

GEORG-AUGUST-UNIVERSITÄT GÖTTINGEN

FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK UND INFORMATIK

INSTITUT FÜR MATHEMATISCHE STOCHASTIK

BACHELORARBEIT

Vergleich von Regressionsmodellen mittels gleichmäßiger Konfidenzbänder

Comparison of regression models using simultaneous confidence
bands

Autor:

Rolf Tobias Hajo Henrik
Henning Hause

Erstgutachter:

Prof. Dr. Tatyana
Krivobokova

Matrikelnummer:

21340619

Zweitgutachter:

Jun.-Prof. Dr. Andrea
Krajina

Studiengang:

B. Sc. Mathematik

Abgabetermin:

11.07.2017

Inhaltsverzeichnis

1	Regression und Konfidenzbänder	5
1.1	Regression	5
1.2	Konfidenzbänder	9
1.3	Konfidenzbänder auf \mathbb{R}^n für ein multiples lineares Regressionsmodell	10
1.4	Konfidenzbänder auf einem Intervall für ein einfaches lineares Regressionsmodell	15
1.5	Konfidenzbänder auf einem Intervall für ein multiples lineares Regressionsmodell	17
1.6	Konfidenzbänder auf auf einem Intervall für ein Regressionsmodell mit Polynomgestalt	20
2	Vergleich von zwei Regressionsmodellen	25
2.1	F-Test	26
2.2	Vergleich von Regressionsmodellen mit Konfidenzbändern	29
3	Teil eines Regressionsmodells überprüfen	32
3.1	F-Fest	32
3.2	Teil eines Regressionsmodells auf einem Intervall überprüfen	33
3.3	Teil eines Regressionsmodells überprüfen, wenn das Modell Polynomgestalt hat	34
4	Regression und Konfidenzbänder für abhängige Daten	36
4.1	Autoregressive Modelle und AR(1)	36
4.2	AR(1) und das <i>nlme</i> Paket	37
4.3	Konfidenzbänder für AR(1)	39
5	Datenbeschreibung und Resultate	42
5.1	Datenbeschreibung	42
5.2	Vergleich verschiedener Konfidenzbänder	43
5.3	Vergleich von Polynomen mit verschiedenem Grad	44
5.4	Vergleich von 10 kPa und 30 kPa Daten	48
5.5	Teil eines Regressionsmodells überprüfen	50
	Selbstständigkeitserklärung	54

Einleitung

Diese Ausarbeitung behandelt Methoden, um Regressionsmodelle zu vergleichen. Seien zwei Regressionsmodelle

$$Y_i = X_i\beta_i + e_i, i \in \{1, 2\}$$

gegeben. Dabei seien $Y_i = (Y_{i,1}, \dots, Y_{i,n_i})'$ zwei Vektoren mit Beobachtungen.

Weiterhin sei X_i eine $n_i \times (p+1)$ Designmatrix mit festem Design, das heißt, für $i \in \{1, \dots, \min(n_1, n_2)\}$ ist die l -te Zeile von X_1 gleich der l -ten Zeile von X_2 .

Weiterhin ist $\beta_i = (\beta_{i,0}, \dots, \beta_{i,p})'$ ein Koeffizientenvektor und $e_i = (e_{i,1}, \dots, e_{i,n_i})'$ ein Vektor mit Zufallsfehlern. Also sind Y_1 und Y_2 zwei Gruppen von Beobachtungen, die von den selben Kovariaten abhängen.

Ein Beispiel, entnommen [Liu64, S. 116], ist zu Vergleichen, wie das Alter den Blutdruck von Männern und Frauen beeinflusst. Man hat zwei verschiedene Beobachtungen Y_i , den Blutdruck der Männer und den Blutdruck der Frauen, und versucht diese Beobachtungen mit dem selben Modell X_i zu erklären. Da man eventuell verschieden viele Beobachtungen hat, haben die X_i dann verschiedene Dimensionen.

Im Modell der gewöhnlichen linearen Regression ist $e_i \sim \mathcal{N}_{n_i}(0, \sigma^2 I_{n_i})$. Es stellt sich die Frage zu testen, ob

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 \text{ vs. } H_1 : \beta_1 \neq \beta_2$$

Dieser Test wird normalerweise mit einem F-Test durchgeführt. In dieser Ausarbeitung werden alternative, auf Konfidenzbändern basierende Methoden nach [Liu64] betrachtet. Insbesondere die folgenden Spezialfälle sind von Interesse:

- Das Modell hat Polynomgestalt, das heißt die l -te ($1 \leq l \leq n_i$) Zeile der Designmatrix X ist von der Form $(1, x_{i,l}, x_{i,l}^2, \dots, x_{i,l}^p)$.
- Den Fehlern liegt ein AR(1)-Prozess zugrunde, das heißt $e_i \sim \mathcal{N}_{n_i}(0, \sigma^2 \Upsilon)$ mit $\Upsilon \neq I_{n_i}$.
- Man vergleicht die Regressionsmodelle nicht direkt sondern prüft, ob ein Teil des Regressionsmodells nicht signifikant ist. Das heißt man unterteilt $\beta = (\beta_1, \beta_2)$ und prüft, ob β_2 signifikant Null ist.

Motivation für diese Betrachtungen sind der Vergleich von verschiedenen Regressionsmodellen für Stammzellen.

Das Kapitel 1 stellt die Konzepte der Regression und der Konfidenzbänder vor. Außerdem werden Methoden angegeben, wie für diese Regressionsgraphen Konfidenzbänder konkret zu berechnen sind.

Das Kapitel 2 führt aus, wie man Regressionsmodelle mittels des F-Tests vergleicht. Danach werden, mit Hilfe der Methoden aus dem ersten Kapitel, bessere Möglichkeiten zum Vergleich von Regressionsmodellen angegeben.

Das Kapitel 3 erläutert, wie man überprüfen kann, ob ein Teil des Regressionsmodells keinen Einfluss auf die Daten hat. Dazu wird zuerst die Methode des F-Test angegeben und dann mithilfe der Methoden aus dem Kapitel 1 bessere Möglichkeiten einen Teil des Konfidenzbandes zu überprüfen, angegeben.

Das Kapitel 4 beschäftigt sich mit der Fragestellung, wie Regression und Konfidenzbänder bei abhängigen Daten durchzuführen ist. Konkret wird der Fall betrachtet, dass dem Regressionsmodell ein AR(1)-Prozess zugrunde liegt.

Das letzte Kapitel stellt die Daten der Stammzellen, die diese Ausarbeitung motivierten, vor. Außerdem werden die Resultate, die man erhält, wenn man die Methoden aus den ersten drei Kapiteln auf die Stammzelldaten anwendet, vorgestellt.

Am Ende jedes Abschnittes in den ersten Kapitel folgt auf die dort behandelte Theorie oder Methode ein Beispiel. Dieses Beispiel zieht sich durch die gesamten ersten Kapitel und wird jeweils ergänzt oder modifiziert.

Das beiliegenden R-Paket ist in der beiliegenden README Datei beschrieben.

Genauere Beschreibungen zum Code sind in der Arbeit an der Stelle zu finden, an dem der Code verwendet beziehungsweise eingeführt wird. Ansonsten ist der Code durch kommentiert und dürfte gut zu lesen sein.

Bei den Simulationen erhält man folgende Ergebnisse:

\times	R	AR bekannt	AR
R	0.98	...	0.84
Minmax	0.92	...	0.8
Poly	0.87	...	0.94
R prüfen	0.84
Poly prüfen	0.9

In den Spalten stehen die verschiedenen zugrunde liegenden Modelle. Dabei steht R für ein multilineares, homoskedastisches Modell und AR für ein Modell dem ein AR(1)-Prozess zugrunde liegt.

In den Zeilen stehen die verschiedenen Methoden. Von oben nach unten sind dies Konfidenzbänder auf ganz \mathbb{R}^n , Konfidenzbänder auf einem Rechteck A , Konfidenzbänder auf einem Rechteck A , wenn das Modell Polynomgestalt hat. In den letzten beiden Zeilen sind die Überdeckungswahrscheinlichkeiten für den Fall, dass man überprüft, ob ein Teil des Regressionsmodells Null ist angegeben. Dabei steht R wieder für die Methode ein Konfidenzband auf ganz \mathbb{R}^n zu benutzen und Poly dafür ein Konfidenzband auf A für den Fall, dass das Modell Polynomgestalt hat.

1 Regression und Konfidenzbänder

Ziel des ersten Kapitels ist es, gleichmäßige Konfidenzbänder für Regressionsmodelle auf einem Intervall zu konstruieren, wobei die Regressionsmodelle Polynomgestalt haben.

Ein Konfidenzband auf einer Menge A zu bestimmen, meint, dass die unabhängige Variable x aus dieser Menge kommt.

Im ersten Abschnitt dieses Kapitels wird das grundlegende Konzept der Regression eingeführt. Im darauf aufbauenden Abschnitt über Konfidenzbänder werden Konfidenzbänder definiert.

In den folgenden drei Abschnitten werden konkrete Methoden zum Bestimmen von Konfidenzbändern angegeben. Die einfachste Möglichkeit ist Konfidenzbänder auf \mathbb{R}^p zu konstruieren. Deswegen betrachten wir diese Möglichkeit zuerst.

Danach verallgemeinern wir diese Methode auf Konfidenzbänder auf einem Teilabschnitt $A = \{(x_1, \dots, x_p)' : a_i \leq x_i \leq b_i, i = 1, \dots, p\} \subset \mathbb{R}^p$ für $-\infty \leq a_i < b_i \leq \infty, i = 1, \dots, p$. Dabei bezeichnet x' die Transponierte von x während die Ableitung von x mit $\frac{d}{dx}x$ bezeichnet wird.

Man beachte, dass in der Definition von A bereits implizit davon ausgegangen wird, dass $x_0 = 1$. Deswegen stellt man an x_0 keine weiteren Anforderungen.

Zuerst betrachten wir den einfacheren Fall, dass es nur eine unabhängige Variable gibt.

Danach betrachten wir den allgemeinen Fall von p unabhängigen Variablen mit $p \in \mathbb{N}$

Im letzten Abschnitt betrachten wir, wie man Konfidenzbänder auf $A \subset \mathbb{R}^n$ konstruiert, wenn das Modell Polynomgestalt hat.

Das erste Kapitel orientiert sich stark an dem Buch von [Liu64]. Außerdem werden in Abschnitt 1.1 das Buch [Geo09] und das Skript [Kri15] verwendet.

1.1 Regression

Bei einer Regression geht es darum, den Zusammenhang zwischen einer Zufallsvariablen $Y \in \mathbb{R}^n$ und einer Zufallsmatrix $X \in \mathbb{R}^{n \times (p+1)}$ mit $n, p \in \mathbb{N}$ zu beschreiben. Dazu versucht man eine Funktion f zu finden, sodass

$$\|f(X) - Y\|$$

minimiert wird. Dabei ist $\|\cdot\|$ eine beliebige, aber feste Abstandsfunktion. Außerdem geht man von dem Modell

$$Y = f(X) + e$$

aus. Dabei ist $e \in \mathbb{R}^n$ ein nicht beobachtbarer zufälliger Fehler. Wie man an der Gleichung erkennt, liegt die Annahme zugrunde, dass die Messung der Y -Werte fehlerbehaftet ist. Dagegen ist die Messung der $f(X)$ -Werte fehlerfrei.

In dieser Ausarbeitung wird immer ein festes Design verwendet. Beim festen Design sind die Einträge in der Matrix X fest gewählte Zahlen.

Da dann Y mittels f von X abhängt, nennt man Y die abhängige Variable und X die unabhängige Variable.

Andere übliche Bezeichnungen sind Zielvariable für Y und Kovariable oder Einflussgröße für X .

Weiterhin wird in dieser Ausarbeitung immer ein multiples, lineares Regression benutzt. Das heißt, es liegt die Annahme zugrunde, dass $f(X) = X\beta$ ist. Dabei sind die $\beta = \beta_0, \dots, \beta_p$ unbekannte Konstanten.

Ein besonderes Modell, dass im Abschnitt 1.6 und dem letzten Kapitel über Datenbeschreibung und Resultate wichtig wird, ist das Polynom-Modell. Bei diesem Modell ist die l -te Zeile von X gegeben durch $\tilde{x}_l = (1, x_l^1, x_l^2, \dots, x_l^3)$.

Damit wird das Regressionsmodell zu

$$Y = X\beta + e \quad (1)$$

Zusätzlich ist in dieser Ausarbeitung für dieses Kapitel und die Kapitel über den Vergleich und das Prüfen von Regressionsmodellen das Modell homoskedastisch. Das heißt e folgt einer n -dimensionalen Normalverteilung mit Erwartungswert Null und unbekannter Varianz $\sigma^2 \cdot I_n$. Dabei ist I_n die n -dimensionale Einheitsmatrix.

In dieser Ausarbeitung werden Matrizen immer mit großen lateinischen Buchstaben bezeichnen, wenn ihre Werte bekannt sind und mit großen griechischen Buchstaben, wenn ihre Werte unbekannt sind. Diese Notation für bekannte und unbekannte Werte gilt auch für Skalare.

Außerdem bezeichnet $E(W)$ den Erwartungswert von W .

In Kapitel 4 wird geklärt, was passiert, wenn $e \sim \mathcal{N}_n(0, \sigma^2 \Upsilon)$. Dabei ist Υ eine Matrix mit unbekannten Werten, die die Abhängigkeitsstruktur der Y -Werte modelliert. Man nennt eine Matrix wie Υ auch Kovarianzmatrix.

Die Parameter β und σ^2 charakterisieren das Modell und werden aus den beobachteten Daten geschätzt. Ihre Schätzer werden mit $\hat{\beta}$ und $\hat{\sigma}^2$.

Der folgende Satz gibt eine Möglichkeit Schätzer $\hat{\beta}$ und \hat{e} beziehungsweise $\hat{\sigma}^2$ konkret zu berechnen.

Satz 1.1.1. In einem homoskedastischem, multiple linearen Regressionsmodell sind der ordinary least squares Schätzer (OLS) und der maximum likelihood Schätzer (MLE) für $\hat{\beta}$, \hat{e} und $\hat{\sigma}^2$ identisch und wie im Folgenden gegeben:

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y \quad (2)$$

Dabei ist X^{-1} die inverse Matrix zu X .

$$\hat{e} = (Y - X\hat{\beta}) = (I - H)Y \quad (3)$$

mit $H = X(X'X)^{-1}X'$

$$\hat{\sigma}^2 = \|\hat{e}\|^2 / (n - p - 1) = \|Y - X\hat{\beta}\|^2 / (n - p - 1) \quad (4)$$

Beweis. Das least squares criterion besagt, dass

$$L(\beta) = \|Y - X\beta\|^2 = (Y - X\beta)'(Y - X\beta)$$

zu minimieren ist. Da $Y'X\beta$ eine skalare Größe ist, stimmt sie mit ihrer Transponierten $\beta'X'Y$ überein. Benutzt man dies erhält man aus der obigen Gleichung

$$L(\beta) = Y'Y - 2\beta'X'Y + \beta'X'X\beta$$

Also muss der OLS folgende Gleichung erfüllen

$$\frac{d}{d\beta}L(\beta)|_{\beta=\hat{\beta}} = -2X'Y + 2X'X\hat{\beta} = 0 \quad (5)$$

Also muss gelten

$$X'X\hat{\beta} = X'Y \quad (6)$$

Da X vollen Zeilenrang hat, ist $X'X$ invertierbar und man findet

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$$

für die anderen beiden Schätzer siehe [Liu64, S. 4].

Für die Aussage, dass OLS und ML-Schätzer übereinstimmen siehe [Mun13, S. 74] oder [Liu64, S. 3] \square

Beispiel 1.1.2. In diesem einfachen Beispiel werden die Daten Y auf die Zeit regressieren. Dabei wird als Modell ein Polynom vom Grad Eins benutzt. Das heißt, es wird von dem homoskedastischen Modell

$$Y = X \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{bmatrix} + e$$

ausgegangen.

Bei diesem Beispiel sind die Y -Werte zufällige Zahlen, die am Anfang der Datei *beispiele.R* erzeuge. Die Motivation für diese Daten ist einen Wachstumsprozess zu beschreiben.

Um die Daten zu erzeugen, setze wird zuerst die seed auf 100 gesetzt. Danach wird auf dem Intervall $[0,1]$ ein äquidistantes Gitter G mit 50 Punkten erzeugt. Aus diesen wird die Designmatrix auf Grundlage eines polynomiellen Regressionsmodells vom Grad Drei erzeugt. Das heißt, die l -te Zeile von X ist gegeben durch $\tilde{x}_l = (1, x_l, x_l^2, x_l^3)$ für $\tilde{x}_l \in G, l \in \{1, \dots, 50\}$.

Als nächstes wird $\beta = (10, 5, -4, 7)$ gewählt. Weiterhin wird eine Kovarianzmatrix der Form

$$\Upsilon = \begin{bmatrix} 1 & \phi & \phi^2 & \dots & \phi^{n-2} & \phi^{n-1} \\ \phi & 1 & \phi & \dots & \phi^{n-3} & \phi^{n-2} \\ \phi^2 & \phi & 1 & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \phi & \phi^2 \\ \phi^{n-2} & \phi^{n-3} & \dots & \phi & 1 & \phi \\ \phi^{n-1} & \phi^{n-2} & \dots & \phi^2 & \phi & 1 \end{bmatrix}$$

mit $\phi = 0.75$ erzeugt. Mit dieser Kovarianzmatrix wird $e \sim \mathcal{N}_n(0, \Upsilon)$ generiert und Y nach dem Modell (1) berechnet.

