Lecture script to Statistical learning

held by David Petroff
typeset by Daniel Mayer
University of Leipzig

November 16, 2017

1 Vorbemerkungen

Bei statistischem Lernen geht es darum intelligente Schlüsse aus Daten zu ziehen.
Es muss aber nicht unbedingt nur um Daten gehen, wobei der fokus der Vorlesunng auf die methoden zur Analyse von Daten gelegt wird..
Es wird wenig über Design von Versuchen gehen, also die Art und Konzeption der Datenerhebung zum Beispiel einer klinischen Studie etc. $\rightarrow$ hier geht es um das Werkzeug der Analyse.
Es wird einige Beispiele aus Petroffs Forschung geben, also aus klinischen Studien, aber es gibt natürlich auch Anwendungen von statistischem Lernen auf ganz anderen Gebieten.

1.0.1 beispielhafte anwendungen

Die Frage ob sich Behandlungen A und B unterscheiden
Was sind die Eigenschaften eines diagnostischen Tests (siehe: bedingte Wahrscheinlichkeiten, z.B. die Frage ' wie hoch ist die Wahrscheinlichkeit das jemand tatsächlich Hepatitis A hat, wenn ein Test positiv ausfällt')
oder: 'Gibt es einen Zusammenhang zwischen Krankheien A un B.'

1.1 Wahrscheinlichkeiten

1.1.1 Zugänge

Es gibt zwei Zugänge zu Statistik, der eine behandelt relative häufigkeiten (*frequentistische Statistik*), der andere behandelt das Maß für eine Überzeugung (*Bayes'sche Statistik*)

frequentistisch Basiert auf der Idee von wiederholbaren Experimenten (Münzwurf, radioaktiver Zerfall, Schwangerschaft bei Kontrazeptionsmethode A (Verhütung), 5 Jahres überleben nach einer Chemotherapie (aber was definieren wir als experiment?: Krebsstadium?, Krebsart?, Behandlungsdauer?), Wahrscheinlichkeit eines Regentages

etc.). Wir sehen die Idee der Wiederholbarkeit ist nicht immer einfach festzustellen. in den ersten Vorlesungen folgen wir einem Traditionellen zugang, dadurch bekommt man ein solides fundament.
Dieser Zugang wurde von Kolmogorow gelegt, die entsprechende Axiomatik der klassischen Theorie ist die *Kolmogorow Axiomatik*.
Wir werden aus zeitgründen nicht mathematisch streng sein können.

1.1.2 Das Ereignisfeld

Als *Ereignis* bezeichnet man einen möglichen ausgang eines 'Zufallsexperiments' zb: "Zahl liegt oben"' beim Münzwurf.
Ein System heißt Ereignisfeld, wenn:

1. es das Sichere und das unmögliche Ereignis enthält
2. A und B Teil eines Systems sind, dann auch
   (i) AB (auch $A \cap B$ geschrieben) " *Produkt*" von A und B bedeutet gleichzeitiges auftreten von A und B
   (ii) A+B ($A \cup B$) " *Summe*", mindestenns eines der Ereignisse A und B tritt ein
   (iii) A-B ($A \quad B$) " *Differenz*" A tritt ein, während B nicht eintritt.

Beispiel 1. Münzwurf-Ereignisfeld $\{A, B, \Omega, \emptyset\}$
wobei:
A - Zahl oben
B - Wappen Oben
Ω - Zahl oder Wappen oben
$\emptyset$ weder zahl noch wappen, oder auch: sowohl wappen als auch zahl, umfasst also ALLE unmöglichen Ereignisse

1.1.3 Gesetze der Ereignisse

Kommutativität

$$A + B = B + A$$
$$AB = BA$$

Assoziativität

$$(A + B) + C = A + (B + C)$$
$$(AB)C = A(BC)$$

Distributivität

$$A(B + C) = AB + AC$$
$$A + (BC) = (A + B)(A + C)$$

was durch die identitäten klar wird...

Identitäten

$$A + A = A$$

$$AA = A$$

wir beweisen also das distributivgesetz wie folgt:

$$(A + B)(A + C) = AA + AC + BA + BC = A + BC$$

1.2 Wahrscheinlichkeitsbegriff

Axiom 1.1. *Jedes Ereignis aus dem Ereignisfeld F ordnet man eine nichtnegative Zahl p(A) zu, die Wahrscheinlichkeit.*

Axiom 1.2. $P(\Omega) = 1$

Axiom 1.3. *Sind Ereignisse A_i unvereinbar, ie $A_i A_j = \emptyset$ für $i \neq j$), so ist $P(A_1, A_2, \cdots, A_n) = P(A_1) + P(A_2) + \cdots + P(A_n)$, und es gelten folgende Eigenschaften für Wahrscheinlichkeiten:*

