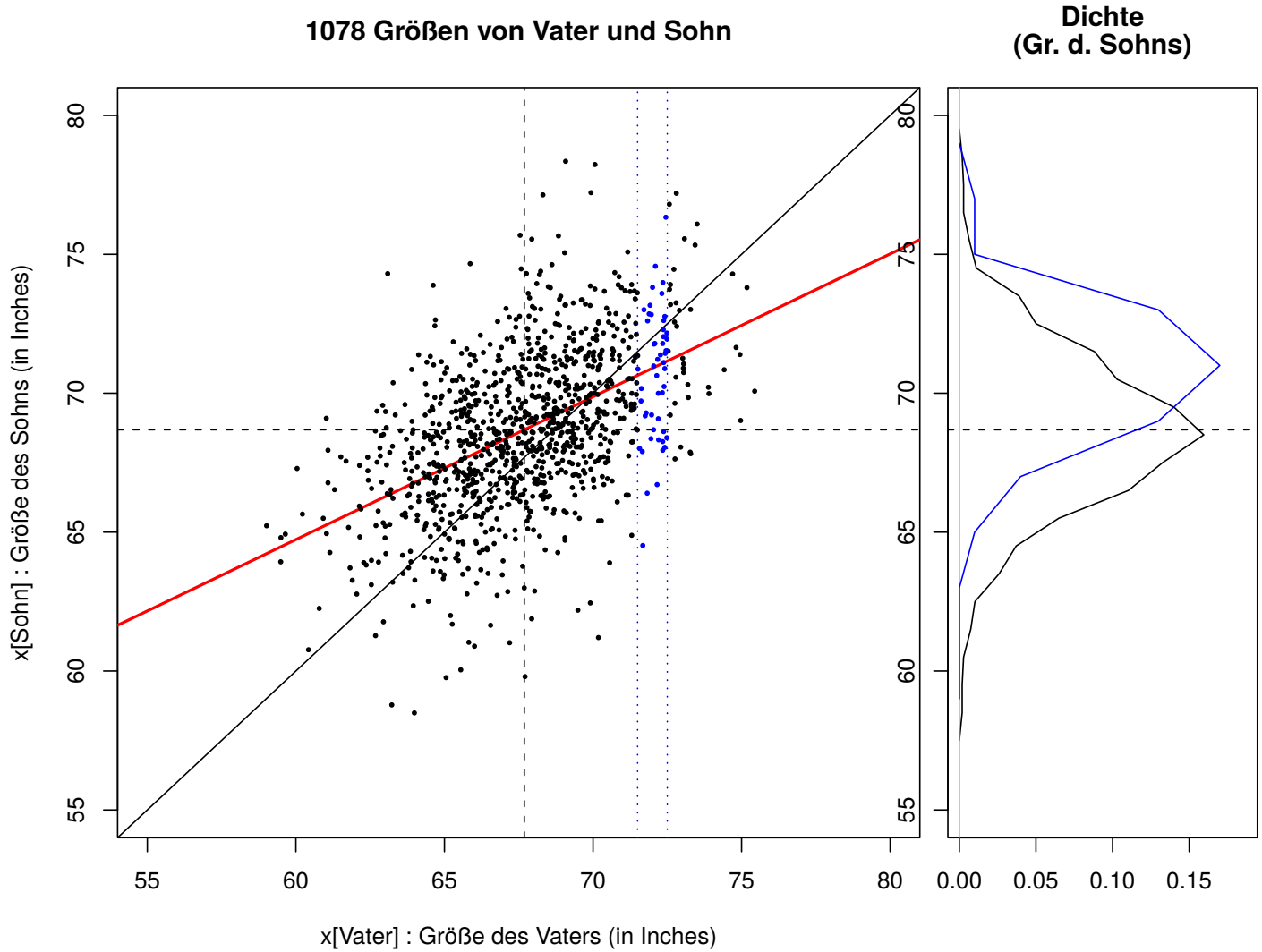
$\overline{x}_{\text{Vater}} = 67.7$, $\overline{x}_{\text{Sohn}} = 68.7$, $\sigma^2_{\text{Vater}} = 7.52$ ($\sigma_{\text{Vater}} = 2.74$, $\sigma_{\text{Sohn}} = 2.81$),
$\text{cov}(x_{\text{Vater}}, x_{\text{Sohn}}) = 3.87$
(Korrelationskoeffizient $\kappa = \text{cov}(x_{\text{Vater}}, x_{\text{Sohn}})/(\sigma_{\text{Vater}}\,\sigma_{\text{Sohn}})) = 0.50$)
Regressionsgerade: $x_{\text{Sohn}} = 33.89 + 0.514 x_{\text{Vater}}$.