In folgender Graphik 1 sind die Datentupel (Y, G) eingezeichnet:

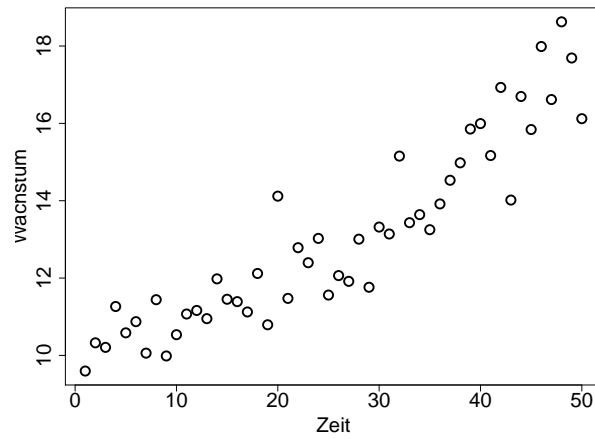


Abbildung 1: Plot der Beispieldaten

In den folgenden Kapiteln wird mit einem normierten Y gearbeitet, indem durch $\max(Y)$ geteilt wird. Dadurch erhält man Werte zwischen Null und Eins, wodurch sich die Berechnungen vereinfachen.

Man kann dies machen, da von

$$Y = X\beta + e$$

ausgehend, man zu

$$\max(Y)^{-1}Y = X \max(Y)^{-1}\beta + \max(Y)^{-1}e =: X\tilde{\beta} + \tilde{e}$$

gelangt und dieses Modell immer noch multiple linear und homoskedastisch ist.

Man kann ohne Einschränkung der Allgemeinheit davon ausgehen, dass die Elemente von X Werte in $[0, 1]$ annehmen. Sind die Werte nicht in $[0, 1]$ kann man mit $\max(X)$ normieren. Insgesamt erhält man aus $\tilde{\beta}$ wieder β indem man mit $\max(Y)$ multipliziert.

Benutzt man die Formeln (2) und (4) von oben erhält man $\hat{\beta} = (0.5237613 ; 0.4141713)$ und $\hat{\sigma}^2 = 0.04087086$. In folgender Graphik 2 sind die Daten mit der Regressionsgerade eingezeichnet.

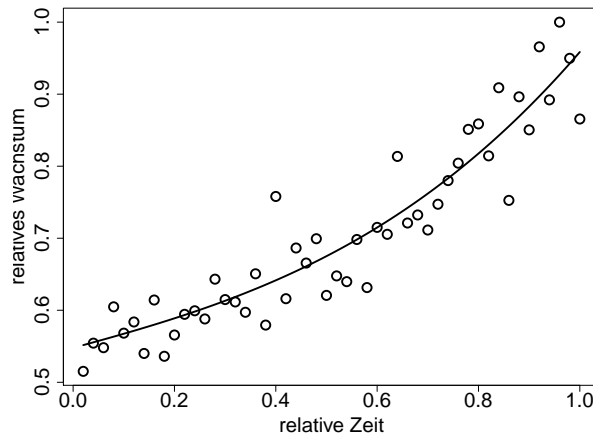


Abbildung 2: Plot der Beispieldaten mit Regressionsgerade

1.2 Konfidenzbänder

In diesem Abschnitt werden Konfidenzbänder definiert und der Unterschied zwischen punktuellen und gleichmäßigen Konfidenzbändern wird erklärt. Die folgende Definition orientiert sich an [Geo09, S. 229].

Definition 1.2.1. Sei $(\chi, \mathcal{F}, \mathbb{P}_\vartheta : \vartheta \in \Theta)$ ein stochastisches Modell, Σ eine beliebige Menge, $\tau : \Theta \rightarrow \Sigma$ eine zu ermittelnde Kenngröße für den Parameter, und $0 < \alpha < 1$. Dabei bezeichnet $\mathbb{P}(\dots)$ ein Wahrscheinlichkeitsmaß.

Eine Abbildung $C : \chi \rightarrow \mathcal{P}(\Sigma)$, die jedem möglichen Beobachtungsergebnis $x \in \chi$ eine Menge $C(x) \subset \Sigma$ zuordnet, heißt ein Konfidenz- oder Vertrauensbereich für τ zum Irrtumsniveau α (beziehungsweise Sicherheitsniveau $1 - \alpha$), wenn

$$\inf_{\vartheta \in \Theta} \mathbb{P}_\vartheta(x \in \chi : C(x) \ni \tau(\vartheta)) \geq 1 - \alpha.$$

In dieser Ausarbeitung wird immer davon ausgegangen, dass $C(x)$ von der Form $C(x) = \{y \in \mathbb{R}^n : x'\hat{\beta} - c \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \leq y \leq x'\hat{\beta} + c \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}\}$ ist. Dabei ist c der sogenannte c.

Für den Rest der Ausarbeitung wird dies durch

$$\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}) = 1 - \alpha$$

abgekürzt. Eine andere mögliche Schreibweise ist

$$\mathbb{P}(x'\beta \in M_n(x; Y, \alpha)) = 1 - \alpha$$

mit

$$M_n(x) = (x'\hat{\beta} - c, x'\hat{\beta} + c)$$

und c passend.

Weiterhin unterscheidet man punktweise und gleichmäßige Konfidenzbänder. Für punktweise Konfidenzbänder gilt für alle $x = (x_1, \dots, x_p) \in \mathbb{R}^{p+1}$

$$\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c) = 1 - \alpha$$

während für gleichmäßige

$$\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^{p+1}) = 1 - \alpha$$

gilt. Dabei ist $\beta = (\beta_0, \dots, \beta_p)$ der Koeffizientenvektor, der das Modell festlegt, $\hat{\beta}$ ein Schätzer für β .

In dieser Ausarbeitung werden nur gleichmäßige Konfidenzbänder betrachtet.

1.3 Konfidenzbänder auf \mathbb{R}^n für ein multiples lineares Regressionsmodell

Seien $x, \beta, \hat{\beta} \in \mathbb{R}^{p+1}$, $X \in \mathbb{R}^{n \times (p+1)}$. In dem verbleibenden Teil dieses Kapitels werden Konfidenzbänder der Form

$$x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}$$

bestimmt. Dabei wird der kritische Parameter c so gewählt, dass

$$\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \text{ für alle } x \in A) = 1 - \alpha$$

gilt. Dabei ist A ein Bereich, dem aus bestimmten Gründen besonders interessiert gilt. Mehr zur Wahl von A steht im nächsten Abschnitt. In diesem Abschnitt ist $A = \mathbb{R}^n$.

Wegen des folgenden Resultates aus [Liu64, S. 66] benutzen wir diese Form von Konfidenzbändern.

Satz 1.3.1. Für beliebiges $\beta \in \mathbb{R}^{p+1}$ und $\sigma > 0$ gilt

$$\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm \sqrt{(p+1)f_{p+1,n-p-1}^\alpha} \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^p) = 1 - \alpha$$

Dabei ist $f_{p+1,n-p-1}^\alpha$ das α -Quantil der F-Verteilung mit Parametern $p+1$ und $n-p-1$. Dieser Satz eröffnet uns eine einfache Möglichkeit, Konfidenzbänder auf \mathbb{R}^n zu bestimmen. Da das Konfidenzband in Satz 1.3.1 von hyperbolischer Form ist, betrachten wir in den folgenden Abschnitten immer hyperbolische Konfidenzbänder.

Um den Satz 1.3.1 beweisen zu können, brauchen wir die folgenden Resultate:

Lemma 1.3.2. Es ist

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \text{ für alle } x \in A) \\
&= \mathbb{P}\left(\sup_{a < x < b} \left| \frac{x'(\beta - \hat{\beta})}{\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}} \right| \leq c\right) \\
&= \mathbb{P}(S \leq c)
\end{aligned}$$

mit

$$\sup_{a < x < b} \frac{|x'(\beta - \hat{\beta})|}{\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}} =: S$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \text{ für alle } x \in A) \\
&= \mathbb{P}(x'\hat{\beta} - c\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \leq x'\beta \leq x'\hat{\beta} + c\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \text{ für alle } x \in A) \\
&= \mathbb{P}(-c\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \leq x'(\beta - \hat{\beta}) \leq c\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \text{ für alle } x \in A) \\
&= \mathbb{P}\left(-c \leq \frac{x'(\beta - \hat{\beta})}{\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}} \leq c \text{ für alle } x \in A\right) \\
&= \mathbb{P}\left(\sup_{a < x < b} \frac{|x'(\beta - \hat{\beta})|}{\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}} \leq c\right)
\end{aligned}$$

□

Es geht in den folgenden Abschnitten immer darum, die Verteilung von S zu bestimmen. Um diese Verteilung auf ganz \mathbb{R}^n zu bestimmen, wird das folgende Ergebnis benutzt, welches sich an [Liu64, S. 6] orientiert.

Satz 1.3.3. Wenn das Modell (1) homoskedastisch ist, gilt nach Satz 1.1.1

1. $\hat{\beta} \sim \mathcal{N}_{p+1}(\beta, \sigma^2(X'X)^{-1})$. Dabei ist $\mathcal{N}_{p+1}(\beta, \sigma^2(X'X)^{-1})$ die $(p+1)$ -dimensionale Normalverteilung mit Erwartungswert β und Kovarianzmatrix $\sigma^2(X'X)^{-1}$.
2. $\hat{e} \sim \mathcal{N}_n(0, \sigma^2(I - H))$ mit $H = X(X'X)^{-1}X'$
3. $\hat{\sigma}^2 \sim \frac{\sigma^2}{n-p-1} \chi_{n-p-1}^2 = \frac{\sigma^2}{v} \chi_{n-p-1}^2$. Dabei ist $n - p - 1 := v$, was auch in Zukunft so beibehalten wird. Weiterhin ist χ_v^2 die Chi-Quadrat-Verteilung.
4. $\hat{\beta}$ und $\hat{\sigma}^2$ sind unabhängig.

Beweis. 1. Benutzt man Modell (1) und die Voraussetzung $e \sim \mathcal{N}_n(0, \sigma^2)$ so ist $Y = X\beta + e \sim \mathcal{N}_n(X\beta, \sigma^2 I)$. Da aus (2) folgt, dass $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$ gilt, ist $\hat{\beta}$ eine Linearkombination von Y . Daraus folgt, dass auch $\hat{\beta}$ normalverteilt ist. Es reicht den Erwartungswert und die Kovarianz zu bestimmen.

$$E(\hat{\beta}) = E((X'X)^{-1}X'Y) = (X'X)^{-1}X'E(Y) = (X'X)^{-1}X'X\beta = \beta$$

und

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\hat{\beta}) &= \text{Cov}((X'X)^{-1}X'Y) = ((X'X)^{-1}X')\text{Cov}(Y)(X(X'X)^{-1}) \\ &= ((X'X)^{-1}X')\sigma^2 I(X(X'X)^{-1}) = \sigma^2(X'X)^{-1} \end{aligned}$$

2. Da nach (3) gilt, dass $\hat{e} = (I - H)Y$, ist \hat{e} auch eine Linearkombination von Elementen aus Y . Da Y normalverteilt ist, ist es also auch \hat{e} . Berechnet man wieder Erwartungswert und Kovarianz, erhält man:

$$\begin{aligned} E(\hat{e}) &= E((I - H)Y) = (I - H)E(Y) = (I - H)X\beta \\ &= (I - X(X'X)^{-1}X')X = X - X(X'X)^{-1}X'X = X - X = 0 \end{aligned}$$

und

$$\text{Cov}(\hat{e}) = \text{Cov}((I - H)Y) = (I - H)\text{Cov}(Y)(I - H) = \sigma^2(I - H)$$

Bei dieser Berechnung wird benutzt, dass die Matrix $I - H$ sowohl symmetrisch als auch idempotent ist.

Die Matrix $I - H$ ist symmetrisch, da $H = X'(X'X)^{-1}X$ symmetrisch ist. Weiterhin ist die Matrix idempotent, da

$$\begin{aligned} (I - H)^2 &= (I - X(X'X)^{-1}X')(I - X(X'X)^{-1}X') \\ &= I + X(X'X)^{-1}X'X(X'X)^{-1}X' - 2X(X'X)^{-1}X' \\ &= I - X(X'X)^{-1}X' - X(X'X)^{-1}X' + X(X'X)^{-1}X' \\ &= (I - H) \end{aligned}$$

3. Sei $Q = I - H$ mit $H = X(X'X)^{-1}X'$, dann ist Q symmetrisch und idempotent. Daraus folgt

$$\begin{aligned} \text{Rang}(Q) &= \text{Spur}(Q) = \text{Spur}(I) - \text{Spur}(H) \\ &= n - \text{Spur}(X(X'X)^{-1}X') = n - \text{Spur}((X'X)^{-1}X'X) \\ &= n - (p + 1) \end{aligned}$$

Dabei benutzt man $\text{Spur}(AB) = \text{Spur}(BA)$.

Also kann man Q ausdrücken als $Q = T'LT$. Dabei ist T eine orthogonale Matrix und L eine passende Diagonalmatrix mit den ersten $n - (p + 1)$ Diagonalelementen Eins und den verbleibenden Diagonalelementen gleich Null.

Es ist $e = Y - X\beta \sim \mathcal{N}_n(0, \sigma^2 I)$. Sei $z = Te$ mit $z \sim \mathcal{N}_n(0, \sigma^2 I)$. Solch ein T existiert, da T orthogonal ist.

Weiterhin ist

$$Qe = (I - H)(Y - X\beta) = (I - H)Y - (I - H)X\beta = (I - H)Y = \hat{e}$$

da $(I - H)X = 0$, wie oben bereits berechnet. Es folgt

$$\begin{aligned} \|\hat{e}\|^2 &= \|Qe\|^2 = e'Q'Qe = e'Qe = (Te)'L(Te) \\ &= z_1^2 + \dots + z_{n-p-1}^2 \sim \sigma^2 \chi_{n-p-1}^2 \end{aligned}$$

Setzt man dies nun in Gleichung (4), das heißt $\hat{\sigma}^2 = \|\hat{e}\|^2/(n - p - 1)$, ein, erhält man

$$\hat{\sigma}^2 = \|\hat{e}\|^2/(n - p - 1) \sim \frac{\sigma^2}{n - p - 1} \chi_{n-p-1}^2$$

4. Da $\hat{\beta}$ und \hat{e} normalverteilt sind, reicht es für die Behauptung der Unabhängigkeit zu zeigen, dass die Kovarianz zwischen den Beiden Null ist.

$$\begin{aligned} \text{Cov}(\hat{\beta}, \hat{e}) &= \text{Cov}((X'X)^{-1}X'Y, (I - H)Y) \\ &= (X'X)^{-1}X'\text{Cov}(Y, Y)(I - H) \\ &= \sigma^2(X'X)^{-1}X'(I - H) = 0 \end{aligned}$$

□

Da wir nun von allen Bausteinen von S die Verteilung kennen, können wir den Satz 1.3.1 beweisen. Satz und Beweis orientiert sich an [Liu64, S. 66].

Beweis. Zu zeigen war, dass für beliebiges $\beta \in \mathbb{R}$ und $\sigma > 0$ im homoskedastischen Fall

$$\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm \sqrt{(p+1)f_{p+1, n-p-1}^\alpha} \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}) \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^n = 1 - \alpha$$

gilt.

Sei P die eindeutige Wurzel aus $(X'X)^{-1}$ und somit $(X'X)^{-1} = P^2$. Weiterhin definiere $N = P^{-1}(\hat{\beta} - \beta)/\sigma$. Dann hat N eine multivariate Normalverteilung $\mathcal{N}_{p+1}(0, I)$.

Damit gilt

$$\begin{aligned}
& \mathbb{P}(x'\beta \in \sqrt{(p+1)f_{p+1,n-p-1}^\alpha} \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \text{ für alle } x \in \mathbb{R}) \\
= & \mathbb{P}\left(\sup_{x \in \mathbb{R}} \frac{|x'(\hat{\beta} - \beta)|}{\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}} \leq \sqrt{(p+1)f_{p+1,n-p-1}^\alpha}\right) \\
= & \mathbb{P}\left(\sup_{x \in \mathbb{R}} \frac{|(Px)'N|}{(\hat{\sigma}/\sigma) \sqrt{(Px)'(Px)}} \leq \sqrt{(p+1)f_{p+1,n-p-1}^\alpha}\right) \\
= & \mathbb{P}\left(\frac{\|N\|}{(\hat{\sigma}/\sigma)} \left(\sup_{x \in \mathbb{R}} \frac{|(Px)'N|}{\|Px\| \|N\|}\right) \leq \sqrt{(p+1)f_{p+1,n-p-1}^\alpha}\right) \\
= & \mathbb{P}\left(\frac{\|N\|}{(\hat{\sigma}/\sigma)} \leq \sqrt{(p+1)f_{p+1,n-p-1}^\alpha}\right) \\
= & \mathbb{P}\left(\frac{(\hat{\beta} - \beta)'(X'X)(\hat{\beta} - \beta)}{(p+1)\hat{\sigma}^2} \leq f_{p+1,n-p-1}^\alpha\right) \\
= & 1 - \alpha
\end{aligned}$$

Dabei wird im vorletzten Schritt die Cauchy-Schwarz-Ungleichung $|(Px)'N| \leq \|Px\| \|N\|$ verwendet. Gleichheit gilt, falls $Px = \lambda N$ für ein N .