(a) $P(\emptyset) = 0$

(b) $P(\overline{A}) = 1 - P(A), \quad \overline{A} := \Omega - A$

(c) $0 \leq P(A) \leq 1$

(d) Für $A \subset B$ (A ist teilmenge von B) folgt $P(A) \leq P(B)$

(e) $P(A + B) = P(A) + P(B) - P(AB)$

(f) $P(A_i + A_2 + \cdots + A_n) \leq P(A_1) + P(A_2) + \cdots + P(A_n)$

1.2.1 Bedingte Wahrscheinlichkeiten

Die Wahrscheinichkeit von A unter der Bedingung dass B eingetreten ist schreibt man $P(A|B)$

$$P(A|B) := \frac{P(AB)}{P(B)} \tag{1}$$

Motivation: gegeben seien n unvereinbare gleichwahrscheinliche Ereignisse $A_1, A_2, \ldots A_n$ mit m günstig für A, k günstig für B, und r günstig für AB:

$$P(A|B) = \frac{r}{k} = \frac{r/n}{k/n} = \frac{P(AB)}{P(A)} \tag{2}$$

Beispiel 1. Zwei würfel werden geworfen. Wie groß ist die Wahrscheinlichkeit, die Summe 8 zu erhalten (Ereignis A), falls bekannt ist, dass die summe grade ist (Ereignis B)

$$P(A) = 5/36 \quad P(B) = 1/2, \quad P(AB) = 5/36, \quad P(A|B) = \frac{P(AB)}{P(B)} = 5/18$$

1.2.2 Bayes'sche Formel

Seien $A_1, A_2, \dots, A_n$ unvereinbar, So kann man die bedingte Wahrscheinlichkeit schreiben als:

$$P(A_i|B) = \frac{P(B|A_i)P(A_i)}{\sum_{j=1}^{n} P(B|A_j)P(A_j)} \tag{3}$$

mit $\bigcup A_i = \Omega$ *(das wurde nachträglich eingefügt)*

1.2.3 Diagnostische Verfahren - Anwendung von bedingter Wahrscheinlichkeit

Es seien D^+, D^- zwei Mögliche Krankheitszustände (Diseases, wobei krank D^+ ist) und T^+, T^- die zwei moglichen Ergebnisse eines diagnostischen Tests (bei Tests wie einem Schwangerschaftsstest macht Binarität Sinn, bei Tests wie dem von Leberwerten, ist die Binariät(ob sinnvoll oder nicht), durch eine Grenzziehung hergestellt.)
So bezeichnet man
$P(D^+)$ als die **Prävalenz** (Wahrscheinlichhkeit krank zu sein),
$P(T^+|D^+)$ die **Sensitivität**, sowie
$P(T^-|D^-)$ als die **Spezifität**.
$P(D^+|T^+)$ heißt der **positiv pediktiver Wert** (PPV) also die Wahrscheinlichkeit das der Patient krank ist wenn der test positiv ausfällt, sowie
$P(D^-|T^-)$ der **negativ prediktiver Wert** (NPV), also die Wahrscheinlichhkeit, dass ein negativer Test tatsächlich bedeutet, dass der Patient gesund ist.

1.3 Zufallsvariablen und Verteilungsfunktionen

qualitative beschreibung aus Gnedenko:
'eine Zufallsgröße, (auch Zufallsvaiable) ist eine Größe, deren Wert vom Zufall abhängen, und für die eine Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion existiert'
Jedem Elemetarereignis (unzerteilbar) $\omega \in \Omega$, wird eine reele Zahl zugeordnet:
$X = X(\omega) : \Omega \to \mathbb{R}$.
$F_x(t) := P(X < t)$ wird als Verteilungsfunktion der Zufallsgröße x definiert. Sie ist monoton nicht fallend, linksseitig stetig und gehorcht den Bedingungen: $F(-\infty) = 0 \quad F(\infty) = 1$
umkehrung: jede solcher funktionen lässt sich als Verteilungsfunktion einer Zufallsgröße deuten.

1.4 Wichtige Verteilungsfunktionen

Binomialverteilung

$$P_n(m) = \binom{n}{m} p^m q^{n-m} \tag{4}$$

wobei $q := 1 - p$

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x \leq 0 \\ \sum_{k<x} P_k & \text{for } 0 < x \leq n \\ 1 & \text{for } x > n \end{cases} \tag{5}$$

Poisson Verteilung

$$\begin{aligned} P_n &= \frac{\lambda^n e^{-\lambda}}{n!}, \quad \lambda > 0 \\ F_x(t) &= \sum_{k=0}^{t} \frac{\lambda^k}{k!} e^{-\lambda}, \quad t \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N} \end{aligned} \tag{6}$$

Normalverteilung

$$F(x) = \Phi(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty} x e^{\frac{-(z-a)^2}{2\sigma}} dz \quad \sigma > 0 \tag{7}$$

1.5 1.5 Erwartungswer, Varianz und weitere Momente

Erwartungswert $E(X)$ einer Zufallsgröße.
diskret:

$$E(X) = \sum_i x_i P_i$$

Beispiel 1. Würfel

$$E(X) = \frac{1}{6} \sum_i i = \frac{21}{6} = 7/2$$

Beispiel 2. Binomialverteilung

$$E(X) = \sum_{k=0}^{n} k P_n(k) = \sum k \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