Ein (relativ berühmter) Datensatz von Karl Pearson (1858-1936)

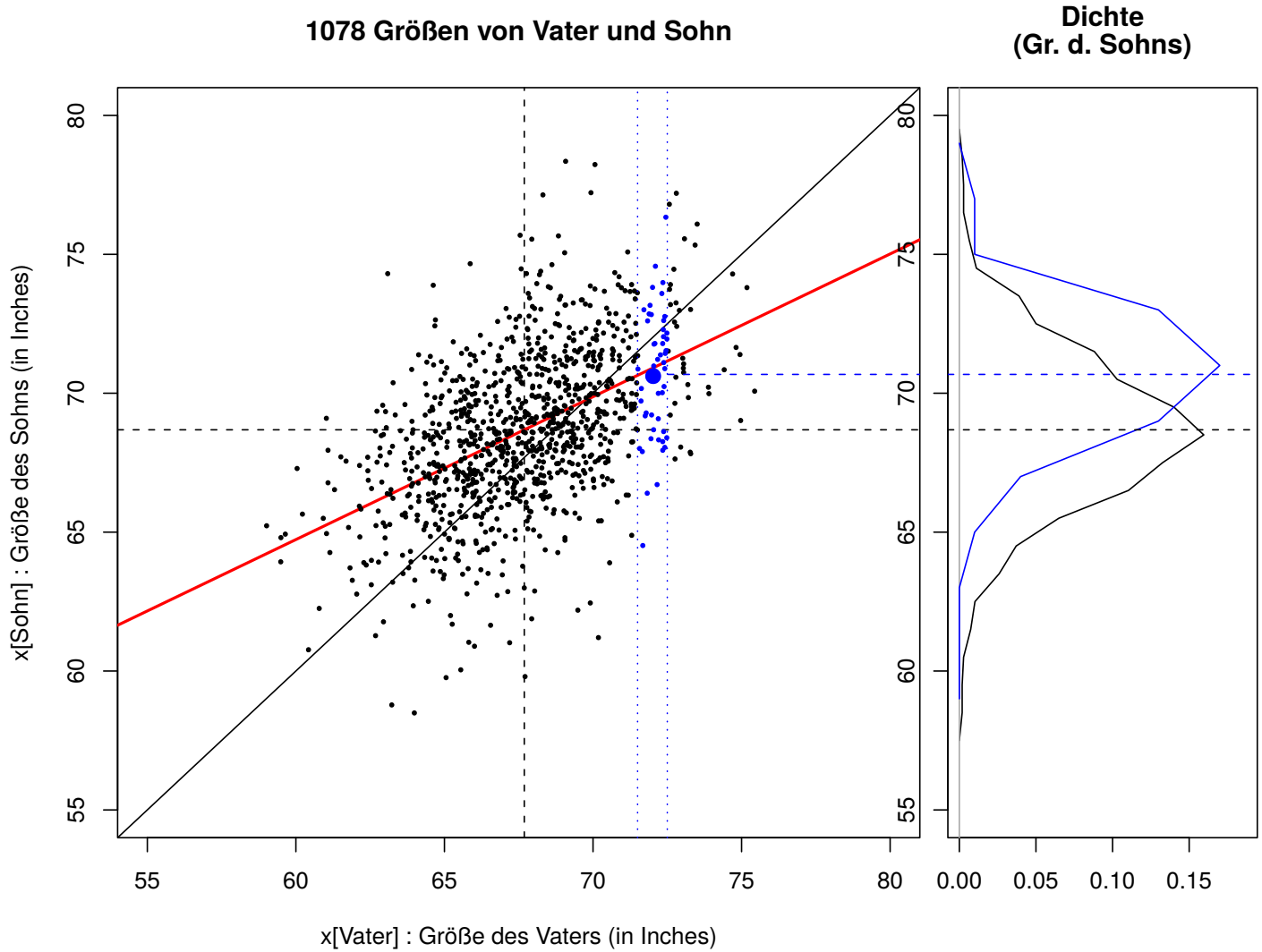


$\overline{x}_{\text{Vater}} = 67.7$, $\overline{x}_{\text{Sohn}} = 68.7$, $\sigma^2_{\text{Vater}} = 7.52$ ($\sigma_{\text{Vater}} = 2.74$, $\sigma_{\text{Sohn}} = 2.81$),
$\text{cov}(x_{\text{Vater}}, x_{\text{Sohn}}) = 3.87$
(Korrelationskoeffizient $\kappa = \text{cov}(x_{\text{Vater}}, x_{\text{Sohn}})/(\sigma_{\text{Vater}}\,\sigma_{\text{Sohn}})) = 0.50$)
Regressionsgerade: $x_{\text{Sohn}} = 33.89 + 0.514 x_{\text{Vater}}$.