Im letzten Schritt wird aus Satz 1.3.3 benutzt, dass sowohl $(\hat{\beta} - \beta)'(X'X)(\hat{\beta} - \beta)$ als auch $(p+1)\hat{\sigma}^2$ χ^2 -verteilt sind. Außerdem sind beide unabhängig und somit ist ihr Quotient F-verteilt.

□

Beispiel 1.3.4. In der folgenden Abbildung 3 sind die Daten aus dem letzten Beispiel wieder mit einer polynomiellen Regression vom Grad Eins eingezeichnet.

Diesmal wird dazu noch ein Konfidenzband auf ganz \mathbb{R} eingezeichnet. Die Berechnung ist in der Datei *beispiele.R* im Ordner *5-Beispiele* zu finden. Als kritischen Parameter für das Konfidenzband hat sich 2.526154. ergeben.

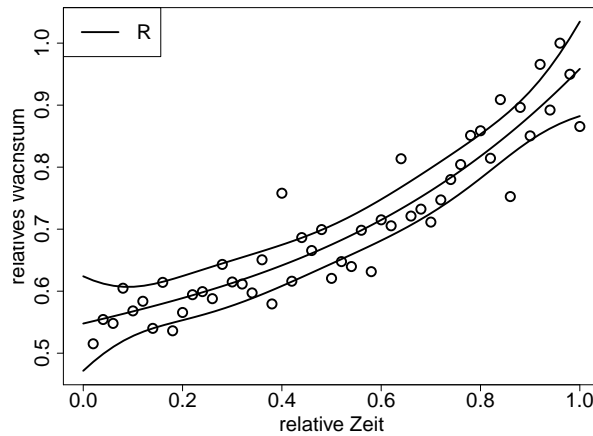


Abbildung 3: Weiterführung des Beispiels durch Konfidenzband auf ganz \mathbb{R}

Simulation 1.3.5. Als nächstes wird eine Simulation durchgeführt, um die Überdeckungswahrscheinlichkeit der Methoden zu überprüfen.

Dazu werden Daten auf zwei verschiedene Arten erzeugt. Zum einen wird als Grundmodell ein multiples lineares, homoskedastisches Regressionsmodell zugrunde gelegt, zum anderen wird ein multiples lineares Regressionsmodell mit einem AR(1)-Prozess zugrunde gelegt. Bei der Simulation wird zuerst 100mal Daten mit den oben genannten Grundmodellen erzeugt. Danach werden Konfidenzbänder um ein OLS beziehungsweise mit einem AR(1) transformierten OLS-Schätzer berechnet. Dann wird gezählt, wie oft das wahre Modell in dem Konfidenzband liegt.

Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle zusammengestellt. Die erste Spalte gibt die Überdeckungswahrscheinlichkeit bei dem homoskedastischen Modell an, die zweite bei einem AR(1)-Grundmodell.

Diese Tabelle wird um weitere Zeilen mit den anderen Methoden Konfidenzbänder zu erzeugen erweitert, nachdem die neuen Methoden eingeführt sind.

\times	R	AR
R	0.98	0.84

1.4 Konfidenzbänder auf einem Intervall für ein einfaches lineares Regressionsmodell

Dieser Abschnitt orientiert sich an [Liu64, S. 17-23] und [LLP08] und [WB71].

Für den Fall, dass wir nur einen unabhängige Variable x_1 haben vereinfacht sich das Konfidenzband 1.3 zu

$$\mathbb{P}(\beta_0 + \beta_1 x_1 \in \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x \pm c\hat{\sigma}\sqrt{\nu(1, x_1)} \text{ für alle } x \in (a, b)) \quad (7)$$

Dabei und für diesen Abschnitt gelten die folgenden Definitionen

$$\begin{aligned}
P^2 &= (X'X)^{-1} \\
N &= P^{-1}(\hat{\beta} - \beta)/\sigma \sim \mathcal{N}_2(0, I_2) \\
T &= N/(\hat{\sigma}/\sigma) = P^{-1}(\hat{\beta} - \beta)/\hat{\sigma} \\
v &= n - 2 \\
x_1 &= x \\
\nu(c, d) &= (c, d)(X'X)^{-1}(c, d)' \\
A &= (a, b)
\end{aligned}$$

Aus [Liu64, S. 19-20] hat man folgende Ergebnisse

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}(\beta_0 + \beta_1 x \in \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x \pm c\hat{\sigma}\sqrt{\nu(1, x)} \text{ für alle } x \in (a, b)) \\
&= \mathbb{P}(\sup_{x \in (a, b)} |(1, x)(\hat{\beta} - \beta)/\hat{\sigma}|/\sqrt{\nu(1, x)} < c) \\
&= \mathbb{P}(\sup_{x \in (a, b)} |(P \cdot (1, x)')' \cdot T|/\|P \cdot (1, x)'\| < c) \\
&= \mathbb{P}(T \in R_{h,2})
\end{aligned}$$

dabei ist

$$R_{h,2}(x) = (T : |(P \cdot (1, x)')' \cdot T|/\|P \cdot (1, x)'\| < c)$$

ein Region von der Form $(T : |v'T|/\|v\| < r) \subset \mathbb{R}^2$. Deswegen kann man den Winkel ϕ zwischen den Vektoren $P \cdot (1, a)'$ und $P \cdot (1, b)'$ mittels

$$\begin{aligned}
\cos \phi &= (P \cdot (1, a)')'(P \cdot (1, b)')/\|P \cdot (1, a)'\|\|P \cdot (1, b)'\| \\
&= (1, a)(X'X)^{-1}(1, b)'/\sqrt{\nu(1, a)\nu(1, b)}
\end{aligned}$$

berechnen. Jetzt folgt mit [WB71], dass gilt

$$\begin{aligned}
&\mathbb{P}(\beta_0 + \beta_1 x \in \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x \pm c\hat{\sigma}\sqrt{\nu(1, x)} \text{ für alle } x \in (a, b)) \\
&= 1 - \frac{\phi}{\pi} \left(1 + \frac{c^2}{v}\right)^{-v/2} - \frac{2}{\pi} \int_0^{(\pi-\phi)/2} \left(1 + \frac{c^2}{v \sin^2(\theta + \phi/2)}\right)^{-v/2} d\theta
\end{aligned}$$

Man muss also

$$1 - \frac{\phi}{\pi} \left(1 + \frac{c^2}{v}\right)^{-v/2} - \frac{2}{\pi} \int_0^{(\pi-\phi)/2} \left(1 + \frac{c^2}{v \sin^2(\theta + \phi/2)}\right)^{-v/2} d\theta = 1 - \alpha$$

nach c lösen und kann dann das Konfidenzband (7) berechnen. Diese Berechnung wird hier nicht durchgeführt.

1.5 Konfidenzbänder auf einem Intervall für ein multiples lineares Regressionsmodell

Im Abschnitt 1.3 wurden Konfidenzbänder auf ganz \mathbb{R}^p konstruiert. Allerdings kann es bei der Verwendung einiger unabhängigen Variablen nicht sinnvoll sein, das Konfidenzband auf ganz \mathbb{R}^p zu konstruieren. Ist die unabhängige Variable zum Beispiel ein Gewicht, reicht es, ein Konfidenzband auf \mathbb{R}_+^p zu konstruieren. Schließlich sind Gewichte immer positiv. Nachfolgend wird das uns interessierende Gebiet mit A bezeichnet. Dabei ist

$$A = \{(x_1, \dots, x_p)' : a_i \leq x_i \leq b_i, i = 1, \dots, p\} \subset \mathbb{R}^p \text{ für } -\infty \leq a_i < b_i \leq \infty, i = 1, \dots, p$$

Eine Möglichkeit, ein Konfidenzband auf A zu bestimmen, ist, ein Konfidenzband auf ganz \mathbb{R}^p zu konstruieren und dann den Teil auf $\mathbb{R}^p \setminus A$ zu vernachlässigen.

Da dann die Bedingung $\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c \text{ für alle } x) = 1 - \alpha$ für mehr x -Werte als nötig erfüllt sein muss, ist das Konfidenzband dann weiter, als es müsste.

Besser ist die folgende Möglichkeit, die sich an [Liu64, S. 70] orientiert. Das Ziel ist wieder ein hyperbolisches Konfidenzband der Form

$$x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \quad (8)$$

erzeugen, um es mit dem Band aus dem vorherigen Absatz vergleichen zu können. Das Problem ist, ein geeignetes c zu finden, sodass $\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \text{ für alle } x \in A) = 1 - \alpha$ gilt.

Es ist aus Satz 1.3.2 aus dem vorherigen Abschnitt bekannt, dass

$$\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c \hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \text{ für alle } x \in A) = \mathbb{P}(S < c)$$

Dabei ist S gegeben durch

$$S = \sup_{a < x < b} \frac{|x'(\beta - \hat{\beta})|}{\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}}$$

Da S nicht von β und σ^2 abhängt, ist es in dieser Hinsicht ein Pivotelement. Dabei ist β wieder der Koeffizientenvektor und σ^2 die Varianz der Fehler.

Allerdings hängt es immer noch in komplizierter Art und Weise von der Designmatrix X und den Grenzen a_i und b_i von A für $i = 1, \dots, p$ ab. Dies macht S allgemein sehr schwer zu berechnen.

Seien P und N definiert wie im Beweis zu Satz 1.3.1. Das heißt,

$$\begin{aligned} P^2 &= (X'X)^{-1} \\ N &= \frac{P^{-1}(\hat{\beta} - \beta)}{\sigma} \end{aligned}$$

Dann hat

$$T = \frac{N}{(\hat{\sigma}/\sigma)} = \frac{P^{-1}(\hat{\beta} - \beta)}{\hat{\sigma}}$$

eine so genannte $\tau_{p+1,v}$ Verteilung. Damit kann man S ausdrücken als

$$\begin{aligned} S &= \sup_{x \in A} \frac{|(Px)'(P^{-1}(\hat{\beta} - \beta))/\hat{\sigma}|}{\sqrt{(Px)'(Px)}} \\ &= \sup_{x \in A} \frac{|(Px)'T|}{\|Px\|} \\ &= \sup_{v \in C(P,A)} \frac{|v'T|}{\|v\|} \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} C(P, A) &= \{\lambda Px : \lambda \geq 0, x \in A\} \\ &= \{\lambda(p_0 + x_1 p_1 + \dots + x_p p_p) : \lambda \geq 0, x_i \in [a_i, b_i] \text{ für alle } i = 1, \dots, p\} \end{aligned}$$

wobei $P = (p_0, \dots, p_p)$.

Allerdings ist es für ein allgemeines $p \leq 1$ sehr schwierig, eine genaue Formel für die Verteilung von S explizit zu bestimmen, um die kritische Konstante c zu bestimmen [Liu64, S.70, Z.18]. Deswegen wird eine Simulation benutzt.

Man beachte, dass $C(P, A)$ der Kegel ist, der von den Vektoren $p_0 + c_1 p_1 + \dots + c_p p_p$ aufgespannt wird, wobei c_i entweder a_i oder b_i für $i = 1, \dots, p$ ist.

Sei $\pi(t; P, A)$ die Projektion von $t \in \mathbb{R}^{p+1}$ auf den Kegel $C(P, A)$, d.h. $\pi(t, P, A)$ löst $\min_{v \in C(P,A)} \|v - t\|$. Jetzt folgt mit [Nai87] Theorem 2.1, dass S die Gleichung

$$S = \max(\|\pi(t, P, A)\|, \|\pi(-t, P, A)\|)$$

löst.

Man kann also die kritische Konstante c mit folgender Simulation finden:

1. Simuliere $N \sim \mathcal{N}_{p+1}(0, I)$ und $\hat{\sigma}/\sigma \sim \sqrt{\chi_v^2/v}$ mit $v = n - p - 1$ und p der Anzahl an unabhängigen Parametern.
2. Berechne $\pi(t, P, A)$ und $\pi(-t, P, A)$.
3. Berechne $S = \max(\|\pi(t, P, A)\|, \|\pi(-t, P, A)\|)$.

Wiederholt man diese Schritte R mal, so erhält man S_1, \dots, S_R . Dann ist c das $1 - \alpha$ Quantil von S_1, \dots, S_R .

Um $\pi(t, P, A)$ und $\pi(-t, P, A)$ zu bestimmen, wird folgendes Verfahren verwendet, das aus [Liu64, Appendix B] stammt:

Es soll das v in \mathbb{R}^{p+1} , das $\|v - t\|^2$ minimiert, gefunden werden. Dabei soll $v \in C(P, A_r)$ sein, mit $C(P, A_r)$ wie oben definiert.

Da betrachten wir

$$\|v - t\|^2 = v'v - 2t'v + t't$$

Man sieht, dass $t't$ unabhängig von v ist. Deshalb muss man es bei der Minimierung von $\|v - t\|^2$ nicht berücksichtigen.

Sei $e_j \in \mathbb{R}^{p+1}$ der j -te Einheitsvektor.

Aus der Definition von $C(P, A_r)$ ist zu sehen, dass $v \in C(P, A_r)$ impliziert, dass $v = \lambda Px$ oder gleichwertig $P^{-1}v = \lambda x = (\lambda, \lambda x_1, \dots, \lambda x_p)'$ für ein $x \in A_r$ und $\lambda \geq 0$ gelten muss. Deshalb ist $e_1'P^{-1}v = \lambda \geq 0$ und $a_j \leq e_{j+1}'P^{-1}v/e_1'P^{-1}v = x_j \leq b_j$ für $j = 1, \dots, p$ oder gleichwertig

$$\begin{aligned} -e_1'P^{-1}v &\leq 0 \\ (e_{j+1}' - b_j e_1')P^{-1}v &\leq 0 \text{ für } j = 1, \dots, p \\ (a_j e_1' - e_{j+1}')P^{-1}v &\leq 0 \text{ für } j = 1, \dots, p \end{aligned}$$

Diese Beschränkungen kann man zusammenfassen zu

$$Av \leq 0$$

wobei A die $(2p+1) \times (p+1)$ Matrix

$$A = \begin{bmatrix} (e_2' - b_1 e_1')P^{-1} \\ (a_1 e_1' - e_2')P^{-1} \\ \vdots \\ (e_{p+1}' - b_p e_1')P^{-1} \\ (a_p e_1' - e_{p+1}')P^{-1} \\ -e_1'P^{-1} \end{bmatrix}$$

ist. Für Minimierungsprobleme dieser Art gibt es ein R-Paket namens *Quadprog*, das zur Lösung dieser Minimierungsaufgabe benutzt wird.

Beispiel 1.5.1. Jetzt wird das Beispiel aus dem Abschnitt 1.3 fortgeführt, indem zu der Regression mit Grad Eins und dem Konfidenzband auf ganz \mathbb{R}^2 noch ein Konfidenzband auf A eingezeichnet wird. Dabei benutzt man $A = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_i \in [0, 1] \text{ für alle } i = 1, 2\}$.

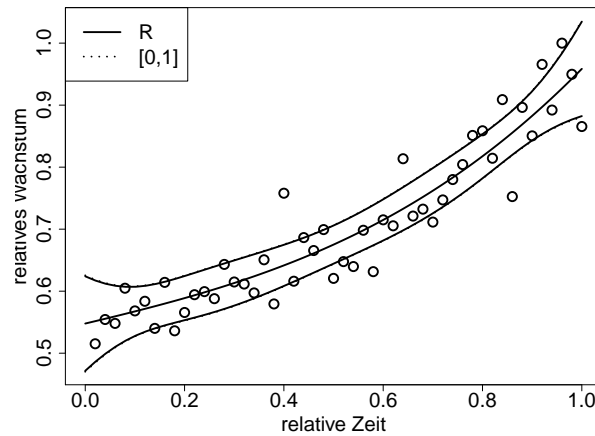


Abbildung 4: Weiterführung des Beispiels durch Konfidenzband auf $[0,1]$

Der kritischen Wert für das Konfidenzband auf ganz \mathbb{R}^2 , der bereits in Abschnitt 1.3 berechnet wurde war 2.526154. Für das Konfidenzband auf A ergibt sich 2.074654. Dieser Wert ist kleiner als der bisherige, was auch zu erwarten war.

Dies sieht man auch daran, dass das Konfidenzband auf A schmaler ist, als das Konfidenzband auf ganz \mathbb{R}^2 . Der Unterschied wirkt allerdings nicht besonders groß.

Da bei der Berechnung des kritischen Wertes für das Konfidenzband auf A eine Simulation verwendet wird und Reproduktivität gewährleistet sein soll, wird an dieser Stelle die Seed 4 gesetzt.

Simulation 1.5.2. Jetzt wird die Simulationstabelle aus dem Abschnitt 1.3 durch Überdeckungswahrscheinlichkeiten für die Konfidenzbänder auf A fortgesetzt.

In diesem Fall ist $A = \{x \in \mathbb{R}^2 : x_i \in [0, 1] \text{ für alle } i = 1, 2\}$. Dies liegt daran, dass wir die Matrix x so wählen, dass die unabhängigen Variablen im Intervall $[0, 1]$ liegen.

\times	R	AR
R	0.98	0.84
Minmax	0.92	0.8

1.6 Konfidenzbänder auf einem Intervall für ein Regressionsmodell mit Polynomgestalt

Betrachten wir nun wieder das Regressionsmodell

$$Y = X\beta + e$$

mit Y einem $1 \times n$ Datenvektor, β ein $1 \times (p+1)$ Koeffizientenvektor und $e \sim \mathcal{N}_n(0, I_n \sigma^2)$ ein $1 \times n$ Zufallsfehlervektor.