Nebenrechnung:

$$k\binom{n}{k} = \frac{kn!}{k!(n-k)!} = \frac{n(n-1)!}{(k-1)!((n-1)-(k-1))!} = n\binom{n-1}{k-1}$$

Deshalb:

$$E(x) = n \sum_{k=1}^{n} \binom{n-1}{k-1} p^k (1-p)^{n-k} = np \sum_{k=i}^{n} p^{k-1} (1-p)^{n-k}$$

neue indizes: $k' = k-1, \quad n = n-1$

$$E(X) = np \underbrace{\sum_{k'=0}^{n'} \binom{n}{k} p^{k'} (1-p)^{n'-k'}}_{=1}$$

thusly:

$$E(X) = np$$

(die varianz braucht eine ähnliche herleitung)
stetiger fall:

$$E(X) = \int x p(x) dx$$

wobei $p(x)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte ist.

Beispiel 3. Wahrscheinlichkeitsverteilung auf dem intervall $[a, b]$

$$E(X) = \frac{1}{b-a}\int_a^b x dx = \left[\frac{1}{2(b-a)}x^2\right]_a^b = \frac{b^2-a^2}{2(b-a)} = \frac{1}{2}(b+a) \tag{8}$$

Beispiel 4. Normalverteilung:

$$E(X) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-(x-a)^2/2\sigma^2} dx$$

substitute $x' = \frac{x-a}{\sigma}$ thus:

$$x = \sigma x' + a, \quad dx = \sigma dx' \tag{9}$$

$$E(X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int (\sigma x' + a) e^{-x'^2/2} dx' \tag{10}$$

ungerade funktion ergibt 0

$$E(X) = \frac{a}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-x^2/2} dx' = a$$

1.5.1 Varianz (auch Dispersion)

$$V(X) = E\left[(X - E(X))^2\right]$$

diskret:

$$V(X) = \sum_i [X_i - E(X)]^2 P(X_i)$$

Stetig:

$$V(X) = \int \left(x - E(X)\right)^2 p(x) dx$$

repetition of last class:

somehow cryptic, there might be something missing...

$$iP_n(i) = npP_{n'}(i') \tag{11}$$

$$E(X) = \sum_{i=1}^{n} iP_n(i) \tag{12}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} iP_n(i) = np\sum_{i'=0}^{n'} P_{i'} = np \tag{13}$$

$$V(x) = \sum_{i=0}^{n}(i-np)^2 P_n(i) = (np)^2 \underbrace{\sum_{i=0}^{n} P_n(i)}_{=1} - 2np \underbrace{\sum_{i=0}^{n} iP_n(i)}_{=np} + \sum_{i=1}^{n} i^2 P_n(i) \tag{14}$$

$$\begin{aligned}\Rightarrow \quad V(X) &= \sum_{i=1}^{n} i^2 P_n(i) - (np)^2 = \sum_{i=1}^{n} (i-1+1) i P_n(i) - (np)^2 \\ &= np \sum_{i'=0}^{n'} (i'+1) P_{n'}(i') - (np)^2 \\ &= np \left(\sum_{i'=0}^{n'} i' P_{n'}(i') + \sum_{i'=0}^{n'} P_{n'}(i') \right) - (np)^2 \\ &= np(n'p+1) - (np)^2 = np\left((n-1)p+1\right) - (np)^2 = np(1-p)\end{aligned} \tag{15}$$

Beispiel 5. Würfel:

$$V(X) = \frac{1}{6}\sum_{i=1}^{6}(i-\frac{7}{2})^2 = \frac{1}{3}\sum_{i=1}^{3}(i-\frac{7}{2})^2 = \frac{1}{3}\left[(\frac{5}{2})^2 + \left(\frac{3}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2\right] = \frac{35}{12} \tag{16}$$

Beispiel 6. Uniformfverteilung $[a, b]$

$$V(X) = \frac{1}{b-a}\int_a^b x^2 dx - \left(\frac{(b+a)}{2}\right)^2 = \frac{b^3-a^3}{3(b-a)} - \frac{(b+y)^2}{4} = \frac{(b-a)(b^2+a^2+ab)}{3(b-a)} - \frac{(b-a)^2}{4} \tag{17}$$

$$= \frac{1}{12}(4b^2+4a^2+4ab-4b^2-6ab-3a^2) = \frac{1}{12}(b^2+a^2-2ab) = \frac{(b-a)^2}{12} \tag{18}$$

1.5.2 Gewöhnliches Moment

Wir bezeichnen m_k als das gewöhnliche Moment (oder auch Anfangsmoment) k-ter Ordnung

$$m_k := E(X^k) \quad \text{diskret also } \sum_i (x_i)^k p_i \quad \text{und stetig: } \int x^k p(x) dx \tag{19}$$