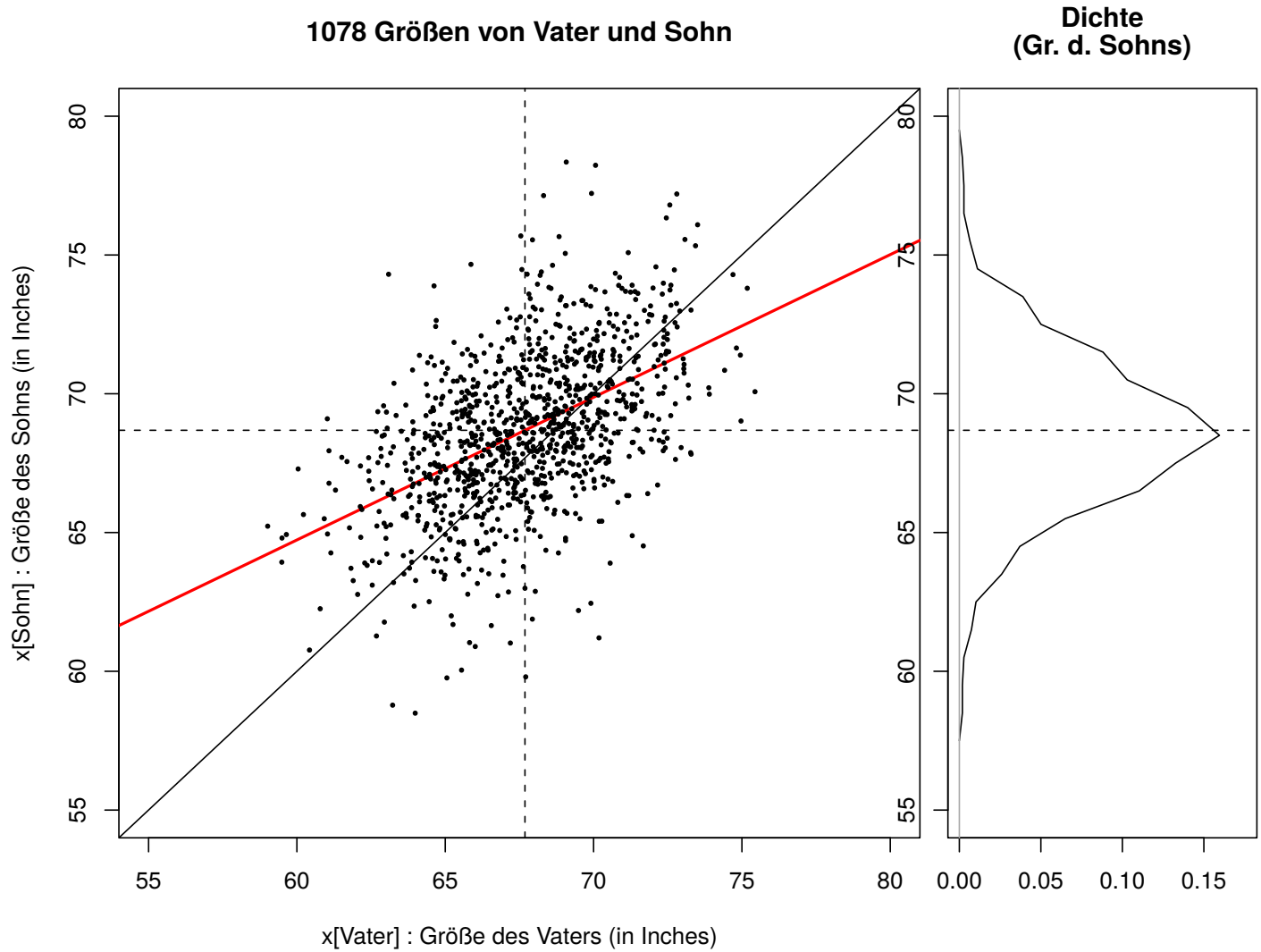

1078 Größen von Vater und Sohn
Dichte
(Gr. d. Sohns)
x[Sohn] : Größe des Sohns (in Inches)
x[Vater] : Größe des Vaters (in Inches)
55
60
65
70
75
80
0.00
0.05
0.10
0.15

