Kurzskript zur Vorlesung Nichtlineare und nichtparametrische Methoden, SS2019

Antje Jahn

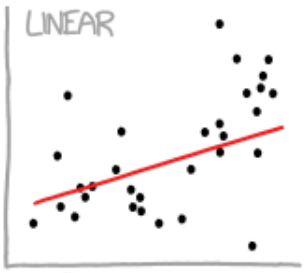
Hochschule Darmstadt, Fachbereich MN

Dieses Skript erhebt weder Anspruch auf Vollständigkeit noch auf Fehlerfreiheit. Es enthält nur eine grobe Zusammenfassung ausgewählter Vorlesungsinhalte.

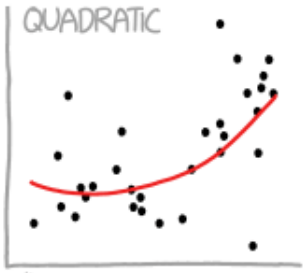
Sollten Sie Fehler oder Unklarheiten entdecken, so bin ich für eine Rückmeldung dankbar!

Inhaltsverzeichnis

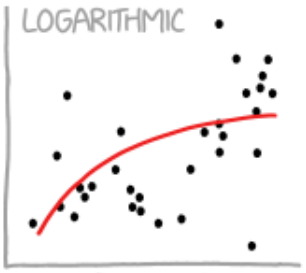
CURVE-FITTING METHODS
AND THE MESSAGES THEY SEND



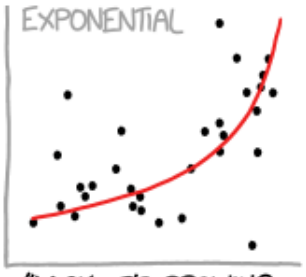
"HEY, I DID A REGRESSION."



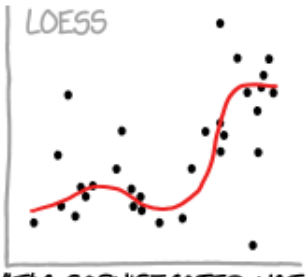
"I WANTED A CURVED LINE, SO I MADE ONE WITH MATH."



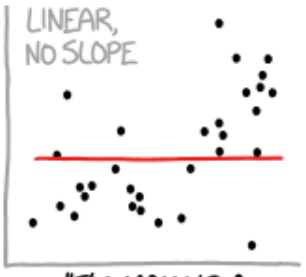
"LOOK, IT'S TAPERING OFF!"



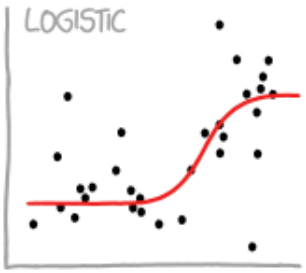
"LOOK, IT'S GROWING UNCONTROLLABLY!"



"I'M SOPHISTICATED, NOT LIKE THOSE BUMBLING POLYNOMIAL PEOPLE."

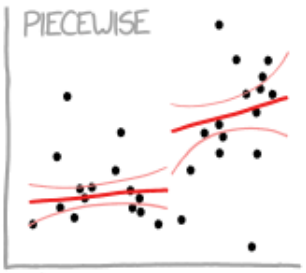


"I'M MAKING A SCATTER PLOT BUT I DON'T WANT TO."

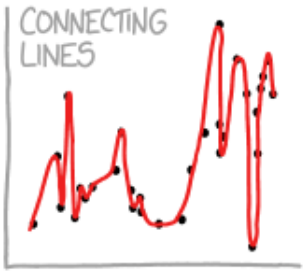


"I NEED TO CONNECT THESE TWO LINES, BUT MY FIRST IDEA DIDN'T HAVE ENOUGH MATH."

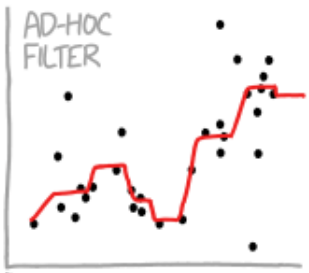
"LISTEN, SCIENCE IS HARD. BUT I'M A SERIOUS PERSON DOING MY BEST."