Das Zentrale moment (auf das Znetrum $E(X)$ bezogen) k'ter ordnung ist

$$\mu_k := E\left[(X - m_1)^k\right] \tag{20}$$

Die Varianz ist also das zweite Zentralmoment:

$$V(X) = \mu_2 = m_2 - (m_1)^2 \tag{21}$$

man kann immer μ_k durch $m_l \quad (l \leq k)$ ausdrücken

1.6 1.6 Korrelation

Eine Erweiterung dieser Momente stellt die *Kovarianz* dar:

$$b(X,Y) := E\left[(X - E(X))\,(Y - E(Y))\right] \tag{22}$$

Sie ist das gemischte Zentralmomente zweiter Ordnung.
Es gilt Offensichtlich:

$$b(X,X) = V(X) \tag{23}$$

Die normierte Größe $\rho(X,Y) := \rho_{X,Y} = \frac{b(X,Y)}{\sqrt{V(X)V(Y)}}$ bezeichnet man als Korrelationskoefffizient.
Es gilt: $-1 \leq \rho \leq 1$.
Für $X = Y$ gilt $\rho = 1$ und
für $X = -Y$ gilt $\rho = -1$.
Falls X und Y unabhängig sind, dann gilt $\rho = 0$
(aber nicht notwendigerweise umgekehrt, die abhängigkeit könnte nichtlienar sein, aber generelle unabhängige funktionen sind natürlich aud linear unabhängig)

Anwendung auf Wahrscheinlichkeiten

$$E(X) = p_x \tag{24}$$

$$V(X) = p_x(1 - p_x) \tag{25}$$

$$\rho_{x,y} = \frac{p_{x,y} - p_x p_y}{\sqrt{p_x(1-p_x) + p_x(1-p_y)}} \tag{26}$$

$$\Rightarrow \quad p_{xy} = p_x p_y + \rho_{x,y}\sqrt{p_x(1-p_x)p_y(1-p_y)} \tag{27}$$

grenzfälle: $\rho = 0$: $p_{xy} = p_x p_y$
$\rho = 1$: dann $p_{xy} = (p - x^2 + p_x(1 - p_x) = p_x$
$\rho = -1 \quad (p_x = 1 - p_y) \Rightarrow p_{xy} = P_x(1 - p_x) - p_x(1 - p_x) = 0$

1.7 1.7 Einige Wichtige Sätze der Wahrscheinlichkeitstheoorie

Gesetz der Großen Zahlen Bernoulli: Für alle $\epsilon > 0$

$$\lim_{n\to\infty} P\left\{|\frac{\mu}{n} - p| < \epsilon\right\} = 1 \tag{28}$$

Wobei μ Anzahl der Ereignisse, n Anzahl der Versuche, p Wahrscheinlichkeit des Ereignisse
(streng mathematisch ist das nicht korrekt sondern bedarf erst noch einem Beweis den Borel wesentlich später gemacht hat, siehe Literatur)
Tschepyschew:
(man kennt ihn in der Informatik wegen der Tschebischew polynome)
für alle $\epsilon > 0$

$$\lim_{n\to\infty} P\left\{|\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} E(X_i)| < \epsilon\right\} = 1 \tag{29}$$

für eine Folge paarweise verschiedener unabhängiger Zufallsgrößen $\{X_i\}_{i=1,2,\ldots,n}$ mit gleichmäßig beschränkter varianz: $\forall i \quad V(X_i) \leq C$

1.7.1 Lokaler Grenzwert von Movre Laplace

Sei $0 < p < 1$ die Wahrscheilichkeit eines ereignisses, dann wissen wir: In n versuchen gilt, $P(n) = \binom{n}{m} p^m (1-p)^{n-m}$ so gilt:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{\sqrt{np(1-p)}P_n(m)}{\frac{1}{2\pi}e^{-\frac{x^2}{2}}} \to 1 \quad \text{mit } x = \frac{m-np}{\sqrt{np(1-p)}} \tag{30}$$

man normiert die binomialverteilung und im grenzfall wird sie zutt normalverteilung.

1.7.2 Zentraler Grenzwertsatz

Sei $S_n = \sum_{i=1}^{n} X_i$ mit $E(X_i) < \infty, V(X_i) = \sigma^2 \leq \infty$
so gilt für jedes t

$$\lim_{n\to\infty} P\left(\frac{S_n - nE(X_i)}{\sqrt{\pi}\sigma} < t\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{t} e^{-\frac{x^2}{2}} dx \tag{31}$$

also die folge der verteilung der standartisierten zufallsgrößen konvergiert gegen die Standartnormalverteilung, das heißt a=0, $\sigma = 1$

2 Deskriptive Statistik

Eine Beschreibung von Daten und Kohorten ist zentral für das Verständnis einer Arbeit (Veröffentlichung)
Ziel ist es mit wenigen Kenngrößen das Wesentliche zu charaktersisieren.
dazu gibt es 'Punktschätzer' für Erwartungswerte und Konfidenzintervalle (KI engl. CI) als Maß für die Genauigkeit der Schätzung.
was ist ein Konfidenzintervall

$$KI[a,b]: \quad P(a \leq \Theta \leq b) = 1 - \alpha \tag{32}$$

Man will schätzen wie groß die Wahrscheinlichkeit eines Erwartungswertes ist.