Weiterhin lag in den bisherigen Abschnitten die Annahme zugrunde, dass X irgendeine feste, aber beliebige $n \times (p+1)$ Matrix ist. Diese Annahme nennt man festes Design. In diesem Abschnitt betrachten wir den Fall, dass die Spalten von X einen funktionalen Zusammenhang erfüllen. Konkret gehen wir davon aus, dass die i -te Zeile von X von der Form $\tilde{x}_i = (1, x_i, x_i^2, \dots, x_i^p)$ hat.

Unsere Designmatrix ist also zeilenweise von Polynomgestalt.

Dies ist genau der Fall, den wir in dem Beispiel, das am Ende der Abschnitte steht, betrachtet haben.

Das Ziel ist es, wieder Konfidenzbänder der Form

$$x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c\hat{\sigma}\sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \quad \text{für alle } x \in A \quad (9)$$

aus den in Abschnitt 1.3 genannten Gründen zu finden.

Dabei ist die kritische Konstante c wieder so zu bestimmen, dass

$$\mathbb{P}(x'\beta \in x'\hat{\beta} \pm c\hat{\sigma}\sqrt{x'(X'X)^{-1}x} \quad \text{für alle } x \in A) = 1 - \alpha$$

gilt.

Es können allerdings nicht direkt die Ergebnisse aus dem letzten Abschnitt benutzen werden. Dies liegt daran, dass es folgende ungünstige Eigenschaften, die [Liu64, S. 180] entnommen sind, gibt:

1. Angenommen, man versucht die Parameter des Modells $Y = X\beta + e$ zu schätzen, um Konfidenzbänder auf ganz \mathbb{R}^p zu konstruieren.

Dabei sei $e \sim \mathcal{N}_n(0, \sigma^2 I_n)$ mit bekanntem σ^2 . Das heißt, es ist nur β zu Schätzen.

Die beiden Schätzer für β seien $\hat{\beta}_1$ und $\hat{\beta}_2$.

Weiterhin sei $\hat{\beta}_1$ näher an β als $\hat{\beta}_2$. Näher meint in diesem Fall, dass

$$\sup_{x \in \mathbb{R}} \frac{|x'(\hat{\beta}_1 - \hat{\beta})|}{\hat{\sigma}\sqrt{x'(X'X)^{-1}x}} < \sup_{x \in \mathbb{R}} \frac{|x'(\hat{\beta}_2 - \hat{\beta})|}{\hat{\sigma}\sqrt{x'(X'X)^{-1}x}}$$

Zu erwarten ist, dass das erste Modell sinnvoll ist, wenn auch das zweite sinnvoll ist. Immerhin ist das erste Modell näher an dem wahren Modell, als das zweite.

Dies ist allerdings für die bisher betrachteten Konfidenzbänder nicht der Fall, da die bisher betrachteten Verfahren die spezielle polynomiale Struktur nicht berücksichtigen.

2. Die kritische Konstante c kann kleiner als im letzten Abschnitt gewählt werden. Dies liegt daran, dass das Konfidenzband nur auf einer Teilmenge

$$\{\tilde{x} \text{ mit } \tilde{x} = (1, x, \dots, x^p) \text{ für ein } x \in \mathbb{R}\} \subset \mathbb{R}^{p+1}$$

die Wahrscheinlichkeit $1 - \alpha$ haben muss.

Als Lösung wird in diesem Abschnitt eine Methode, die auf Simulation basiert. Das Vorgehen ist also ähnlich zu dem Vorgehen in Abschnitt 1.5. Diese Methode orientiert sich an [Liu64, S. 183,184].

Im Satz 1.3.2, hatten wir das Konfidenzniveau von dem Modell $Y = X\beta + e$, mit Y, X, β, e wie üblich, als $\mathbb{P}(S \leq c)$ bestimmt. Dabei ist

$$\begin{aligned} S &= \sup_{a < x < b} \frac{|\tilde{x}'(\hat{\beta} - \beta)/\hat{\sigma}|}{\sqrt{\tilde{x}'(X'X)^{-1}\tilde{x}}} \\ &= \sup_{a < x < b} \frac{|\tilde{x}'N/(\hat{\sigma}/\sigma)|}{\sqrt{\tilde{x}'(X'X)^{-1}\tilde{x}}} \\ &= \sup_{a < x < b} \frac{|\tilde{x}'T|}{\sqrt{\tilde{x}'(X'X)^{-1}\tilde{x}}} \\ &= K_{2h}(T, (X'X)^{-1}, (a, b)) \end{aligned}$$

Man beachte, dass in diesem Fall $A = [a, b]$ mit $a, b \in \mathbb{R}$ gilt. Dies liegt daran, dass $\tilde{x} = (1, x, x^2, \dots, x^p)$ ist.

In den obigen Umformungen wurden die Definitionen $N = (\hat{\beta} - \beta)/\sigma \sim \mathcal{N}_{p+1}(0, (X'X)^{-1})$, $T = N/(\hat{\sigma}/\sigma) \sim \tau_{p+1,v}(0, (X'X)^{-1})$ und für $K_{2h}(T; (X'X)^{-1}; A)$

$$K_{2h}(T, (X'X)^{-1}, (a, b)) = \sup_{a < x < b} \frac{|\tilde{x}'T|}{\sqrt{\tilde{x}'(X'X)^{-1}\tilde{x}}}$$

benutzt.

Es ist also klar, dass c das $1 - \alpha$ Quantil von $S = K_{2h}(T, (X'X)^{-1}, (a, b))$ ist. Allerdings ist die Verteilung von $K_{2h}(T, (X'X)^{-1}, (a, b))$ nur schwer explizit zu bestimmen.

Um c trotzdem zu ermitteln, kann man r unabhängige Realisationen von S berechnen und von diesen S_1, \dots, S_q das $1 - \alpha$ Quantil benutzen.

Um S für vorgegebenes N und $\hat{\sigma}/\sigma$ zu bestimmen, muss man $K_{2h}(T, (X'X)^{-1}, (a, b))$ mit $T = N/(\hat{\sigma}/\sigma)$ berechnen.

Um $K_{2h}(T, (X'X)^{-1}, (a, b))$ zu berechnen, kann man folgendes Verfahren aus [Liu64, Appendix E] benutzen.

Wie gesagt, ist $K_{2h}(T, (X'X)^{-1}, (a, b))$ definiert durch

$$K_{2h}(t, (X'X)^{-1}, (a, b)) = \sup_{a < x < b} \frac{|\tilde{x}'t|}{\sqrt{\tilde{x}'(X'X)^{-1}\tilde{x}}}$$

wobei t ein gegebener $(p+1)$ -Vektor, $(X'X)^{-1}$ eine nicht-singuläre Matrix, A ein gegebenes Intervall und $\tilde{x} = (1, x, \dots, x^p)'$ ist.

Das Supremum von $K_{2h}(T, (X'X)^{-1}, (a, b))$ kann entweder an a oder an b oder den stationären Punkten der Funktion

$$g_h(x) = \frac{\tilde{x}'t}{\sqrt{\tilde{x}'(X'X)^{-1}\tilde{x}}}$$

angenommen werden, da g_h eine glatte Funktion auf A ist. Leitet man g_h ab, erhält man

$$\frac{dg_h(x)}{dx} = \left(\left(\frac{d\tilde{x}'}{dx} \right) t \left(\tilde{x}'(X'X)^{-1}\tilde{x} \right) - \left(\tilde{x}'t \right) \left(\frac{d\tilde{x}'}{dx} \right) (X'X)^{-1}\tilde{x} \right) \left(\tilde{x}'(X'X)^{-1}\tilde{x} \right)^{-3/2}$$

Also sind die stationären Punkte von $g_h(x)$ gegeben durch die reellen Wurzeln des $(3p-2)$ -gradigen Polynoms

$$h(x) = \left(\frac{d\tilde{x}'}{dx} \right) t \left(\tilde{x}'(X'X)^{-1}\tilde{x} \right) - \left(\tilde{x}'t \right) \left(\frac{d\tilde{x}'}{dx} \right) (X'X)^{-1}\tilde{x}$$

Um diese Wurzeln zu bestimmen, wurde auf das Intervall $[0, 1]$ ein Grid aus 100 Punkten gelegt. Dann wurde der Wert von g_{prime} auf den Punkten dieses Grids bestimmt und gespeichert.

Dabei entspricht g_{prime} der Funktion h , die für die Zwecke der Berechnung die Rolle von $\frac{dg_h(x)}{dx}$ übernimmt.

Anschließend werden aufeinanderfolgende Funktionswerte von h miteinander Multipliziert. Tritt ein Vorzeichenwechsel auf, so ist in dem Intervall zwischen den Funktionswerten mindestens eine Nullstelle. Diese Nullstelle wurde dann mit der R-internen Funktion *uniroot* bestimmt.

Dieses Vorgehen orientiert sich an dem Vorgehen des R-Paketes *rootsolve* und ist notwendig, da die Funktion *uniroot* nur ein Wurzel findet und nicht alle Wurzeln in dem gegebenen Intervall.

Zusammenfassend geht man bei der Bestimmung von c also wie folgt vor:

1. Simuliere $N \sim \mathcal{N}_{p+1}(0, (X'X)^{-1})$ und $\hat{\sigma}/\sigma \sim \sqrt{\chi_v^2/v}$ mit $v = n - p - 1$ und p der Anzahl an unabhängigen Parametern.
2. Berechne $T = N/\hat{\sigma}/\sigma$.
3. Bestimme $K_{2h}(T, (X'X)^{-1}, (a, b))$. Dazu bestimmt man die Maxima von g_h . Um dies zu erreichen bestimmt man die kritischen Stellen der Ableitung von g_h . Dazu reicht es die Nullstellen von h zu bestimmen. Hierzu
 - (a) Berechne die Funktionswerte von h auf dem Gitter von a bis b mit Feinheit 100.
 - (b) Multipliziere je zwei aufeinander folgende Funktionswerte.
 - (c) Liegt ein Vorzeichenwechsel vor befindet sich in dem Intervall eine Nullstelle.
 - (d) Benutze die R-Funktion *uniroot* um die Nullstelle in diesem Intervall zu bestimmen

4. Hat man die Nullstellen von h , bezeichnet mit r_1, \dots, r_n , gefunden, berechnet man den Funktionswert an diesen Stellen.

5. Damit ist $S = \max\{g(a), g(b), g(r_1), \dots, g(r_n)\}$

Als nächstes wiederholt man diese Schritte q mal, um $K = \{S_1, \dots, S_q\}$ zu erhalten. Dann ist c das $1 - \alpha$ -Quantil von K .

Beispiel 1.6.1. Jetzt wird das Beispiel aus dem dritten Abschnitt fortgeführt, indem zu der Regression mit Grad Eins, dem Konfidenzband auf ganz \mathbb{R} und dem auf $[0,1]$ noch ein Konfidenzband auf $[0,1]$ für Polynome in die Graphik 5 einzeichnet wird.

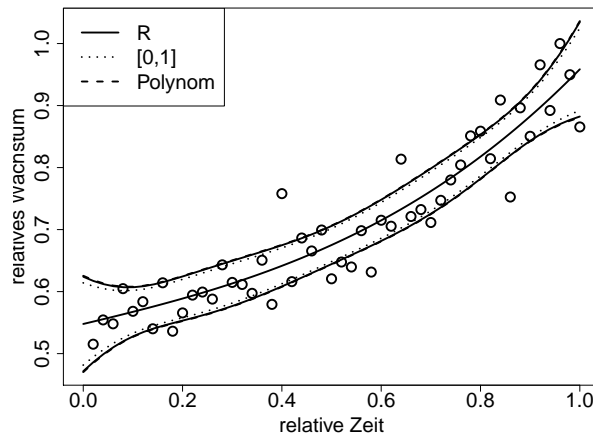


Abbildung 5: Weiterführung des Beispiels durch Konfidenzband auf $[0,1]$ für Polynome

Die kritischen Werte für das Konfidenzband auf ganz \mathbb{R} und für das Konfidenzband auf $[0,1]$ wurde in den vorherigen Abschnitten bereits berechnet. Es ergaben sich die Werte 2.526154 und 2.074654. Berechnet man den kritischen Wert für das Konfidenzband auf $[0,1]$, welches die Polynomgestalt berücksichtigt, erhält man den Wert 2.706617. Dieser Wert ist noch kleiner als der Wert von 2.074654, was auch zu erwarten war.

Als seed wurde weiterhin 4 benutzt.

Simulation 1.6.2. Die Simulationstabelle aus den letzten beiden Abschnitten wird durch Überdeckungswahrscheinlichkeiten für die Konfidenzbänder auf einem Intervall A , in diesem Fall ist wieder $A = \{(x_1, \dots, x_p)' : 0 \leq x_i \leq 1, i = 1, \dots, p\}$ aufgrund der Struktur des Modells, beendet. Außerdem wird davon ausgegangen, dass die Designmatrix Polynomgestalt hat.

\times	R	AR
R	0.98	0.84
Minmax	0.92	0.8
Poly	0.87	0.94

2 Vergleich von zwei Regressionsmodellen

Da das Ziel dieser Arbeit der Vergleich von Regressionsmodellen ist, wird in diesem Kapitel gezeigt, wie man Regressionsmodelle vergleicht.

Es seien also, ähnlich wie in [Liu64, S. 113] und [Liu64, S. 178], zwei Regressionsmodelle

$$Y_i = X_i\beta_i + e_i \quad (10)$$

mit $i = 1, 2$ gegeben.

Dabei ist $Y_i = (Y_{i,1}, \dots, Y_{i,n_i})$ ein für $i = 1, 2$ ein Vektor aus zufälligen Beobachtungen der die abhängigen Daten darstellt.

Weiterhin sei X_i für $i = 1, 2$ eine $n_i \times (p+1)$ Designmatrix mit vollem Zeilenrang und festem Design. Dabei ist die j -te Zeile von X_1 mit der j -ten Zeile von X_2 für $j = 1, \dots, \min(n_1, n_2)$ identisch. Diese Bedingung bedeutet, dass beide Designmatrizen für $j = 1, \dots, \min(n_1, n_2)$ das selbe, feste Design haben.

Außerdem sind β_i zwei $(p+1) \times 1$ Koeffizientenvektoren, die den funktionalen Zusammenhang zwischen Y_i und X_i darstellen.

In diesem Kapitel ist $e_i \sim \mathcal{N}_{n_i}(0, \sigma^2 I_{n_i})$. Diese Annahme ist wichtig, da sich die Modelle somit nur in β_i unterscheiden.

Die zugrunde liegenden Modelle sind also gleich, wenn $\beta_1 = \beta_2$

Da die Werte von β_i unbekannt ist und nur geschätzt werden kann, muss man testen, ob

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 \text{ vs. } H_1 : \beta_1 \neq \beta_2 \quad (11)$$

Dabei bezeichnet H_0 die Hypothesen und H_1 die Alternativhypothese.

Dazu ist es entweder möglich einen Test zu konstruieren oder Konfidenzbänder zu benutzen. Im nächsten Abschnitt wird einen Test konstruieren und im übernächsten Abschnitt Konfidenzbänder benutzt.

Es ist mit der in diesem Kapitel eingeführten Methode auch möglich zwei Modelle mit verschiedenen abhängigen Daten zu vergleichen.

Ein Beispiel für solch ein vorgehen ist der Vergleich des Blutdrucks von Männern und Frauen. Konkret kann man mit dieser Methode die Frage beantworten, ob sowohl für Männer, als auch für Frauen, der Zusammenhang zwischen zum Beispiel Alter und Blutdruck gleich ist.

Beispiel 2.0.3. Es wird das Beispiel aus Kapitel 1 fortgeführt, indem eine zweite Designmatrix X_2 einführt wird. Die Designmatrix X_2 stellt ein polynomiales Modell vom Grad 3 dar.

Das heißt, im Beispiel zu diesem Kapitel wird es darum gehen, ob es für die Daten, die bereits im Kapitel 1 vorgestellt wurden, einen Unterschied macht, ein polynomiales Modell vom Grad Drei oder vom Grad Eins zugrunde zu legen.

In der folgenden Graphik 6 sind die beiden Modelle mit den Daten eingezeichnet.

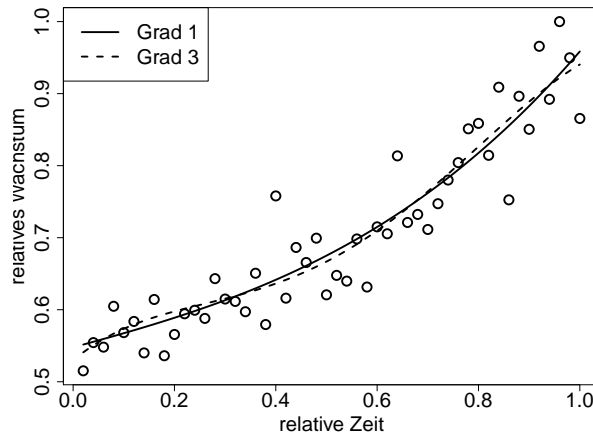


Abbildung 6: Regression von Grad Eins und Grad Drei im Vergleich

2.1 F-Test

Dieser Abschnitt beruht auf [Liu64, S. 9-15], [Liu64, S. 114-115] und [DS98].