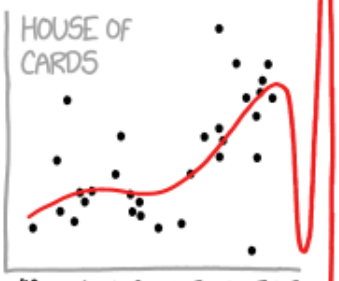
"I HAVE A THEORY, AND THIS IS THE ONLY DATA I COULD FIND."



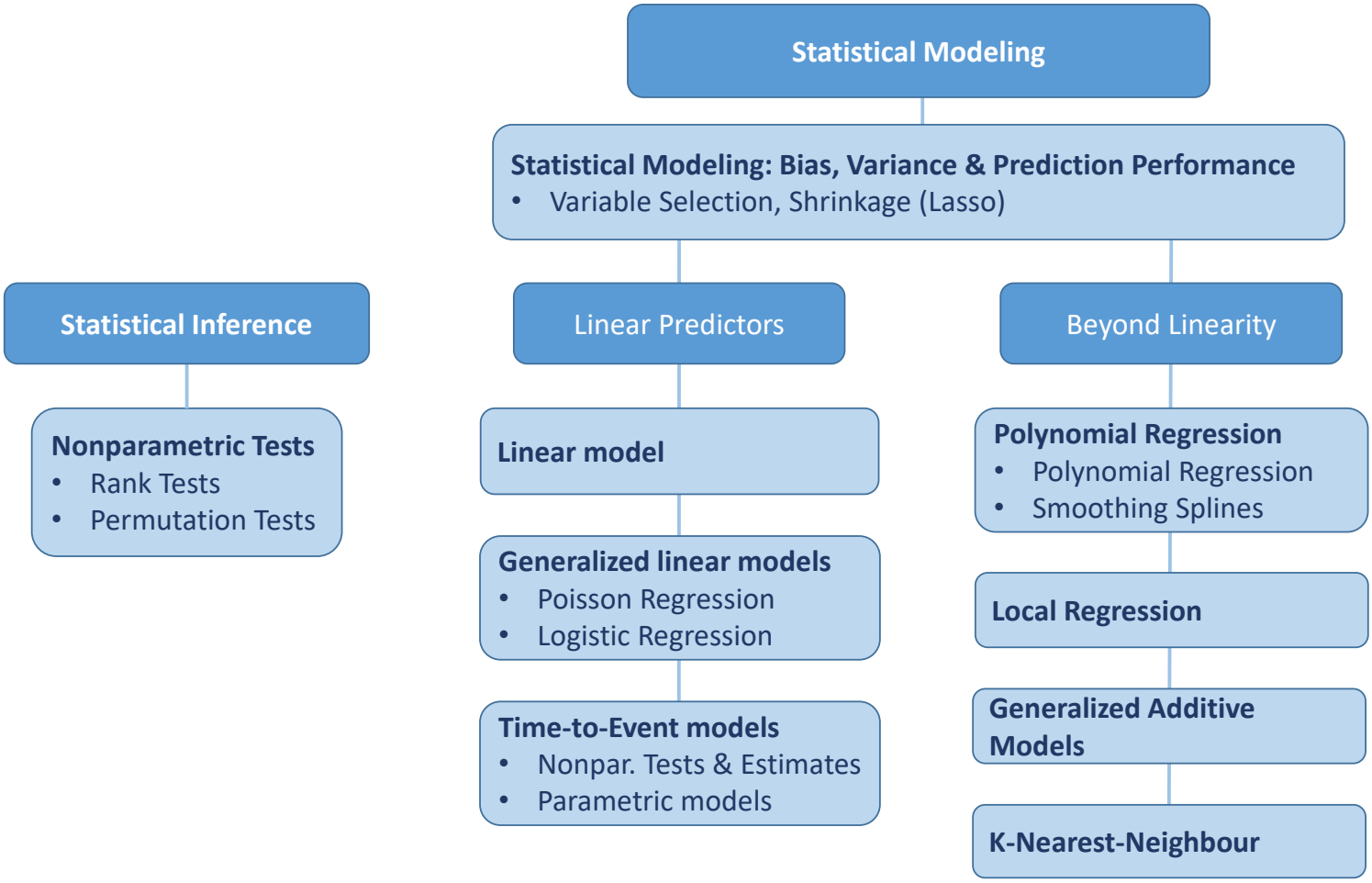
"I CLICKED 'SMOOTH LINES' IN EXCEL."