2.1 Ein Merkmal

Nominale und Ordinale Größen Es gibt größen dsich ordnen lassen (**nominale Größe**) wie zum beispiel das alter oder die größe,aber auch eigenschaften die sich *nicht* ordnen lassen, wie zum beispiel bei einer genetischen arbeit die herkunft von Menschen (**nominale Größe**)

absolute und relative häufigkeiten. (zb Häufigkeitstabellen)
meist ist es gut etwas graphisch darzustellen:
Balkendiagramme, oft mit Konfidenzintervall oder Standartfehler (KI und SE(standarterror))
Kreisdiagramm(in den fachzeitschriften verpönt, weil man schlecht einschätzen kann ob etwas 20 oder 30 prozent ist, klarer ist hier ein balkendiagramm.

2.1.1 Metrische Daten

Lagemaß:

als Mittelwert (arithmetsich ($\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$) oder geometrisch(dh log-Skala)($\left[\prod_{i=1}^{n} x_i\right]^{\frac{1}{n}}$)
- übliche und 'robuste' Methoden (zb wenn ein wert stark abweicht sonst aber alles ähnlich ist, ist der mittelwert mit der log scala
- Median und andere Quantile(verschiedene Schätzverfahren)

2.1.2 streumaß

standartabweichung ("sample Method") $sd^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2$
mit $\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$
- Interquartilabstand (enl IRQ) 25 und 75 perzentil
- Spannweite(int nicht wirklich ein streumaß, wird aber oft zusätzlich verwendendet)
graphisch : Histogramm, Boxplot

2.2 Zusammenhang Zweier Merkmale

bei nominalen Größen arbeitet man oft mit Kontingenztafel: odds ration, relatives risiko. Graphisch auch: forest plots bei metrischen grüßen: Korrelationskoeffizient (min KI) , Streudiagramm

2.3 Simplsons Paradoxon

grundidee: ein effekt den ma in der gesamtgruppe sieht muss nicht "echt" sein, er kann in subgruppen anders ausfallen.

Beispiel 1.

	A	B
Erfolg	70 (30%)	50 (22%)
Misserfolg	160 (70 %)	182 (82%)
	230	232

Hier würden wir sagen dass Gruppe A besere Ergebnisse hat als Gruppe B.
Wenn wir aber nun den Datensatz genauer betrachten und zwischen Männern und Frauen unterscheiden, ergibt sich ein anderes Bild:

		A	B
Männer	Erfolg	7 (20%)	45 (20%)
	Misserfolg	28 (80 %)	45 (20 %)
Frauen	Erfolg	63 (32 %)	5 (33%)
	Misserfolg	132 (68%)	10 (67%)

Hier sehen wir, dass die Aussage für Männer auf alle Fälle Falsch ist, es für Frauen keine Unterschied zwischen den beiden Gruppen gibt.

3 Statistisches Testen

3.1 Die Logik des Testens

Die Analogie zum beweis durch widerspruch kann hilfreich sein, hier ein beispiel:
was ist nun der zusammenhang zwischen dem ergebnis des testens und der wahrheit der 0 hypothese?

3.2 Der T-test

Vergleich zweier Mittelwerte $H_0 : \mu_1 = \mu_2$
wir schätzen die "t-statistik" (annahme gleicher varianz)

$$T = \frac{\overline{x}_1 - \overline{x}_2}{s\sqrt{\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}}}, \quad \text{wobei} \quad s^2 = \frac{(n_1 - 1)s_1^2 + (n_2 - 1)s_2^2}{n_1 + n_2 - 2}$$

statistisches testen	Beweis durch Widerspruch
annahme $H_0 : \mu_1 = \mu_2$ i.e. Mittelwert der Gruppe 1 ist gleich dem Mittelwert der Gruppe 2	Annahme $\sqrt{(2)}$ ist rational
man glaubt nicht an Annahme	man glaubt nicht an Annahme
Folge: man nimmt an dass Annahme stimmt	wenn die Annahme stimmt:...
kommt etwas sehr unwahrscheinliches raus so ist die annahme nicht plausibel (korrelation < 5% H_0 wird abgelehnt	kommt man auf einen Widerspruch, so so muss die Annahme Falsch sein
kommt was plausibles raus, so weiß man wenig über die annahme, das Konfidenzintervall kann helfen	kommt man nicht auf einen Widerspruch, so weiß man ein wenig mehr über die Annahme

	H_0 stimmt	H_0 Stimmt nicht
H_0 abgelehnt	Typ I Fehler, α (korrelation $\alpha \leq 0.05$)	Power: $1 - \beta$
H_0 nicht abgelehnt	alles so wie gewollt	Typ II Fehler , β, Planung: $\beta = 0.1$ oder 0.2 anstrebt ...Sicherheit über β hat man nicht

mit n_i der stichprobengröße der i-ten gruppe $\overline{x}_i$ Mittelwert $\frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n} X_j^{(i)}$
$s_i^2 = \frac{1}{n_i - 1} \sum_{j=1}^{n} (X_j^{(i)} - \overline{X}_i)^2$
($T = \frac{\Delta x}{SE}$ ist die grundlegende Struktur
unter H_0 : T hat "t-Verteilung" mit freiheitsgraden $f = n_1 + n_2 - 2$