Zuerst betrachten wir den Test, zu prüfen, ob der Regressionskoeffizient β eine lineare Einschränkung $Z\beta = d$ erfüllt. Dabei ist Z eine gegebene $r \times (p+1)$ Matrix mit vollem Zeilenrank r mit $1 \leq r \leq p+1$ und d ist ein vorgegebener Vektor in \mathbb{R}^r . Wir wollen testen, ob

$$H_0 : Z\beta = d \text{ vs. } H_a : Z\beta \neq d \quad (12)$$

Von Interesse ist, ob der Parameter in einem gegebenen Regressionsmodell eine lineare Einschränkung erfüllt.

Dazu wird zuerst der OLS-Schätzer $\hat{\beta}_Z$ unter der Bedingung, dass $Z\beta = d$ benötigt. Das heißt, $\hat{\beta}_Z$ minimiert

$$L(\beta) = (Y - X\beta)'(Y - X\beta) = \|Y - X\beta\|^2$$

über alle $\beta \in \mathbb{R}^{p+1}$, die die Bedingung $Z\beta = d$ erfüllen. Man kann $\hat{\beta}_Z$ mittels Lagrange-Multiplikatoren finden.

Betrachtet wird dazu der nachfolgender Satz.

Satz 2.1.1. Unter den oben genannten Bedingungen ist der OLS-Schätzer $\hat{\beta}_Z$ gegeben durch

$$\hat{\beta}_Z = (X'X)^{-1}(X'Y + Z'f) = \hat{\beta} + (X'X)^{-1}Z'f$$

mit $f = (Z(X'X)^{-1}Z')^{-1}(d - Z\hat{\beta})$

Beweis. [Liu64, S. 13]

□

Bedeutung hat im Weiteren der folgende Satz:

Satz 2.1.2. Unter den oben genannten Bedingungen gilt

1. $\|X\hat{\beta} - X\hat{\beta}_Z\|^2 \sim \sigma^2 \chi_r^2(\delta)$ mit nicht zentralem Parameter
 $\delta = \|X\beta - XE(\hat{\beta}_Z)\|^2/\sigma^2 = (\beta - E(\hat{\beta}_Z))'X'X(\beta - E(\hat{\beta}_Z))/\sigma^2$
2. $\|Y - X\hat{\beta}_Z\|^2 \sim \sigma^2 \chi_{n-(p+1)+r}^2(\delta)$ mit δ wie in 1.
3. $\|X\hat{\beta} - X\hat{\beta}_Z\|^2$ und $\|Y - X\hat{\beta}_Z\|^2$ sind unabhängig.
- 4.

$$\frac{\|X\hat{\beta}_Z - X\hat{\beta}\|^2/r}{\|Y - X\hat{\beta}\|^2/(n-p-1)} \sim f_{p+1, n-p-1}$$

Beweis. [Liu64, S. 11]

□

Damit kann ein Test zum Niveau $1 - \alpha$ konstruiert werden:

$$\text{Es ist } H_0 \text{ genau dann abzulehnen, wenn } \frac{\|X\hat{\beta}_Z - X\hat{\beta}\|^2/r}{\|Y - X\hat{\beta}\|^2/(n-p-1)} > f_{p+1, n-p-1}^\alpha \quad (13)$$

Gleich wird noch folgender Satz aus [Liu64, S. 13] benötigt:

Satz 2.1.3. Es gilt

$$\|X\hat{\beta} - X\hat{\beta}_Z\|^2 = (Z\hat{\beta} - d)'(Z(X'X)^{-1}Z')^{-1}(Z\hat{\beta} - d)$$

Beweis. [Liu64, S. 13]

□

Jetzt wird dieses Resultat auf den Vergleich von Regressionsmodellen angewendet. Dabei wird sich an [Liu64, S. 114] orientiert.

Betrachten wir wieder das Modell 10 aus der Einleitung. Außerdem wird wieder der Test (11) betrachtet:

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 \text{ vs. } H_1 : \beta_1 \neq \beta_2$$

Um einen solchen Test durchzuführen, benötigt man eine Dummyvariable z :

$$z = \begin{cases} 1 & \text{falls Y aus dem Modell 1 ist.} \\ 0 & \text{falls Y aus dem Modell 2 ist.} \end{cases}$$

Mit z können die beiden Modelle zu einem vereint werden, indem

$$Y = x'c_1 + zx'c_2 + e \quad (14)$$

mit $x = (1, x_1, \dots, x_p)'$, $c_1 = \beta_2$ und $c_2 = \beta_1 - \beta_2$ gesetzt wird. Dass dieses Modell mit den beiden Modellen aus (10) übereinstimmt, sieht man daran, dass

$$Y = x'(c_1 + c_2) + e = x'\beta_1 + e$$

wenn Y aus dem ersten Modell und

$$Y = x'c_1 + e = x'\beta_2 + e$$

wenn Y aus dem zweiten Modell stammt. Damit kann man den Hypothesentest (11) umformulieren zu

$$H_0 : c_2 = \beta_1 - \beta_2 = 0 \text{ vs. } H_1 : c_2 \neq 0$$

Unter H_0 reduziert sich also das Gesamtmodell (14) zu

$$Y = x'c_1 + e$$

Jetzt kann (13) benutzt werden und man erhält als Teststatistik :

$$\text{Es ist } H_0 \text{ genau dann zu verwerfen, wenn } \frac{(\hat{\beta}_1 - \hat{\beta}_2)'D(\hat{\beta}_1 - \hat{\beta}_2)/(p+1)}{\widehat{\sigma^2}} > f_{p+1, n-p-1}^\alpha \quad (15)$$

Dabei ist $\hat{\sigma}^2$ die mittlere Varianz des Modells (14), $\hat{\beta}_i = (X_i'X_i)^{-1}X_i'Y$ und $D = (X_1'X_1)^{-1} + (X_2'X_2)^{-1}$.

Um zu sehen, dass (15) tatsächlich aus (13) hergeleitet werden kann, ist folgende Rechnung nach [Liu64, S. 115] zu betrachten. Dabei erfolgt in der Betrachtung allerdings ausschließlich die Berechnung für den Nenner.

Für den Nenner betrachtet man

$$\begin{aligned} \widehat{\sigma^2} &= \frac{\|Y - X\hat{c}\|}{n_1 + n_2 - 2(p+1)} \\ &= \frac{\|Y_1 - X_1\hat{\beta}_1\|^2 + \|Y_2 - X_2\hat{\beta}_2\|^2}{n_1 + n_2 - 2(p+1)} \\ &= \frac{n_1 - p - 1}{n_1 + n_2 - 2(p+1)} \frac{\|Y_1 - X_1\hat{\beta}_1\|^2}{n_1 - p - 1} + \frac{n_2 - p - 1}{n_1 + n_2 - 2(p+1)} \frac{\|Y_2 - X_2\hat{\beta}_2\|^2}{n_2 - p - 1} \\ &= \frac{n_1 - p - 1}{n_1 + n_2 - 2(p+1)} \hat{\sigma}_1^2 + \frac{n_2 - p - 1}{n_1 + n_2 - 2(p+1)} \hat{\sigma}_2^2 \end{aligned}$$

Es wird nun das Beispiel aus der Einleitung zu diesem Kapitel fortgeführt

Beispiel 2.1.4. Berechnet man die Teststatistik (15) erhält man als Teststatistik den Wert 14.0476 und als kritischen Wert 2.574035. Also verwirft man die Hypothese. Die Modelle sind also verschieden.

Allerdings macht solch ein Test keinerlei Aussage über die Größe des Unterschiedes zwischen den Modellen. Deshalb werden im nächsten Abschnitt die Ergebnisse aus Kapitel 1 benutzt.

2.2 Vergleich von Regressionsmodellen mit Konfidenzbändern

Dieser Abschnitt basiert auf [Liu64, S. 119-121]. Die grundlegende Idee ist, die Modelle voneinander abzuziehen und dann zu sehen, ob die Nullfunktion in einem Konfidenzband um die Differenz der beiden Modelle liegt.

Es wird dies nach [Liu64, S. 122] formalisiert:

Ein zweiseitiges, hyperbolisches, gleichmäßiges Konfidenzband für $x'\beta_2 - x'\beta_1$ über der Region A hat die Form

$$x'\beta_2 - x'\beta_1 \in x'\hat{\beta}_1 - x'\hat{\beta}_2 \pm c \hat{\sigma} \sqrt{x'Dx} \quad \text{für alle } x \in A \quad (16)$$

wobei c eine kritische Konstante ist, sodass das Konfidenzniveau des Konfidenzbandes $1 - \alpha$ beträgt. Dabei ist $D = (X_1'X_1)^{-1} + (X_2'X_2)^{-1}$

Sei P die eindeutig bestimmte Wurzel aus $D = (X_1'X_1)^{-1} + (X_2'X_2)^{-1}$ wie im ersten Kapitel und definiere $T = P^{-1}(\hat{\beta}_2 - \beta_2 - \hat{\beta}_1 + \beta_1)/\hat{\sigma}$, welches wieder die $\tau_{p+1,v}$ Verteilung besitzt. Es folgt wie in Kapitel 1.4, dass das simultane Konfidenzband (16) gegeben ist durch $\mathbb{P}(S < c)$ mit

$$\begin{aligned} S &= \sup_{x \in A} \frac{x'(\hat{\beta}_2 - \beta_2 - \hat{\beta}_1 + \beta_1)}{\hat{\sigma} \sqrt{x'Dx}} \\ &= \sup_{x \in A} \frac{(Px)'(P^{-1}(\hat{\beta}_2 - \beta_2 - \hat{\beta}_1 + \beta_1)/\hat{\sigma})}{\sqrt{(Px)'(Px)}} \\ &= \sup_{x \in A} \frac{|(Px)'T|}{\|Px\|} \end{aligned}$$

Also kann die kritische Konstante c genauso wie in Kapitel 1.4 beziehungsweise wie in Kapitel 1.5 gefunden werden.

Der folgende Satz zeigt, dass es keinen Unterschied macht, ob ein F-Test durchgeführt oder ein Konfidenzband auf ganz \mathbb{R} benutzt wird. Satz und Beweis orientieren sich an [Liu64, S. 67].

Satz 2.2.1. F-Test und Konfidenzbandmethode auf ganz \mathbb{R} liefern immer das selbe Ergebnis, das heißt, sie widerlegen beziehungsweise bejahen einen Test genau dann, wenn der andere ihn auch widerlegt beziehungsweise bejaht.

Beweis. Benutzt man die Definition von N wie bisher, außer das man β mit β_0 ersetzt, erhält man

$$\begin{aligned}
\sqrt{(p+1)f_{p+1,n-p-1}^\alpha} &< \sup_{x_{(0)} \in \mathbb{R}^p} \frac{|x'(\hat{\beta} - \beta_0)|}{\hat{\sigma} \sqrt{x'(X'X)^{-1}x}} \\
&= \sup_{x_{(0)} \in \mathbb{R}^p} \frac{|(Px)'N|}{(\hat{\sigma}/\sigma) \sqrt{(Px)'(Px)}} \\
&= \frac{\|N\|}{(\hat{\sigma}/\sigma)} \left(\sup_{x_{(0)} \in \mathbb{R}^p} \frac{|(Px)'N|}{\|Px\| \|N\|} \right) \\
&= \frac{\|N\|}{(\hat{\sigma}/\sigma)} \\
&= \sqrt{\frac{(\hat{\beta} - \beta_0)' P^{-1} P^{-1} (\hat{\beta} - \beta_0)}{\widehat{\sigma^2}}} \\
&= \sqrt{\frac{(\hat{\beta} - \beta_0)' (X'X) (\hat{\beta} - \beta_0)}{\widehat{\sigma^2}}}
\end{aligned}$$

Man sieht also, dass die beiden Test äquivalent sind □

Dies bedeutet, dass es von einem Interferenzstandpunkt her immer besser ist, ein Konfidenzband auf einem zum Vergleich von zwei Modellen zu verwenden.

Weiterhin wurde bereits im ersten Kapitel gezeigt, dass Konfidenzbänder auf einem Intervall und erst recht Konfidenzbänder für Polynome auf einem Intervall eine bessere Inferenz zulassen als Konfidenzbänder auf ganz \mathbb{R} . Also ist es immer von Vorteil, Konfidenzbänder auf Intervallen zu verwenden.

Beispiel 2.2.2. Es wird jetzt das Beispiel aus den vorherigen Abschnitten fortgeführt, indem die Differenz der Regressionsmodelle geplottet wird und ein Konfidenzbänder auf A für Polynome eingefügt wird:

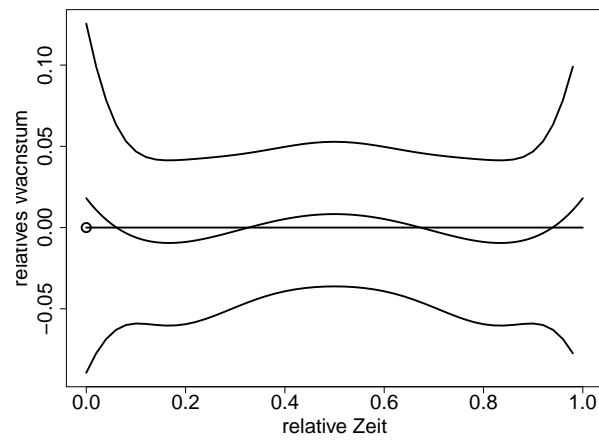


Abbildung 7: Differenz des Beispiels mit Konfidenzband auf A für Polynome

Man sieht, dass die konstante Nullfunktion nicht ganz im Konfidenzband enthalten ist. Also wird auch in diesem Fall der Test

3 Teil eines Regressionsmodells überprüfen

In diesem Abschnitt wird der Spezialfall zu prüfen, ob ein Teil des Regressionsmodells signifikant von Null verschieden ist oder nicht. Das heißt, wir gehen von dem Modell

$$Y = X\beta + e \quad (17)$$

und wollen prüfen, ob einige der Koeffizienten β_i gleich Null sind oder nicht. Ist β_i gleich Null haben die zugehörigen unabhängigen Variablen x_i s keinen Einfluss auf die abhängige Variable Y .

Zu diesem Zweck unterteilen wir den Vektor $\beta = (\beta_1, \beta_2)$ mit $\beta_1 = (\beta_0, \dots, \beta_{p-k})$ und $\beta_2 = (\beta_{p-k+1}, \dots, \beta_p)$ für $1 \leq k \leq p$ eine gegebene natürliche Zahl.

Auf die gleiche Art und Weise kann man die Spalten x von X in $x_1 = (1, x_1, \dots, x_{p-k})$ und $x_2 = (1, x_{p-k+1}, \dots, x_p)$ unterteilen.

Ist $\beta_2 = 0$ so haben die unabhängigen Variablen x_{p-k+1}, \dots, x_p keinen Einfluss auf Y und man kann das Modell 17 auf

$$Y = X_1\beta_1 + e \quad (18)$$

vereinfachen. Dabei ist X_1 die Matrix die von den ersten $p - k + 1$ Spalten von X geformt wird.

3.1 F-Fest

In diesem Abschnitt wird der F-Test als Methode, um zu prüfen, ob $\beta_2 = 0$ ist, vorgestellt. Dieser Abschnitt orientiert sich an [Liu64, S. 100-102].

Ein Ansatz zu prüfen ob $\beta_2 = 0$ ist, ist der Test

$$H_0 : \beta_2 = 0 \text{ vs. } H_1 : \beta_2 \neq 0 \quad (19)$$

der auch in [DS98] vorgeschlagen wird. Analog zu Abschnitt 2.1 erhält man die Teststatistik

$$\frac{(\tilde{I}\hat{\beta})'(\tilde{I}(X'X)^{-1}\tilde{I}')^{-1}(\tilde{I}\hat{\beta})/k}{\text{mean square residual von Modell 17}} > f_{k,v}^\alpha$$

mit $v = n - p - 1$, \tilde{I} der $k \times (p + 1)$ Matrix die durch $\tilde{I} = (0, I_k)$ gegeben ist und $f_{k,v}^\alpha$ dem α Quantil der f Verteilung mit k und v Freiheitsgraden.

Dabei ist der MS residual von Modell (17) gegeben durch

$$MS = \|Y - X\hat{\beta}\|^2 / (n - p - 1) = \hat{\sigma}$$

Lehnt man bei diesem Test die Nullhypothese ab, heißt dies, dass es nicht genug statistisch gesicherte Hinweise gibt, um anzunehmen, dass $\beta_2 = 0$ ist. Dies heißt allerdings nicht, dass wir davon ausgehen können, dass $\beta_2 \neq 0$ ist.

Benutzt man stattdessen ein Konfidenzband hat man ein Maß für den Unterschied der Modelle und kann eher entscheiden, ob $\beta_2 \neq 0$. Der nächste Satz gibt genau solch ein Theorem an

Satz 3.1.1. Es gilt

$$\mathbb{P}(x'_2\beta_2 \in x'_2\hat{\beta}_2 \pm \sqrt{k f_{k,n-p-1}^\alpha} \hat{\sigma} \sqrt{x'_2 V x_2}) = 1 - \alpha \quad (20)$$

Dabei ist $V = \tilde{I}(X'X)^{-1}\tilde{I}'$, $\hat{\beta}_2 = \tilde{I}\hat{\beta}$ mit \tilde{I} wie oben. Dieser Satz kann ähnlich wie Satz (1.3.1) bewiesen werden. Außerdem gilt folgender Satz

Satz 3.1.2. Test (19) und das Konfidenzband (20) verwerfen und akzeptieren H_0 zur selben Zeit.