"I HAD AN IDEA FOR HOW TO CLEAN UP THE DATA. WHAT DO YOU THINK?"



"AS YOU CAN SEE, THIS MODEL SMOOTHLY FITS THE– *WAIT NO NO DON'T EXTEND IT AAAAAA!!*"


Statistical Modeling
Statistical Modeling: Bias, Variance & Prediction Performance
• Variable Selection, Shrinkage (Lasso)
Statistical Inference
Nonparametric Tests
• Rank Tests
• Permutation Tests
Linear Predictors
Linear model
Generalized linear models
• Poisson Regression
• Logistic Regression
Time-to-Event models
• Nonpar. Tests & Estimates
• Parametric models
Beyond Linearity
Polynomial Regression
• Polynomial Regression
• Smoothing Splines
Local Regression
Generalized Additive Models
K-Nearest-Neighbour

1 Begriffsbestimmungen

1.1 Nichtparametrische und parametrische Verfahren

In parametrischen statistischen Verfahren wird zugrundegelegt, dass die betrachteten Zufallsvariablen aus einer Familie von Wahrscheinlichkeitsverteilungen stammt. Ein oder mehrere Parameter spezifizieren dabei die Verteilung. Die Verfahren haben häufig das Ziel

- diese Parameter zu schätzen und damit Aussagen über die Verteilung von Zufallsvariablen oder den Zusammenhang zwischen Zufallsvariablen zu treffen
- und/oder Hypothesen über diese Parameter zu testen.

Beispiele: t-Test, ML-Schätzer, lineare Regression

Nichtparametrische Verfahren legen dagegen keine Verteilungsfamilie zugrunde. Beispiele:

- Statistische Tests bei kleinen Stichproben, wenn eine Approximation der Testverteilung mit dem zentralen Grenzwertsatz nicht möglich ist (–> Rang- und Permutationstests)
- Modellschätzer, die keine eine Annahme über die Form des Zusammenhangs zwischen Y und $X_1, \dots X_n$ zugrundelegen (–> K-Nächste-Nachbarn)

1.2 Statistisches Modell

Wir benutzen die folgenden Bezeichnungen:

- Abhängige Variable Y (Outcome / Response)
- Unabhängige / Erklärende Variablen $X = (X_1 \dots X_p)^t$ (Kovariaten)
- n = Größe der Stichprobe / Anzahl an Beobachtungen
- p = Anzahl an erklärenden Variablen / Kovariaten
- Stichprobe der Größe n: (y_i, x_i^t), $i = 1 \dots n$
- $x_i = (x_{i1}, \dots x_{ip})^t$

Ein statistisches Modell

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

beschreibt den Zusammenhang zwischen X und Y. Wir unterscheiden zwischen dem wahren Modell, welches den wahren Zusammenhang beschreibt (true model / data generating model) und dem Analyse-Modell, welches wir bei der statistischen Analyse zugrundelegen (analysis

model). Ein aus Daten geschätztes Modell bezeichnen wir mit $\hat{f}$. Sofern nicht genauer spezifiziert, bezeichnet "Modell" das Analyse-Modell.

Definitionen des statistischen Modells in der Literatur:

- A set of probability distributions on the sample space (Cox & Hinkley, 1974)
- A simplification or approximation of the reality (Burnham & Anderson, 2002)
- A model represents, often in considerably idealized form, the data generating process (Wikipedia)
- Statistical models are simple mathematical rules derived from empirical data describing the association between an outcome and several explanatory variables (Dunkler et al, 2014)

Additive und Lineare Modelle

Additives Modell:

$$Y = b_0 + f_1(X_1) + \cdots + f_p(X_p) + \epsilon$$

oder

$$E(Y|x_1, \ldots x_p) = b_0 + f_1(x_1) + \cdots + f_p(x_p)$$

Lineares Modelle:

$$Y = b_0 + b_1X_1 + \cdots + b_pX_p + \epsilon$$

oder

$$E(Y|x_1, \ldots x_p) = b_0 + b_1x_1 + \cdots + b_px_p$$

Dabei heisst $b_0 + b_1X_1 + \cdots + b_pX_p$ der lineare Prädiktor.