Im gegensatz zum normalen T-Test gibt es eine Variante des T-Tests, den Welch test, der keine Annahme über die Gleichhheit der Varianz annimmt.
T-Verteilung mit f Freihietsgraden

$$T = \frac{\overline{x}_1 - \overline{x}_2}{\sqrt{\frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2}}} \quad f = \frac{(\tilde{s}_1^2 + \tilde{s}_2^2)^2}{\frac{\tilde{s}_1^4}{n_1 - 1} + \frac{\tilde{s}_2^4}{n_2 - 1}} \quad \tilde{s}_i = \frac{s_i}{n_i}$$

Konfidenzintervall für $\Delta\mu$:

$$\Delta\overline{x} \pm \underbrace{t_{\alpha/2,f}}_{\approx 2 \text{für } \alpha = 0} \; SE$$

pWert : wahrscheinlichkeit den wert T zu beobachten unter H_0
ist der p-Wert p_0 so beinhaltet ein $(1 - p_0)$-KI gerade so den Wert Null.
zB ist $P = 0.05 \quad \Rightarrow$ das 95% KI interval erreicht die 0 grade so.
gegeben sei:
wobei wir die notation $n_{\cdot j} = \sum_i n_i j$ verwenden

	A	B	
I	n_{11}	n_{12}	$n_{1\cdot}$
II	n_{21}	n_{22}	$n_{2\cdot}$
	$n_{\cdot 1}$	$n_{\cdot 2}$	$n_{\cdot\cdot}$

$\frac{n_{11}}{n_{21}}$ schätz das Oddss (die chance von "I" im Vergleich zu "II" bei der gruppe A)

$$\hat{OR} = \frac{n_{11}}{n_{21}} / \frac{n_{21}}{n_{22}}$$

schätzt das odds ration (chancenverhältnis) KI:$\hat{OR}e^{Z_{\alpha/2}SE}$ hier sit die frage ob f im intervall (null auf der log scala)
(fisher test $\Leftrightarrow$ KI von OR (mit anderer schätzmethode allerdings)
Fisher-Test heißt "exakt" , da ein strenger wert aus kombinatorik berechnet wird

$$P = \frac{\binom{n_{1\cdot}}{n_{11}}\binom{n_{2\cdot}}{n_{22}}}{\binom{n_{\cdot\cdot}}{n_{\cdot 1}}}$$

wiir sind skeptisch, da wir eine symmetrische formel erwarten amer der nenner nicht sy,metrisch ist, wir stellen aber fetst das

$$\binom{n_{\cdot\cdot}}{n_{\cdot 1}} = \binom{n_{11} + n_{22} + n_{12} + n_{21}}{n_{11} + n_{21}}$$

Teil von Kristin Reiche

4 Lineare regressiionsmodelle

- einfache lineare regressionsmodelle
- Multivariable lineare regressionsmoldelle
- Vorraussetztungen für lineare Regressionsmodelle
- Generalisierte lineare regressionsmodelle (GLM)
- Auswertung von expressionsmodellen

Answendungen sind:
Molekularbiologische Hochdurchsatzdaten of ist die anzahl der Vriablen/elemente deutlich größer als die Anzahl der messunngen, (z.B. Genom $\rightarrow$ SNP, Epigenom , Transkriptom $\rightarrow$ RNA content in einer Zelle (oder öter einem Pool von Zellen) Das ziel der statistischen nmethode ist das Messen der Werte einer Zielvariablen in abhängigkeit von unabhängigen variablen (sogenannten kovariablen)

Definition 1. Ein statistisches Modell stellt eine Zielvariable die meist mit Y angegeben wird in Beziehung zu einer oder mehreren Kovariaten(Kovariablen)
Zielvariable = Modell(Kovariante) + Fehler

$$Y = f(X) + \varepsilon$$

Y ist hier die Zielvariable oder auch abhängige variable.
X sind Kovariaten oder auch unabhängige variablen.
$f(X)$ ist die unbekannte Funktion die den systematischen effekt von X auf Y modelliert
ε ist der Zufällige fehler . gibt den anteil der Varianz von Y an der nicht durch f(x) erklärt wird
$\Rightarrow$ Statistische modelle zerlegen die Zielvariablen in einen systematischen ($f(X)$) und zufälligen Teil (ε).

4.1 Anwendungen von statistischen Modellen

Inferenz: Ziel ist es die Art des Zusammenhanges zwischen X udn Y zu verstehen
Genauer: Wie ändert sich Y als funktion von X.

Vorhersage: Ziel ist es den Wert von Y so genau wie möglich vorherzusagen. (hier ist es nicht unbedingt von Interesse die (exakte) Form von $f(X)$ zu kennen.

4.1.1 Schätzen der Funktion $f(X)$

$f(X)$ wird anhand eienr statistischen lernmethonde von einer Menge von trainingsdaten geschättz.
Die geschätzte Funktion wird mit $\hat{f}(X)$ angegeben:

$$Y = \hat{f}(X) + \varepsilon$$

für trainingsdaten $(X, Y) = \{(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\}$ mit n Beobachtungen.
wenn trainingsdaten in tupeln angegeben sind sprechen wir von überwachtem lernen.
Wir differenzieren in zwei verschiedene Srtatistische Lernmethoden:

(i) Parametrische Methoden: Für die funktion $f(X)$ wird eien bestimmte form angenommen.