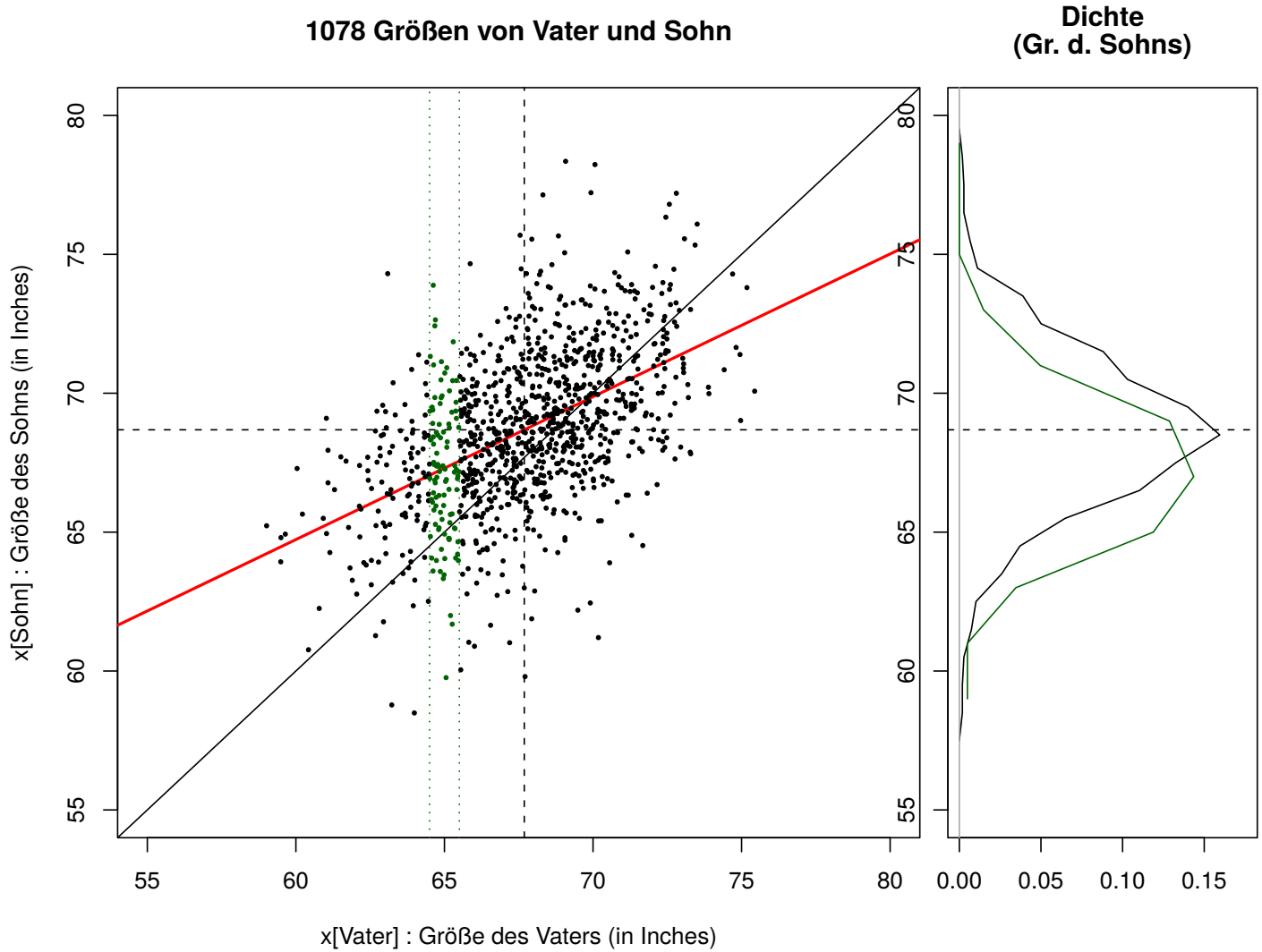


Betrachten wir die Söhne von überdurchschnittlich großen Vätern (z.B. Väter, die ca. 72 Inches groß sind):