Das Konfidenzband (20) gibt einem also immer mehr Information. Allerdings ist das Konfidenzband auf ganz \mathbb{R}^k definiert. Eine noch besser Aussage über H_0 kann man also treffen, wenn man stattdessen ein Konfidenzband auf A betrachtet.

3.2 Teil eines Regressionsmodells auf einem Intervall überprüfen

Dieser Abschnitt orientiert sich an [Liu64, S. 102-105].

Wir beschränken uns auf die rechteckige Region

$$A_2 = \{x_2 \in \mathbb{R}^k = (x_{2,p-k+1}, \dots, x_{2,p}) : x_{2,i} \in [a_i, b_i], i = p - k + 1, \dots, p\}$$

dabei sind $-\infty \leq a_i \leq b_i \leq \infty, i = p - k + 1, \dots, p$ gegebene Konstanten. Ein hyperbolisches Konfidenzband auf A_2 ist gegeben durch

$$x'_2\beta_2 \in x'_2\hat{\beta}_2 \pm c\hat{\sigma}\sqrt{x'_2 V x_2} \text{ für alle } x_2 \in A_2 \quad (21)$$

dabei muss man die kritische Konstante c so bestimmen, dass das gleichmäßige Konfidenzniveau $1 - \alpha$ ist.

Sei W die Wurzel aus V , also sei $V = W^2$. Bezeichne $N_2 = W^{-1}(\hat{\beta}_2 - \beta_2)/\sigma \sim \mathcal{N}_k(0, I)$ und $T_2 = N_2/(\hat{\sigma}/\sigma \sim \tau_{k,v})$. Dann ist das Konfidenzlevel von (21) gegeben durch $\mathbb{P}(S < c)$ wobei

$$\begin{aligned} S &= \sup_{x_2 \in A_2} \frac{|x'_2(\hat{\beta}_2 - \beta_2)|}{\hat{\sigma}\sqrt{x'_2 V x_2}} \\ &= \sup_{x_2 \in A_2} \frac{|(W x_2)' W^{-1}(\hat{\beta}_2 - \beta_2)/\hat{\sigma}|}{\sqrt{(W x_2)'(W x_2)}} \\ &= \sup_{v \in C(W, A_2)} \frac{|v' T_2|}{\|v\|} \end{aligned}$$

wobei $C(W, A_2) = \{\lambda W x_2 = \lambda(x_{p-k+1} w_1 + \dots + x_p w_k) : \lambda > 0 \text{ and } x_2 \in A_2\}$ mit $W = (w_1, \dots, w_k)$.

Die Verteilung von S hängt nicht von β und σ ab. Allerdings hängt sie in komplizierter Weise von der Region A_2 und W durch $C(W, A_2)$ ab.

Für die beiden Spezialfälle $k = 1$ und $0 \in C(W, A_2)$ ergeben sich Vereinfachungen. Im allgemeinen Fall kann man c ähnlich wie in Abschnitt 1.5 finden. Dazu berechnet man R mal S_i auf die folgende Art:

1. Simuliere $N_2 \sim \mathcal{N}_k(0, I)$ und $\hat{\sigma}/\sigma \sim \sqrt{\chi_v^2/v}$
2. Bestimme $\|\pi^*(T_2, W, A_2)\|$ und $\|\pi^*(-T_2, W, A_2)\|$
3. Dann ist $S = \max(\|\pi^*(T_2, W, A_2)\|, \|\pi^*(-T_2, W, A_2)\|)$

Dann ist die kritische Konstante c das $1 - \alpha$ Quantil von S_1, \dots, S_R .

Die Berechnung von $\|\pi^*(T_2, W, A_2)\|$ findet man in [Liu64, Appendix B].

Diese Methode wurde nicht weiter verfolgt, da das Ziel dieser Arbeit ist Konfidenzbänder zu vergleichen. Außerdem werden im letzten Kapitel Datenbeschreibung und Resultate vor allem Polynommodelle betrachtet. Wie man in diesem Fall Konfidenzbänder konstruiert ist Thema des nächsten Abschnitts.

Simulation 3.2.1. Es werden für das Konfidenzband auf ganz \mathbb{R}^n wieder eine Simulation für die Überdeckungswahrscheinlichkeit für Daten aus einer gewöhnlichen multilineareren Regression und einer Regression mit AR(1)-Kovarianzmatrix durchgeführt:

\times	R	AR
R	0.98	0.84
Minmax	0.92	0.8
Poly	0.87	0.94
R prüfen	0.84	...

3.3 Teil eines Regressionsmodells überprüfen, wenn das Modell Polynomgestalt hat

Dieser Abschnitt orientiert sich an [Liu64, S. 190-192] und [DS98].

Für den Fall, dass man Modelle mit Polynomgestalt betrachtet erhält man als f -Test

$$\text{reject } H_0 \leftrightarrow \frac{\hat{\beta}_2' V^{-1} \hat{\beta}_2 / k}{\widehat{\sigma^2} > f_{k,v}^\alpha} \quad (22)$$

mit $\hat{\beta}_2$ ist der Schätzer für $\beta_2 = (b_{p-k+1}, \dots, b_p)'$ welcher die letzten k Komponenten ist und Verteilung $\mathcal{N}(\beta_2, \sigma^2, V)$. Außerdem ist V die $k \times k$ Matrix, die von den letzten k Zeilen und den letzten k Spalten von $(X'X)^{-1}$, erzeugt wird. Da V nicht singulär ist, sei W die eindeutig bestimmte Wurzel von V , dass heißt $V = W^2$.

Analog zum letzten Abschnitt kann wieder gezeigt werden, dass dieser Test dem Konfidenzband

$$x_2' \beta_2 \in x_2' \hat{\beta}_2 \pm \sqrt{k f_{k,v}^\alpha} \hat{\sigma} \sqrt{x_2' V x_2} \text{ für alle } x_2 \in \mathbb{R}^k \quad (23)$$

entspricht. Das heißt liegt die Nullfunktion nicht vollständig in dem Konfidenzband (23), kann man die Nullhypothese aus Test (22) ablehnen.

Analog zu Abschnitt 1.6 kann man wieder ein Konfidenzband auf einem Intervall A konstruieren, dass die Polynomstruktur berücksichtigt.

Dazu betrachtet man, dass das Konfidenzniveau von (23) für c anstatt $\sqrt{k f_{k,v}^\alpha}$ durch $\mathbb{P}(S \leq c)$ gegeben ist. Dabei ist

$$\begin{aligned} S &= \sup_{x \in A} \frac{|\tilde{x}_2'(\hat{\beta}_2 - \beta_2)|}{\hat{\sigma} \sqrt{\tilde{x}_2' V \tilde{x}_2}} \\ &= \sup_{x \in A} \frac{|(1, \dots, x^{k-1})(\hat{\beta}_2 - \beta_2)|}{\hat{\sigma} \sqrt{(1, \dots, x^{k-1}) V (1, \dots, x^{k-1})'}} \end{aligned}$$

mit $\tilde{x}_2 = x^{p-k+1}(1, x, \dots, x^{k-1})$.

Also ist die kritische Konstante c genau so wie in Abschnitt 1.6 berechenbar, außer dass man $p = k - 1$ und $(X'X)^{-1}$ mit V ersetzen muss. Die Simulation ändert sich allerdings nicht.

Simulation 3.3.1. Auch für die Methode aus diesem Abschnitt wurden Simulationen durchgeführt:

\times	R	AR
R	0.98	0.84
Minmax	0.92	0.8
Poly	0.87	0.94
R prüfen	0.84	...
Poly prüfen	0.9	...

4 Regression und Konfidenzbänder für abhängige Daten

Alle bisherigen Ergebnisse beruhen auf dem homoskedastischen, multiplen linearen Regressionsmodell. Das heißt, mit $Y = (y_1, \dots, y_n) \in \mathbb{R}^n$, $\beta \in \mathbb{R}^{p+1}$ und $X \in \mathbb{R}^{n \times (p+1)}$ wurde von dem funktionalem Zusammenhang

$$Y = X\beta + e \tag{24}$$

ausgegangen, wobei $e \sim \mathcal{N}_n(0, \sigma^2 I_n)$ war. Es wurden für dieses Modell Konfidenzbänder mit verschiedenen Designmatritzen X sowohl auf \mathbb{R}^n als auch auf einem Intervall A bestimmt. In diesem Kapitel wird der Fall betrachtet, dass die Fehler untereinander korreliert sind. Zuerst werden autoregressive Modelle und im besonderen Zeitreihen, die einem AR(1) Prozess folgen, eingeführt. Dieser erste Abschnitt orientiert sich an [Han15] und [BD91]. Danach betrachten wir die Berechnung von Schätzern für die Parameter von Zeitreihen. Dazu sollen Funktionen aus dem R Paket *nlme*, dies steht für nonlinear mixed-effects models, verwendet werden. Dazu betrachten wir die konkrete Funktionsweise dieser Funktionen anhand des Buches [PB00],

Im letzten Abschnitt dieses Kapitels betrachten wir, wie wir für abhängige Daten Konfidenzbänder konstruieren können. Das heißt, wir betrachten wie die beiden vorhergehenden Abschnitte die Überlegungen aus den Abschnitten 1.6 und 3.3 ändern.

4.1 Autoregressive Modelle und AR(1)

In diesem Abschnitt wird das Modell (24) auf den Fall von abhängigen Daten verallgemeinert. Daten sind abhängig, wenn $\text{Cov}(y_i, y_j) \neq 0$ für $i \neq j$.

Beginnen wir mit ein paar Definitionen

Definition 4.1.1. Zeitreihe

Insbesondere werden Zeitreihen betrachtet. Eine Zeitreihe ist eine Reihe von Messungen an Zeitpunkten $t = 1, \dots, T$. Im Folgenden bedeutet der Index t , dass es sich um eine Messung handelt und T ist die Anzahl an Messungen.

Da die Messungen nacheinander getätigt werden, steht zu vermuten, dass y_t und y_{t+1} auf irgendeine Art und Weise nahe beieinander sind. Ist dies der Fall, sind y_t und y_{t+1} nicht unabhängig. Unabhängigkeit war allerdings eine der zentrale Annahmen im ersten Kapitel. Deshalb muss man Schätzer für die Parameter des Modells auf eine andere Art bestimmen.

Eine besondere Zeitreihe ist ein so genannter autoregressive-moving average (ARMA) Prozess. Die folgende Definition orientiert sich an [BD91, S. 78]

Definition 4.1.2. ARMA

Es gibt verschiedene Arten von ARMA Prozessen. Uns werden im folgenden nur so genannte AR(1) Prozesse, ein Spezialfall von allgemeinen ARMA Prozessen, interessieren.

Definition 4.1.3. AR(1)

$$y_t = \phi y_{t-1} + e_t \quad (25)$$

Dabei ist ϕ ein unbekannter Parameter und $\mathbb{E}(e_t) = 0$, $\mathbb{E}(e_t^2) = \sigma^2 < \infty$.

Eine Zeitreihe dieser Form nennt man einen autoregressiven Prozess erster Ordnung (AR(1)).

Bei AR(1)-Prozessen hängt der Wert zur Zeit t offenbar vom Wert der Zeitreihe zur Zeit $t - 1$ ab. Somit ist hier $\text{Cov}(y_i, y_j) \neq 0$ für $i \neq j$ und die Ergebnisse aus Kapitel 1 können nicht angewendet werden.

Man kann $\text{Cov}(y_i, y_j)$ durch den funktionalen Zusammenhang $\mathbb{E}(Y_i) = \phi^{i-j}\mathbb{E}(Y_j)$ für $i > j$ finden. Für $j < i$ ist $\mathbb{E}(Y_j) = \phi^{i-j}\mathbb{E}(Y_i)$.

Beispielsweise erhält man für $i = 1$ den Zusammenhang $y_1 = \phi^j y_j$ und somit:

$$\begin{aligned} \text{Cov}(y_1, y_j) &= \mathbb{E}((\mathbb{E}(y_1) - y_1)(\mathbb{E}(y_j) - y_j)) \\ &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(y_1)\mathbb{E}(y_j) - \mathbb{E}(y_1)y_j - \mathbb{E}(y_j)y_1 + y_j y_1) \\ &= \phi^j \mathbb{E}(\mathbb{E}(y_j^2) - 2\mathbb{E}(y_j)y_j + y_j^2) \\ &= \phi^j \mathbb{E}(\mathbb{E}(y_j^2) - \mathbb{E}(y_j)^2) \\ &= \phi^j \sigma^2 \end{aligned}$$

Damit hat die Korrelationsmatrix Υ von e in diesem Fall die Form:

$$\Upsilon = \begin{bmatrix} 1 & \phi & \phi^2 & \dots & \phi^{n-2} & \phi^{n-1} \\ \phi & 1 & \phi & \dots & \phi^{n-3} & \phi^{n-2} \\ \phi^2 & \phi & 1 & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \phi & \phi^2 \\ \phi^{n-2} & \phi^{n-3} & \dots & \phi & 1 & \phi \\ \phi^{n-1} & \phi^{n-2} & \dots & \phi^2 & \phi & 1 \end{bmatrix}$$

Das heißt, das Modell ist gegeben durch

$$Y = X\beta + e \quad (26)$$

mit $e \sim \mathcal{N}_n(0, \Upsilon)$.

4.2 AR(1) und das *nlme* Paket

In diesem Abschnitt wird vorgestellt, wie die Schätzer für β , σ und ϕ konkret berechnet werden können. Dieser Abschnitt orientiert sich an [PB00, S. 203-205].

Um einen ML-Schätzer für das Modell (26) zu erhalten, kann man folgenden Trick anwenden: Man multipliziert beide Seiten der Gleichung mit $\Upsilon^{-1/2}$. Dann wird aus dem Modell (26) wieder das Modell (24), wenn auch mit anderen Werten. Konkret erhält man

$$(\Upsilon^{-1/2})Y = Y^* = X^*\beta + e^* = (\Upsilon^{-1/2})X + (\Upsilon^{-1/2})e \quad (27)$$

mit $e^* = (\Upsilon^{-1/2})e \sim \Upsilon^{-1/2} \cdot \mathcal{N}_n(0, \Upsilon) = \mathcal{N}_n(0, \Upsilon^{-1}\Upsilon) = \mathcal{N}_n(0, I)$. Die Schwierigkeit besteht also darin, die Konstante ϕ zu bestimmen.

Die Konstante ϕ wird mittels profiled ML-Schätzung bestimmt. Dazu fixiert man zuerst ϕ und berechne die ML-Schätzer für $\hat{\beta}$ und $\widehat{\sigma^2}$ mittels:

$$\begin{aligned} \hat{\beta}(\phi) &= \left((X^*)' X^* \right)^{-1} (X^*)' Y^* \\ \widehat{\sigma^2}(\phi) &= \frac{\|Y^* - X^* \hat{\beta}(\phi)\|^2}{n - p - 1} \end{aligned} \quad (28)$$

Danach setzt man (28) in die normale Likelihoodfunktion von Modell (27) ein und erhält:

$$l(\phi|Y) = \text{const} - (n - p - 1) \log \|Y^* - X^* \hat{\beta}(\phi)\| - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \log(\det(\Upsilon)) \quad (29)$$

Man findet dann $\hat{\phi}$ indem man das Argmax von (29) für ϕ bestimmt. Dies geschieht in dem Paket *nlme* numerisch mittels orthogonal-triangularen Zerlegungen. Sieh hierzu [PB00, S. 68-75].

Um den Wert von $\hat{\phi}$ für vorgegebene Daten zu bestimmen, wurde die Funktion *gls* aus dem Paket *nlme* benutzt. Bei der Benutzung von *gls* um einen Schätzer für ϕ zu bestimmen, muss der Wert *correlation=corAR1()* an *gls* übergeben werden.

Um dann bei gegebenem ϕ beziehungsweise $\hat{\phi}$ einen Schätzer für β und σ zu bestimmen, wird folgender Algorithmus verwendet:

1. Benutze *gls* um ϕ zu bestimmen.
2. Bestimme Υ und mittels der R-Funktion *solve* Υ^{-1}
3. Führe eine Eigenwertzerlegung von Υ^{-1} durch um die Matrix zu diagonalisieren und nehme dann von der Hauptdiagonalenmatrix elementenweise die Wurzel, um $\Upsilon^{-1/2}$ zu bestimmen.
4. Transformiere Y nach Y^* und X nach X^* mittels Linksmultiplikation mit $\Upsilon^{-1/2}$
5. Benutze eine normale OLS um $D = (X'^* X^*)^{-1}$, β und σ^2 zu berechnen.

Führt man diese Schritte durch, das heißt man transformiert die Daten und berechnet dann den OLS Schätzer

$$\hat{\beta} = (X^t X)^{-1} X^t Y$$

für die transformierten Daten

$$\Upsilon^{-1/2}Y = \Upsilon^{-1/2}X\beta + \Upsilon^{-1/2}e$$

erhält man :

$$\begin{aligned}\hat{\beta} &= ((\Upsilon^{-1/2}X)^t\Upsilon^{-1/2}X)^{-1}(\Upsilon^{-1/2}X)^t\Upsilon^{-1/2}Y \\ &= (X^t\Upsilon^{-1/2}\Upsilon^{-1/2})^{-1}X^t\Upsilon^{-1/2}\Upsilon^{-1/2}Y \\ &= (X^t\Upsilon^{-1}X)^{-1}X^t\Upsilon^{-1}Y\end{aligned}$$

Was genau der generalised least squares (GLS) Schätzer ist.