   (a) Anzahl der kovariablen wird vorab festgesetzt oder mittels vefahren der Modellselektion ausgewählt (erklärung folgt später).

   (b) Es werden für die Kovarablen geschätzt

   Nachteil isst weniger flexibilität und das das modell oft nich der wahren form des zusammenhags entspricht.
   Vorteil ist das nur Gewichte für Kovariablen geschätzt werden müssen dafür reicht reicht eine geringere stichprobengröße aus.

(ii) Nichtparametrische methoden: es Wird keine Bestimmte form für $f(X)$ vorab angenommen Es musss die form und die parameter für eine Beliebig komplexe funktion $f(X)$ anhand der trainigsdaten geschätzt werden.
   Diese Modelle sind oft sehr flexibel aber auch weniger gut interpretierbar. Oftmals ist ein größerer Stichprobenumfang notwendig.

4.1.2 lineare Regressionsmodelle

Als Form für $f(X)$ wird ein (annähernd) linearere Zusammenhang angenommen. Zufallsvariable Y nimmt dabei quantitative werte an
Kovariable X_i (mit $i = 1, \dots, P$ anzahl der Kovariablen) können quantitative oder qualitative Werte annnehmen.

4.1.3 einfachen lineares regressionsmodell

Definition 2. Ein Statistisches Modell was den Wert der Zielvariablen auf basis der werte einer einzigen Kovariable X , unter der annahme eines linearen Zusammenhanges moddeliert .

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon$$

β_0 ,mittelwert von Y falls es keinen zusammenhang gibt, sonst Schnittpunkt der y-achse
β_1 ist der Effekt der Kovariablen X auf Y, also der Anstieg in Y wenn X sich eine einheit erhöht (regressionskoeffizient).
ε Fehler $\varepsilon \approx N(0, \sigma^2)$ (notation: "folgt einer normalverteilung); N ist die normalverteilung mit in der form $N(\mu, \sigma^2)$
anteil von Y der nicht duch $\beta_0 + \beta_1 X$ erklärt werden kann

4.2 annahme für zufällige störgrößen

(a) Alle störungen haben die gleiche Varianz (Homoskadiszität)

$$Var(\varepsilon_i) = \sigma^2$$

(b) alle störungen sind um 0 verteilt

$$E(\varepsilon_i = 0$$

$\Rightarrow$ einflüsse der Störgrößen heben sich im Mittel auf , dh haben keinen systematischen einfluss auf Y

(c) Störgrößen sind unabhängig untereinander:

$$Cor(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0 \text{ für } \quad i \neq j$$

4.3 Varianzdekomposition

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - \overline{y} = \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - \overline{y})^2}_{r\text{erklärbare Varianz}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - y_i)^2}_{\varepsilon = \hat{y}_i - y_i \text{nicht erklärbare Varianz}}$$

4.3.1 schätzung der parameter β_0 und β_1

Methode der kleinsten quadrate : reduziere die differenz zischen werten der zufallsvariablen y_i und den vorhergesagten werten $\hat{y}_i$ für alle beobachtungen n .

$$RSS : \sum_{i=1}^{n}(y_1 - \hat{y}_i)^2 \to \min = \sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 X_i)^2 \to \min$$

$$\beta_0 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y}}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x}} = \frac{Cor(X,Y)}{Var(X)}, \quad \beta_0 = \overline{y} - \widehat{\beta}_1 \overline{x}$$

4.4 lecture of tuesday 2017-11-14 missing

5 Teil von Andreas Kühnapfel

andreas.kuehnapfel@imise.uni-leipzig.de
raum 212

5.1 Nichtlineare regression

5.1.1 rückblick: lineare Regression

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i^{(1)} + \cdots + \beta_k x_i^{(k)} + \varepsilon_i \quad i \in \{1, \dots, n\}$$

wobin n die anzahl der messungen, k die Anzahl der kovariablen, $x_i^{(j)}$ weret der kovariablen j von Individuum i, ε_i zufällige störung mit $e_i \tilde{N}(O, \sigma^2), \sigma^2 > 0$, β_j sind die unbekannten(wahren) zuu schätzenden parameter.
$\Rightarrow$ β_j müssen geschätzt werden.
Das geht mit der "kleinste quadrate methode"

$$\sum_{i=1}^{n} \left(Y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i^{(1)} + \cdots + \beta_k x_i^{(k)} + \varepsilon_i\right)^2 \overset{\beta_0,\dots,\beta_k \in \mathbb{R}}{\rightarrow} \min$$

Häufig gibt es aber nichtlineare zusammenhänge zwischen den abhngigen und unabhangigen variablen, manchmal sind diese auch aus dem theoretischen wissen oder empirischen beobachtung bekant.
manchmal ist der wertebereich beschränkt, zb $R = [0, 1]$ dann führt eine nichtkonstante linere regression zu werten größe reins oder kleiner 0.
manchmal hat man einen diskreten wertebereich, z.B. $R = \{0, 1\}$ (dichotome zielgruppe)

5.2 Modell

$$Y_i = \underbrace{h}_{Funktion, i.A. nichtlinear}(\overbrace{x_i^{(1)}, \dots, x_i^{(k)}}^{kovariablen}; \underbrace{\vartheta_i, \dots, \vartheta_p}_{unbekannte Parameter}) + \varepsilon_i$$

man bemerke das p nicht notwendigerweise gleich k ist.