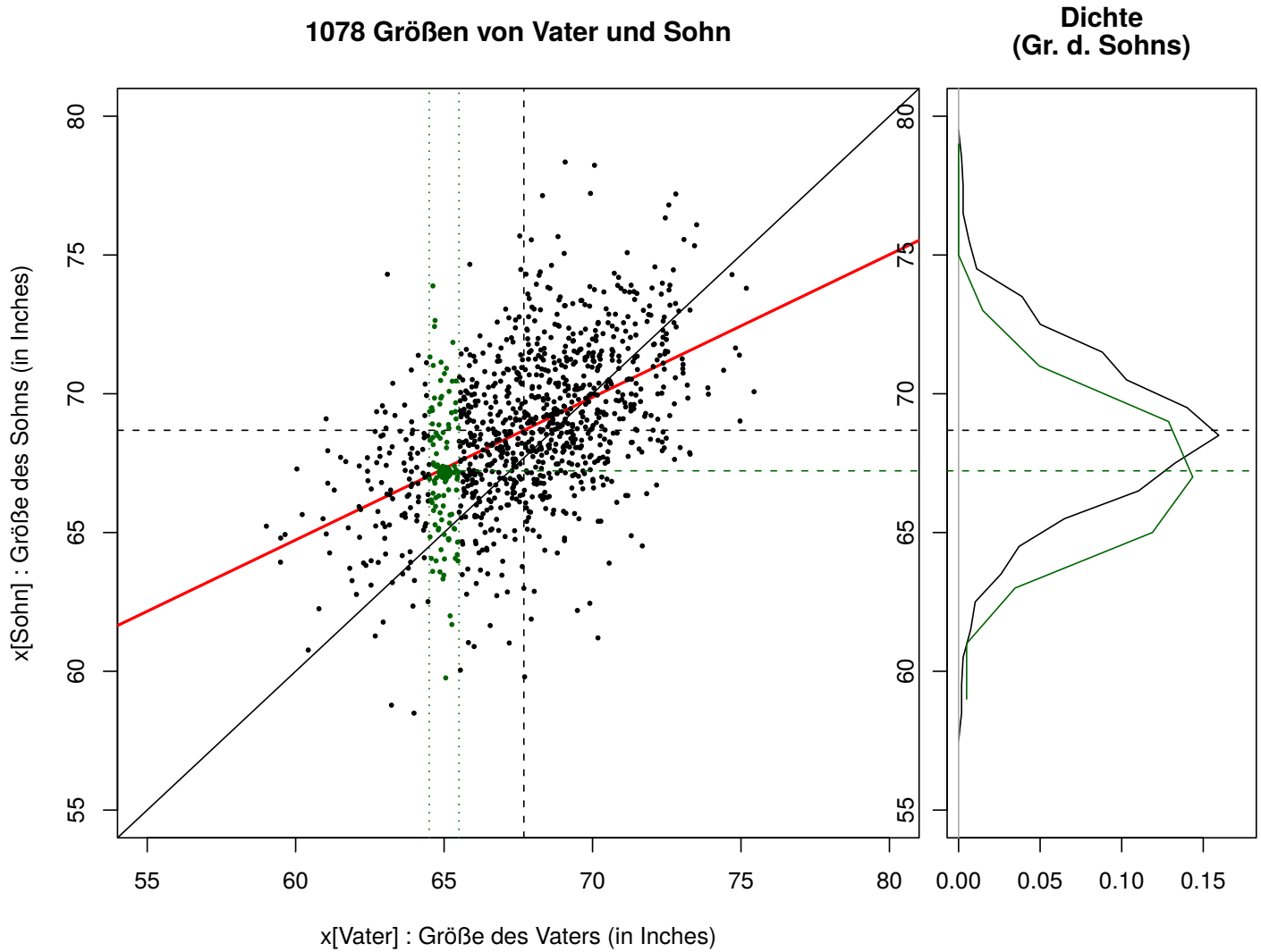


Betrachten wir die Söhne von überdurchschnittlich großen Vätern
(z.B. Väter, die ca. 72 Inches groß sind):
Diese Söhne sind überdurchschnittlich groß (im Vergleich zu allen Söhnen),
aber im Mittel kleiner als ihr Vater.


1078 Größen von Vater und Sohn
Dichte
(Gr. d. Sohns)
x[Sohn] : Größe des Sohns (in Inches)
x[Vater] : Größe des Vaters (in Inches)
55
60
65
70
75
80
0.00
0.05
0.10
0.15