Dies ist genau das Vorgehen der Funktion *gls* aus dem *nlme* Paket. Deswegen wird in Zukunft immer direkt der *gls* Schätzer benutzt.

Beispiel 4.2.1. Jetzt wird das Beispiel aus dem Abschnitt 1.1 fortgeführt, indem eine Regression mit AR(1) für das Polynommodell mit Grad Eins durchgeführt wird.

Man erhält als Schätzer für den AR(1) Parameter $\hat{\phi} = -0.938988$, während der wahre Wert 0.75 ist. Dieser Wert ist ... von dem wahren Wert entfernt. Der Schätzer für ϕ ist also

Als Schätzung für die Parameter erhält man (0.5142065 ; 0.4247473) und 0.2106673, während die wahren Werte (10,5,-4,7) und 1 sind . Diese Schätzer sind

Zeichnet man dann dieses Regressionspolynom mit den Daten in eine Graphik erhält man

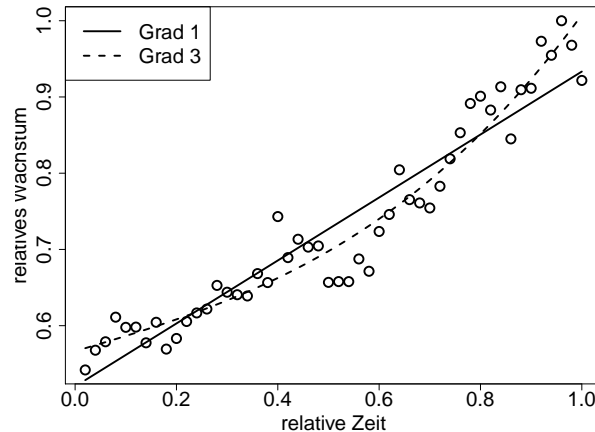


Abbildung 8: Regression für AR(1)

Man sieht, dass auch in diesem Fall ein deutlicher Unterschied zwischen den beiden Regressionspolynomen besteht.

4.3 Konfidenzbänder für AR(1)

Im letzten Abschnitt wurde gezeigt, dass man einen Schätzer für β und σ^2 bei korrelierten Daten erhalten kann, indem man beide Seiten mit der Kovarianzmatrix Υ multipliziert.

Wie schon gezeigt, ist $e^* = (\Upsilon^{-1/2})e \sim \mathcal{N}_n(0, I)$. Die Fehler dieses abgeänderten Modells sind also wieder unabhängig verteilt. Das heißt, es können die Ergebnisse aus Kapitel 1 angewandt werden und ein Konfidenzband K^* bestimmt werden, sodass

$$\mathbb{P}(x^{*\prime}\beta \in K^*) = 1 - \alpha$$

Da allerdings nicht $x^{*\prime}\beta$ interessiert, sondern $x'\beta$, müssen noch beide Seiten der logischen Gleichheit in $\mathbb{P}()$ mit $\Upsilon^{1/2}$ multipliziert werden. Auf diese Art erhält man dann ein Konfidenzband für das ursprüngliches Modell (26).

Nun betrachten wir, wie dies die Simulation aus Abschnitt 1.6 beeinflusst. Es ändert sich nur die Simulation von N .

Konkret wird die folgende Simulation verwendet, um konkret den Wert der kritischen Konstante c bei abhängigen Daten zu bestimmen:

1. Simuliere $N \sim \mathcal{N}_n(0, (\Upsilon^{-1/2}X'\Upsilon^{-1/2}X)^{-1}) = (0, (X^{*\prime}X^*)^{-1})$ und $\hat{\sigma}/\sigma \sim \sqrt{\chi_v^2/v}$ mit $v = n - p - 1$.
2. Berechnung von $K_{2h}(T, (X^{*\prime}X^*)^{-1}, (a, b))$.

Die Berechnung von $K_{2h}(T, \cdot, (a, b))$ läuft analog zum Kapitel 1.6, da sich die Funktion $K_{2h}(T, \cdot, (a, b))$ nicht ändert.

Beispiel 4.3.1. Jetzt wird das Beispiel aus dem ersten Kapitel fortgeführt, indem zu der Regression mit Grad Eins, dem Konfidenzband auf ganz \mathbb{R} , dem auf A und dem auf A für Polynome noch ein Konfidenzband auf A für Polynome unter Berücksichtigung der AR(1)-Struktur bestimmt wird.

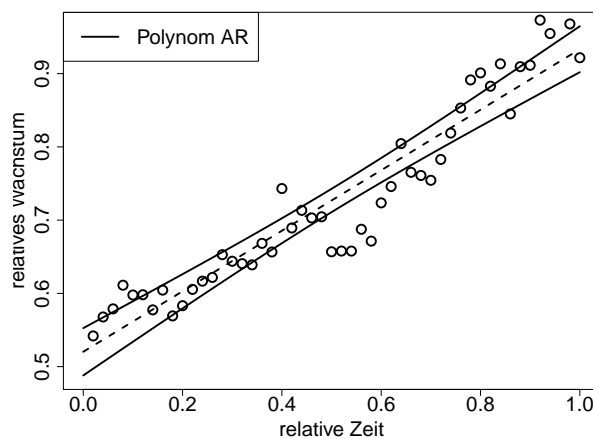


Abbildung 9: Weiterführung des Beispiels durch Konfidenzband auf A unter Berücksichtigung von Polynomstruktur und AR(1)-Struktur

Man erhält als kritischen Wert für das Konfidenzband auf ganz \mathbb{R} 2.526154, für das Konfidenzband auf A 2.074654, für das Konfidenzband auf A für Polynome 2.706617 und für das Konfidenzband auf A für Polynome das die AR(1)-Struktur berücksichtigt 1.957394.

Da es sich um eine Simulation handelt und Reproduktivität gewährleistet werden soll, wird die seed 4 benutzt.

Vergleicht man wieder die Regression mit Grad Eins und mit Grad drei erhält man die folgende Graphik:

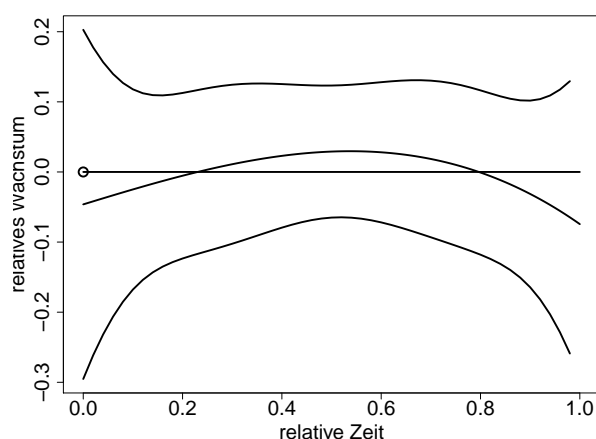


Abbildung 10: Vergleich Regression Grad Eins und Grad drei unter Berücksichtigung der Polynomstruktur und AR(1)-Struktur

Man sieht, dass das Konfidenzband weit von den Daten entfernt ist. Vermutlich liegt dies daran, dass $X'X$ in diesem Fall Eigenwerte nahe Null hat. Dadurch führt die Berechnung von $(X'X)^{-1}$ zu seltsamen Ergebnissen.

5 Datenbeschreibung und Resultate

In diesem Kapitel werden zuerst die Daten beschrieben, die als Motivation für die bisher erklärten Methoden dienten. Danach werden die Methoden auf die Daten angewendet. Zuerst werden die Verschiedenen Methoden Konfidenzbänder zu bestimmen verglichen. Danach werden Polynommodelle von verschiedenem Grad miteinander verglichen. Im letzten Abschnitt werden 10 Kilopascal (kPa) und 30 kPa Daten verglichen. Die Daten entstammen der Arbeit von [ZR10].

5.1 Datenbeschreibung

Die Motivation dieser Arbeit ist, wie eine Stammzelle entscheidet, zu welcher Art Gewebe sie wird. Es wird vermutet, dass Stammzellen diese Entscheidung treffen, wenn sie gerade nicht wachsen. Deshalb wurden Stammzellen auf verschiedene Untergründe gesetzt und zu jeweils bestimmten äquidistanten Zeitpunkten unter einem Mikroskop fotografiert. Danach wurde ihre Fläche bestimmt. Mit Hilfe dieser Daten wird eine Regression mit der Zeit als unabhängige Variable durchgeführt. Es wird eine Polynomregression verwendet, da die Ableitungen von Polynomen gut zu berechnen sind und man so die kritischen Punkte des Regressionsgraphen einfach bestimmen kann.

Es geht darum, das beste Polynom-Modell für die Daten zu wählen. Ein Polynom-Modell ist durch den Grad des Polynoms eindeutig definiert. Das Problem ist also den besten Polynomgrad zu finden.

Um dieses Problem zu lösen, betrachtet man, ob sich die Polynome statistisch signifikant unterscheiden. Dazu schaut man die Differenz der Polynome an und berechnet für diese gleichmäßige Konfidenzbänder. Ist die Nullfunktion vollständig in diesem Konfidenzband enthalten, ist es nicht möglich, eine Aussage über den Unterschied der Modelle zu machen. Liegt die Nullfunktion allerdings nicht vollständig im Konfidenzband, ist der Unterschied signifikant.

Die konkrete Fragestellung meiner Bachelorarbeit ist, ob die Polynome, die man durch die Daten legt, sich signifikant unterscheiden.

Es gibt zwei verschieden Datensätze. Einmal von Stammzellen die auf ein Oberfläche mit einer Härte von 10 kPa und einmal auf eine Oberfläche von 30 kPa gesetzt wurden.

Es handelt sich um Daten von 53 Stammzellen bei den 30 kPa Daten und um 51 Stammzellen bei den 10 kPa Daten. Da die Stammzellen sehr verschiedene Wachstumsraten aufweisen, werden die Mittelwerte gebildet. Plottet man nun das Mittel der relative Wachstüme gegen die Zeit entstehen folgende Graphiken. Die Berechnung für diese Graphik befindet sich in der Datei *10kPa-data.R*

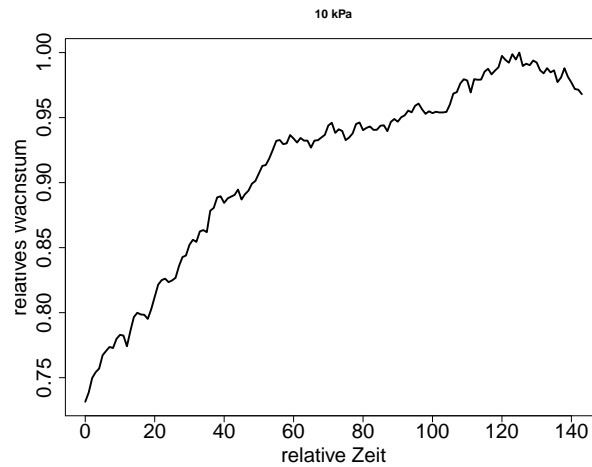


Abbildung 11: 10 kPa

Man sieht, dass ...

Die Berechnung für die folgende Graphik befindet sich in der Datei *30kPa-data.R*

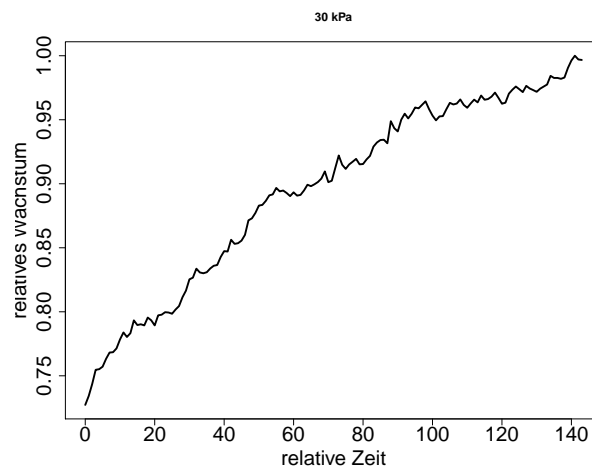


Abbildung 12: 30 kPa

Man sieht, dass ...

Da es zwischen den Daten eine Autokorrelationsbeziehung der Art $AR(1)$ gibt, muss man die Ergebnisse aus Kapitel drei anwenden.

5.2 Vergleich verschiedener Konfidenzbänder

Hier werden drei Konfidenzbänder für 30kPa Daten verglichen. Das Regressionsmodell ist ein Polynom vom Grad vier mit OLS. Das Konfidenzband auf ganz R ist ..., das Konfidenzband auf A ist ... und das die Polynomstruktur berücksichtigt ist

Die Berechnung für diese Graphik befindet sich in der Datei *30kPa-method.R*

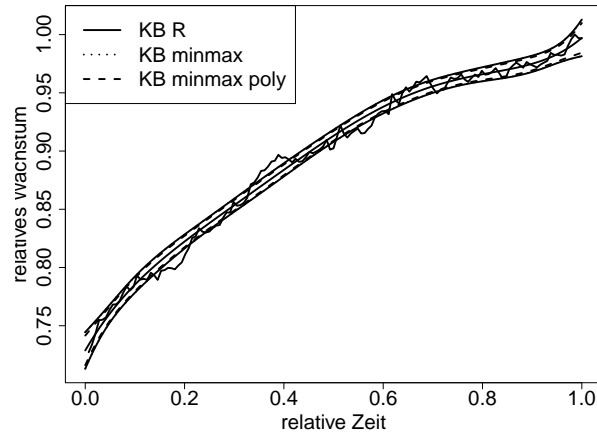


Abbildung 13: Vergleich von Konfidenzbändern 30 kPa

Man sieht, dass das Konfidenzband auf (min, max) , das die Polynomstruktur berücksichtigt, deutlich schmäler ist. Dies wird auch an der kleineren kritischen Konstante c von ... im Gegensatz zu ... deutlich.

Graphik Vergleich aller drei KBer für 10 kPa Daten

Die Berechnung für diese Graphik befindet sich in der Datei *10kPa-method.R*

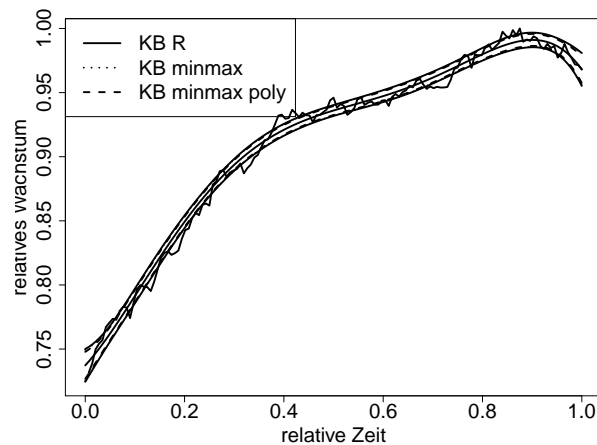


Abbildung 14: Vergleich von Konfidenzbändern 10 kPa

5.3 Vergleich von Polynomen mit verschiedenem Grad

In diesem Abschnitt werden Polynomregressionen mit verschiedenen Graden durchgeführt.