5.2.1 Beispiele

Biochemischer Sauerstoffverbrauch in Mikroorganismen.

$$h(x, \vartheta_1, \vartheta_2) = \vartheta_1(1 - \exp(-\vartheta_2 x$$

Cobb Douglas Funktion:

$$h(x^{(1)}, x^{(2)}; \vartheta_1, \vartheta_2, \vartheta_3) = \vartheta_1 (x^{(1)})^{\vartheta_2} (x^{(2)})^{\vartheta 3}$$

Pllynomiale regression:

$$h(x;\vartheta_0,\vartheta_1,\vartheta_2,\dots,\vartheta_p)=\vartheta_0+\vartheta_1 x+\vartheta_2 x^2+\cdots+\vartheta_p x^p$$

prizipiell alles möglich
Wahl entscheidung anhan des wissens über das problem

5.3 Linearisierung

Manchmal lässt sich die Funktion h in einen Ausdrcukl umwandeln, welcher linear in den transformierten variablen ist.
$\rightarrow$ wir könnne dann wieder eine lineare regression anwenden.

Beispiel 1.

$$h(x;\vartheta_1,\vartheta_2)=\vartheta_1 x^{\vartheta_2}$$

$\Rightarrow$

$$log(h(x;\vartheta_1,\vartheta_2))=\log(\vartheta_1)+\log x^{\vartheta_2}$$

analog:

$$=log\vartheta_1+\vartheta_2 log(x)$$

$$\tilde{h}=\tilde{\vartheta}_1+\tilde{\vartheta}_2\tilde{x}$$

Lineare regression: $\tilde{Y}_i:=logY_i\Rightarrow\tilde{y}_i=logY_1=\tilde{h}(\tilde{x}_1;\tilde{\vartheta}_1,\tilde{\vartheta}_2)+\varepsilon_i=\tilde{\vartheta}_1+\tilde{\vartheta}_2\tilde{x}_i\varepsilon_i$
aber $\varepsilon_i\tilde{N}(0.\sigma^2)\quad\sigma^2=2$ unabhängig
Rücktransformation:

$$Y=exp(\tilde{\vartheta}_1\dots)=\dots.=ursprnglichegleichungmitexp(\varepsilon_i)$$

durch die rücktransformation erhält man ein modell in dem sich die fehler multiplikativ verhalten und lognormalverteilt sind.
“X˜LN“ , falls ” log(x)˜N“ vergleich:

$$Y_i=\vartheta_1 x_1^{\vartheta_2}$$

mit $\varepsilon_1\tilde{N}(0,\sigma^2)\sigma^2>0$, unabhängig
Linearisierung nur falls sich die fehler tatsächlich so wie in der transformierten variable verhalten.

$\rightarrow$ Residuenanalyse

5.4 Spezielle nichtlineare Situationen

$$Y_i=\underbrace{\sum_{j=1}^{p}\vartheta_j h_j(x_i^{(1)},\dots,x_i^{(k)})}_{\hat{=}h(x_i^{(1)},\dots,x_i^{(k)};\vartheta_1,\dots,\vartheta_p)}+\varepsilon_i i\in\{1,\dots,n\}$$

Beispiel 1. 1: $h_j(x_i^{(1)},\dots,x_i^{(k)})=x_i^{(j)}\rightarrow$ lineares modell
2: $h_j(x_i)=x_i^j\rightarrow$ polynomiales modell
3 $h_j(x_i^{(1)},\dots,x_i^{(k)})=(1_{[\alpha_j,\alpha_j+1}x_i^{(j)})$ wobei 1 die indikatorfunktion ist, also 1 wenn x im intervall ond 0 wenn außerhalb.

5.4.1 Polynomiale regression (hier k=1)

$$Y_i = \vartheta_0 + \vartheta_1 X_1^1 + \cdots + \vartheta_p x_i^p, \varepsilon_i$$

bessere anpassung an daten schleichtes verhalten am rand(oszilationen)

5.4.2 Stückweise regression

$$Y_i = \sum_{j=1}^{p} \vartheta_j 1_{\alpha_j, \alpha_j+1}(x_j) + \varepsilon_i$$

schrittweise approximation mitkonstanten funktionen
erweiterung wäre die verwendung von linearen, quadratischen, kubihschen oder och höheren polynomialen funktionen. Probleme: unstetigkeiten an den intervallgrenzen.asymptotisches verhalten an den intervallgenzenkann insbesondere bei polynoen höherer ordnung sehr unpassend sein .