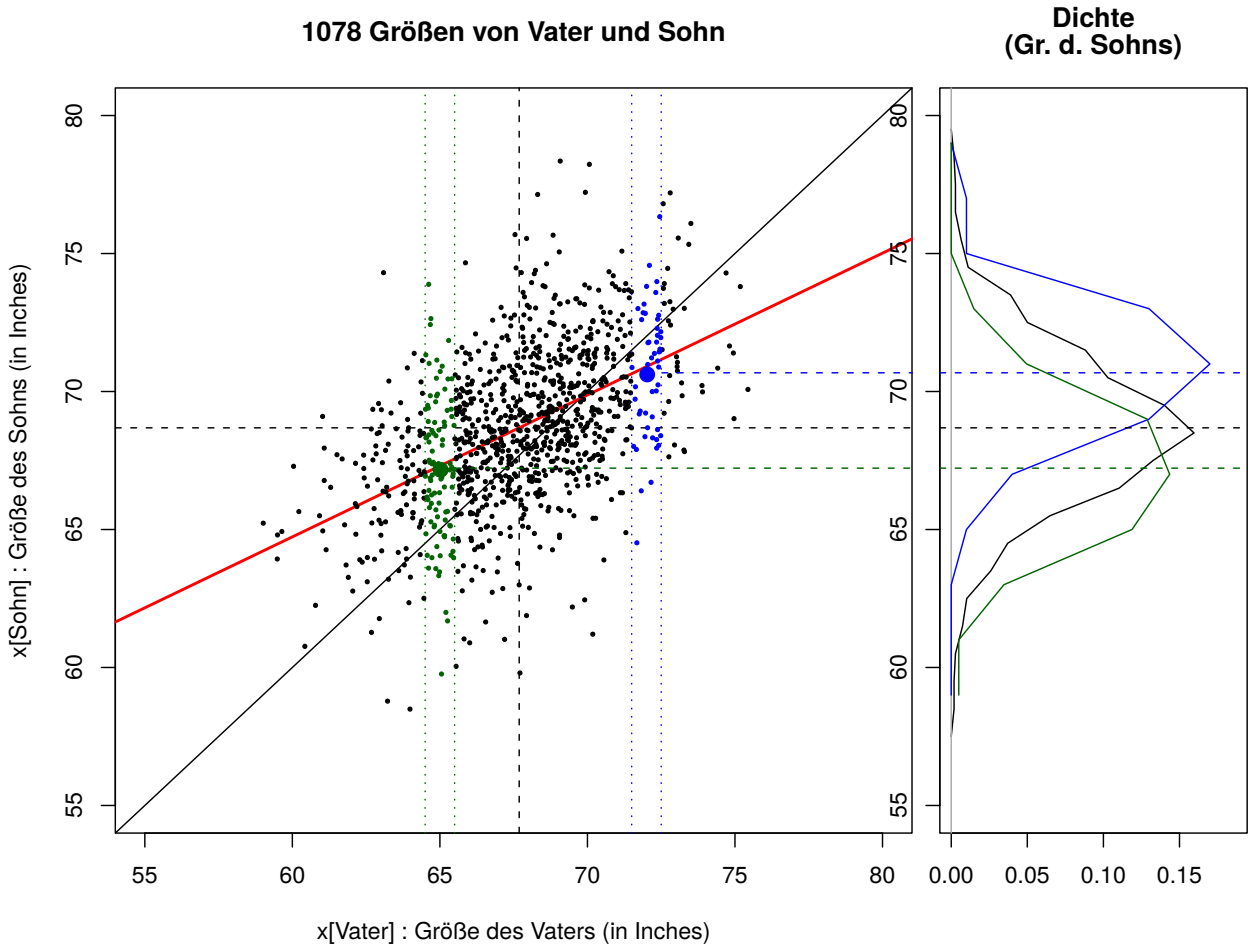


Betrachten wir andererseits die Söhne von unterdurchschnittlich großen Vätern (z.B. Väter, die ca. 65 Inches groß sind):



Betrachten wir andererseits die Söhne von unterdurchschnittlich großen Vätern (z.B. Väter, die ca. 65 Inches groß sind):
Diese Söhne sind unterdurchschnittlich groß (im Vergleich zu allen Söhnen), aber im Mittel größer als ihr Vater.

“Regression towards the mean”



Wir sehen: Söhne überdurchschnittlich großer Väter sind im Mittel kleiner als ihr Vater (aber immer noch größer als der Populationsdurchschnitt), für Söhne unterdurchschnittlich großer Väter ist es umgekehrt: „Rückkehr zum Mittelwert“

Bemerkung: Das beobachtete Phänomen der „Rückkehr zum Mittelwert“ bedeutet nicht notwendigerweise einen tieferen kausalen Zusammenhang, es tritt stets im Zusammenhang mit natürlicher Variabilität auf (technisch gesehen stets, wenn für den Korrelationkoeffizient κ gilt $|\kappa| < 1$).