Graphik Polynome vom Grad 4,5,6 für 30 kPa Daten :

Die Berechnung für diese Graphik befindet sich in der Datei *30kPa-poly.R*

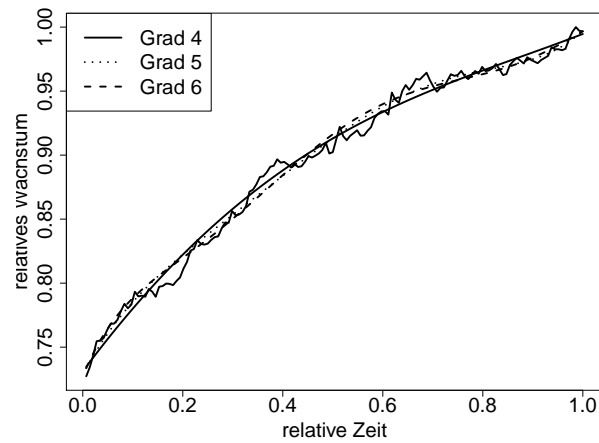


Abbildung 15: Vergleich von Regressionsmodellen

3er Graphik Vergleich von Modellen poly 4,5,6 30 kPa

Die Berechnung für diese Graphik befindet sich in der Datei *30kPa-poly-KB.R*

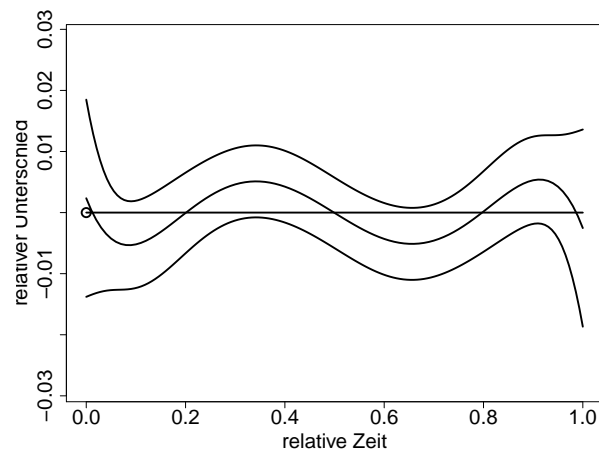


Abbildung 16: Vergleich von Regressionsmodellen

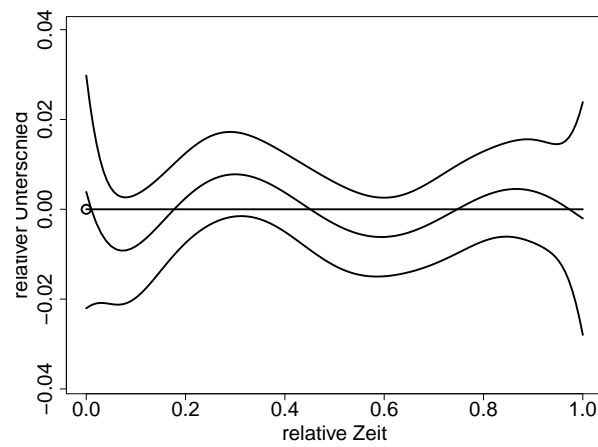


Abbildung 17: Vergleich von Regressionsmodellen

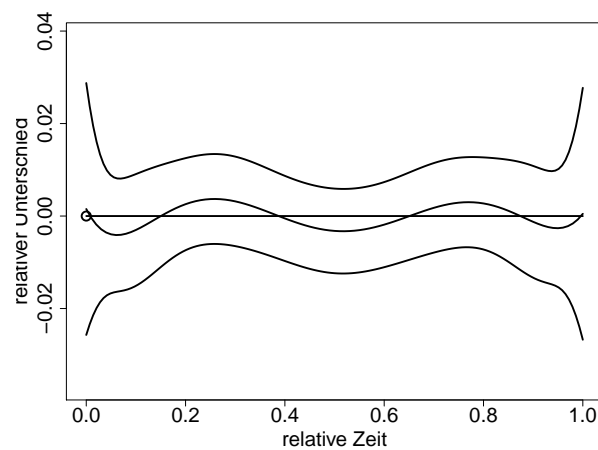


Abbildung 18: Vergleich von Regressionsmodellen

Graphik Polynome vom Grad 4,5,6 für 10 kPa Daten

Die Berechnung für diese Graphik befindet sich in der Datei *10kPa-poly.R*

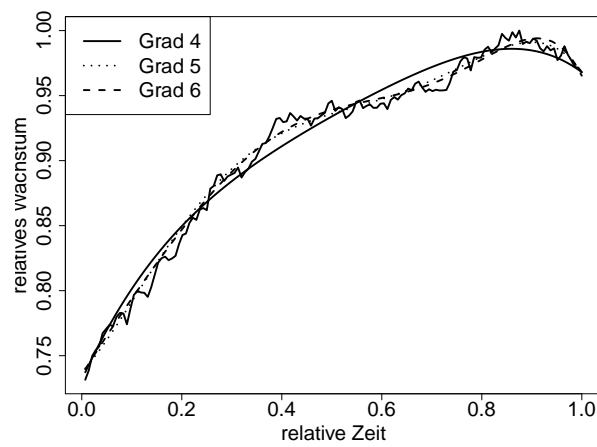


Abbildung 19: Vergleich von Regressionsmodellen

3er Graphik Vergleich von Modellen poly 4,5,6 30 kPa

Die Berechnung für diese Graphik befindet sich in der Datei *10kPa-poly-KB.R*

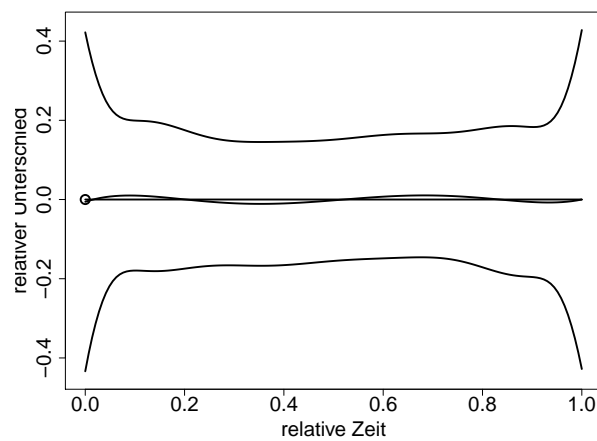


Abbildung 20: Vergleich von Regressionsmodellen 4-5

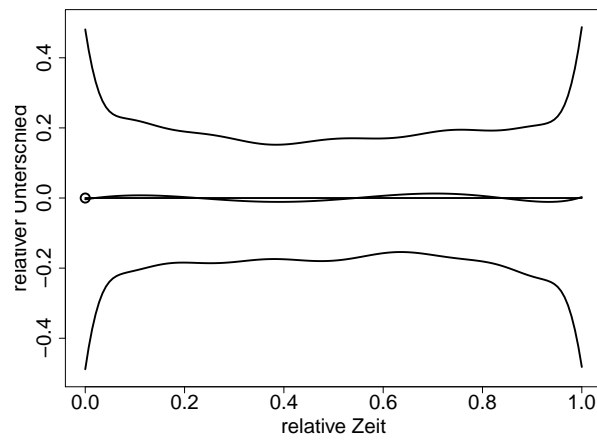


Abbildung 21: Vergleich von Regressionsmodellen 4-6

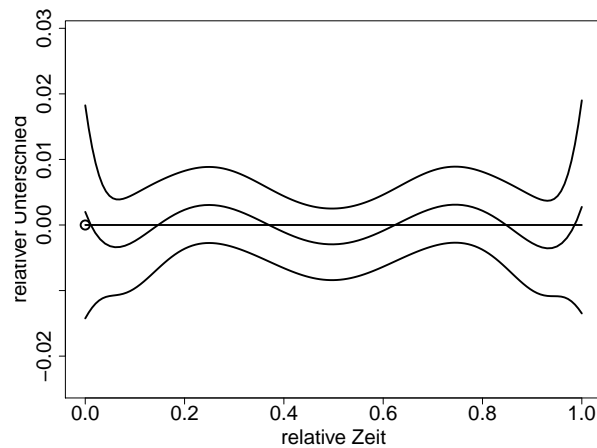


Abbildung 22: Vergleich von Regressionsmodellen 5-6

5.4 Vergleich von 10 kPa und 30 kPa Daten

Im nächsten Plot werden 10 kPa mit 30 kPa OLS Daten verglichen. Dazu werden zuerst die beiden Daten mit AR(1) Regressionsmodellen in eine Graphik geplottet.

Die Berechnung für diese Graphik befindet sich in der Datei *Vergleich-10vs30-poly5.R*

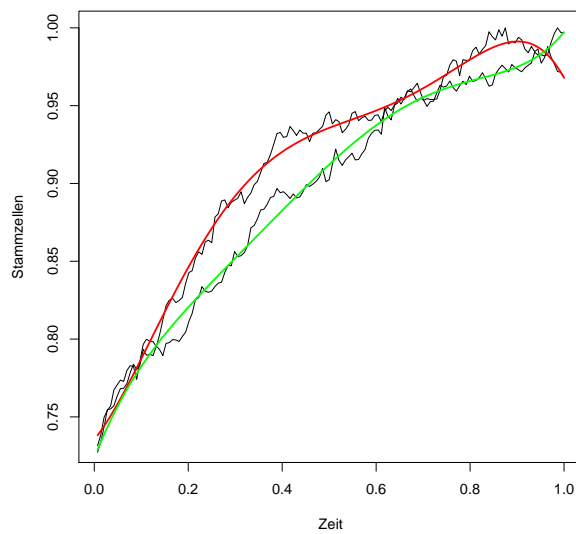


Abbildung 23: Vergleich von Regressionsmodellen

Als nächstes wird die Differenz mit Konfidenzband in einer Graphik geplottet. Die Berechnung für diese Graphik befindet sich in der Datei *Vergleich-10vs30-poly5-KB.R*

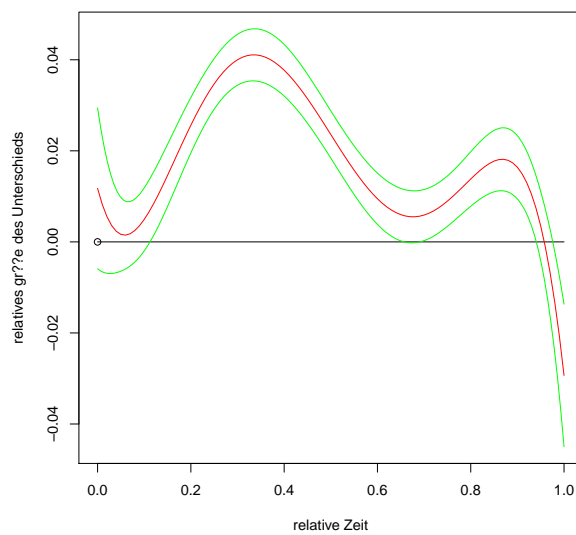


Abbildung 24: Vergleich von Regressionsmodellen

Man sieht, dass die Nullfunktion nicht komplett im Konfidenzband enthalten ist. Dies bedeutet, dass ...

5.5 Teil eines Regressionsmodells überprüfen

Die Berechnungen für diesen Abschnitt befinden sich in der Datei *05-xxkPa-pruefen*. Dabei ist *xx* entweder 10 oder 30 und die Datei ist im jeweiligen Unterordner zu finden.

In diesem Abschnitt wird getestet, ob bei einem Regressionsmodell vom Grad 5 die erste Komponente nicht signifikant, beziehungsweise ob bei einem Regressionsmodell vom Grad 6 die erste oder sogar die ersten beiden Komponenten gleich Null sind. Dazu verwendet man die Methode aus Abschnitt 3.3.

Zuerst der Grad 5:

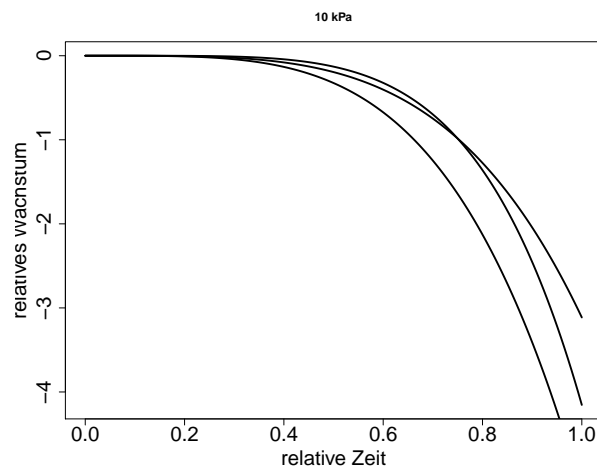


Abbildung 25: 10kPa Grad 5

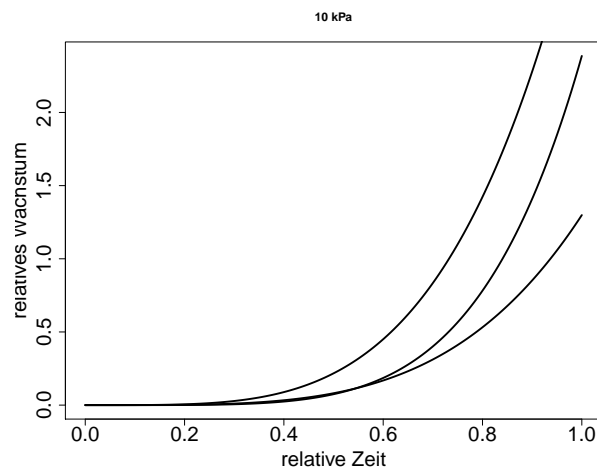


Abbildung 26: 30kPa Grad 5

Dann der Grad 6 für 30kPa:

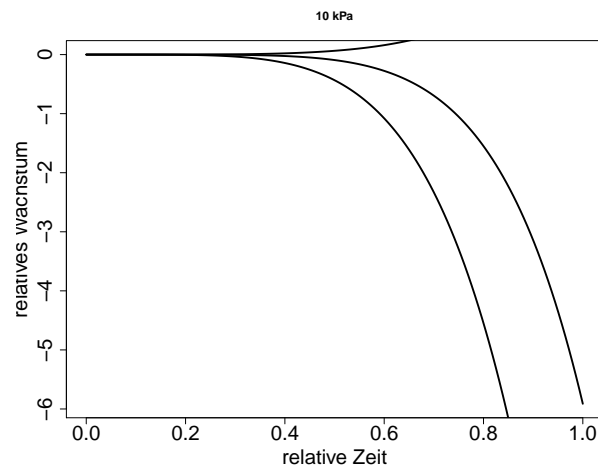


Abbildung 27: 30kPa Grad 6.1

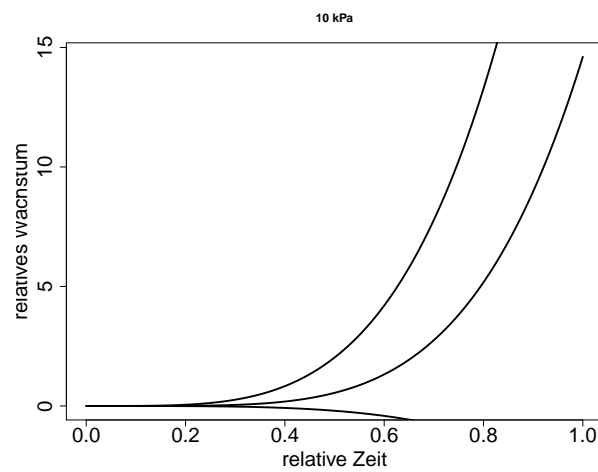


Abbildung 28: 30kPa Grad 6.2

Zum Schluss der Grad 6 für 10kPa:

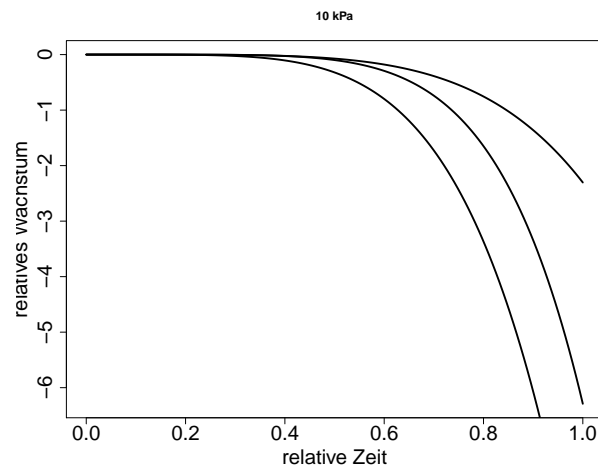


Abbildung 29: 10kPa Grad 6.1

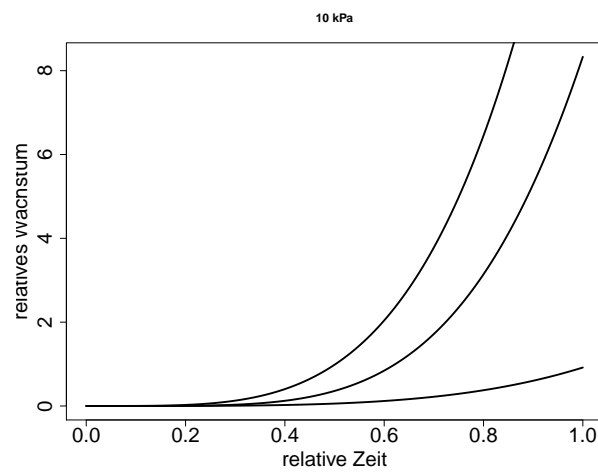


Abbildung 30: 10kPa Grad 6.2

Literatur

- [BD91] P. J. Brockwell und R. A. Davis, *Time Series: Theory and Methods*. Springer-Verlag, 1991.
- [DS98] N. Draper und H. Smith, *Applied Linear Regression, 3rd edition*. Wiley, 1998.
- [Geo09] H.-O. Georgii, *Stochastik*. de Gruyter, 2009.
- [Han15] B. E. Hansen, *Econometrics*. University of Wisconsin, 16.1.2015.
- [Hsu41] P. Hsu, *Canonical reduction of the general regression problem*. Annals of Eugenics, 1941.
- [Kri15] T. Krivobokova, »Angewandte statistik«, Skript, SS 2015.
- [Liu64] W. Liu, *Simultaneous Inference in Regression*. Taylor und Francis Group, Boca Raton, 1964.
- [LLP08] W. Liu, S. Lin und W. Piegorsch, *Construction of exact simultaneous confidence bands for a simple linear regression model*. International Statistical Review, 2008.
- [Mun13] A. Munk, »Introduction to mathematical statistics, From a practical point of view«, Skript, 29.10.2013.
- [Nai87] D. Naiman, *Simultaneous Confidence Bounds in Multiple Regression Using Predictor Variable Constraints*. Journal of the American Statistical Association, 1987.
- [PB00] J. C. Pinheiro und D. M. Bates, *Mixed-Effects Models in S and S-PLUS*. Annals of Eugenics, 2000.
- [WB71] H. Wynn und P. Bloomfield, *Simultaneous confidence bands in regression analysis*. Journal of the Royal Statistical Society, 1971.
- [ZR10] A. Zemel und F. Rehfeldt, »Optimal matrix rigidity for stress-fibre polarization in stem cells«, *Nature Physics*, 2010.

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit bestätige ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig, nur mit Hilfe meiner Betreuer und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe. Die aus fremden Quellen (einschließlich elektronischer Quellen) direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind ausnahmslos als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit ist in gleicher oder ähnlicher Form oder auszugsweise im Rahmen einer anderen Prüfung noch nicht vorgelegt worden.

Göttingen,

Henning Hause