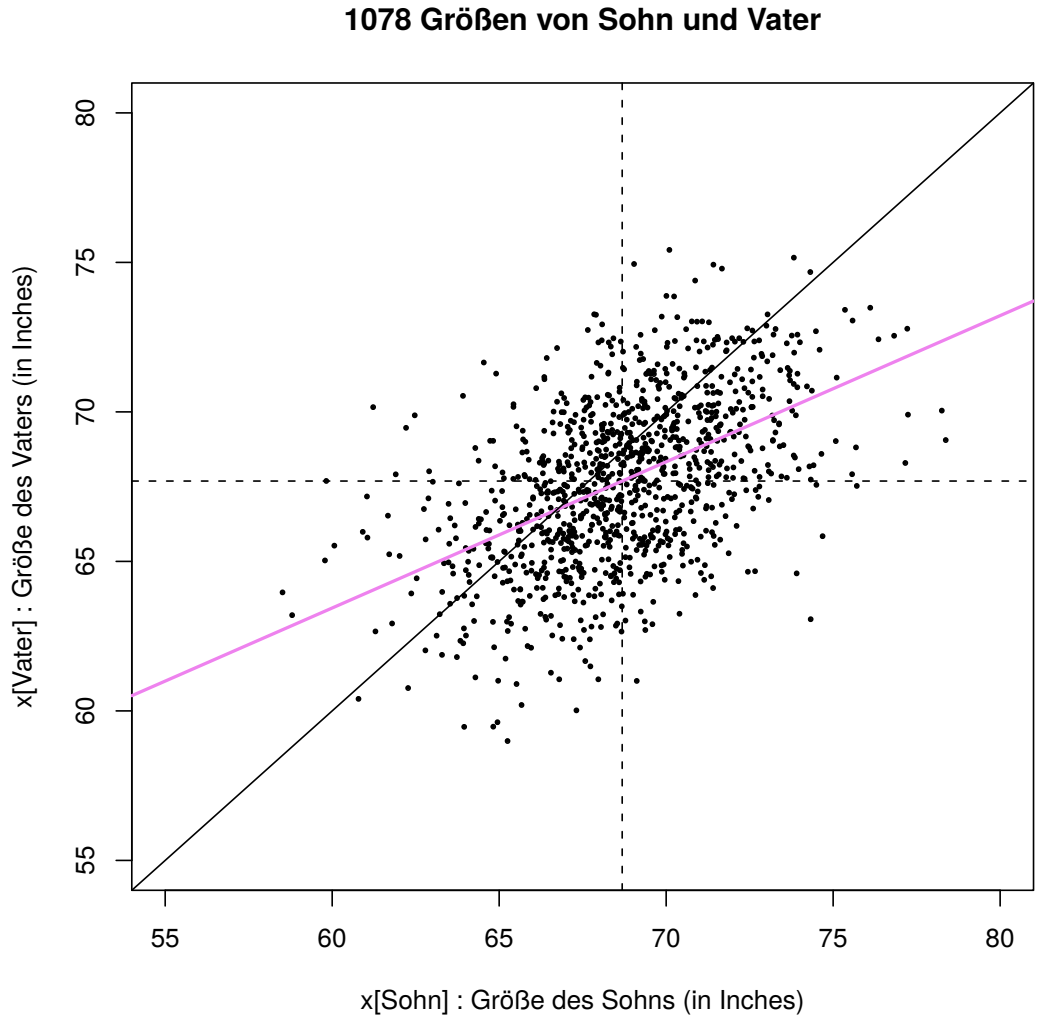
Bemerkung: Das beobachtete Phänomen der „Rückkehr zum Mittelwert“ bedeutet nicht notwendigerweise einen tieferen kausalen Zusammenhang, es tritt stets im Zusammenhang mit natürlicher Variabilität auf (technisch gesehen stets, wenn für den Korrelationkoeffizient κ gilt $|\kappa| < 1$).

Bestimmen wir (spaßeshalber) im Größen-Beispiel die Regressionsgerade für die Größe des Vaters als Funktion der Größe des Sohns:

Bemerkung: Das beobachtete Phänomen der „Rückkehr zum Mittelwert“ bedeutet nicht notwendigerweise einen tieferen kausalen Zusammenhang, es tritt stets im Zusammenhang mit natürlicher Variabilität auf (technisch gesehen stets, wenn für den Korrelationkoeffizient κ gilt $|\kappa| < 1$).

Bestimmen wir (spaßeshalber) im Größen-Beispiel die Regressionsgerade für die Größe des Vaters als Funktion der Größe des Sohns:

Wir hatten $\overline{x}_{\text{Vater}} = 67.7$, $\overline{x}_{\text{Sohn}} = 68.7$, $\text{cov}(x_{\text{Vater}}, x_{\text{Sohn}}) = 3.87$, $\sigma^2_{\text{Sohn}} = 7.92$
und finden die Regressionsgerade $x_{\text{Vater}} = 34.1 + 0.489 x_{\text{Sohn}}$



Regressionsgerade: $x_{\text{Vater}} = 34.1 + 0.489 x_{\text{Sohn}}$