Ziele der statistischen Modellierung

- Überprüfen von Hypothesen (statistische Tests)
- Erklären der Assoziation zwischen dem Outcome und den Kovariaten (erklärendes Modell): Fokus liegt auf der Interpretation von Regressionskoeffizienten, Konfidenzintervallen und p-Werten, hoher Anpassungsgüte des Modells, sinnvoller Variablenselektion

- Vorhersage von Y auf Basis von f und X für neue Beobachtungen (Vorhersagemodell): Fokus liegt auf einem möglichst geringen Vorhersagefehler (generalization error = Vorhersagefehler auf unabhängigen neuen Daten), Interpretierbarkeit von Regressionskoeffizienten etc. weniger wichtig (bis hin zu black-box-Algorithmen), Variablenselektion auf Basis des Vorhersagefehlers

1.3 Bias und Varianz von Modellschätzern

Mögliche Fehlerquellen bei der statistischen Modellierung:

- Wichtige Kovariablen werden nicht modelliert
- Kovariablen ohne Einfluss auf Y (noise) werden modelliert
- Der funktionale Zusammenhang (f_i) wird misspezifiziert
- Das statistische Modell (f) wird misspezifiziert

2 Nichtparametrische Tests und Rangtests

Bei parametrischen Tests (z.B. Gauss-Test, t-Test...) ist für jedes θ aus dem Parameterraum die Verteilung der Zufallsvariablen bekannt. Die Nullhypothese ist ein Punkt oder ein Intervall des Parametrraums, d.h. auch unter der Nullhypothese (einfach Nullhypothesen) oder dem Rand der Nullhypothese (zusammengesetzte Nullhypothesen) ist die Verteilung der Zufallsvariablen und damit die Verteilung der Teststatistik bekannt. Der Ablehnbereich kann daher über die Quantile dieser Verteilung bestimmt werden. Bei nichtparametrischen Tests wird dagegen nicht vorausgesetzt, dass die Verteilung der Zufallsvariablen über einen Parameter definiert und damit unter der Nullhypothese bekannt ist. Wir betrachten hier zwei Typen von nichtparametrischen Tests:

- Rangtests: Die Teststatistik basiert nur auf den Rängen der beobachteten Werte, nicht auf den Werten selbst
- Permutationstests: Die beobachteten Werte werden als fest, nicht zufällig betrachtet. Die Zuteilung der Versuchsbedingungen (z.B. die Gruppenzuteilung) wird als Zufallsvektor behandelt.
- Monte-Carlo-Permutationstests

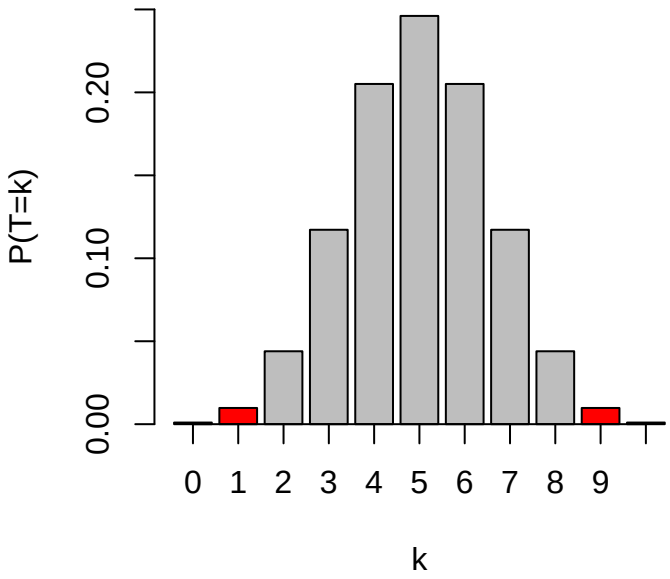
2.1 Einstichprobenproblem / verbundene Stichproben

2.1.1 Vorzeichen-Test

1. $X_1, \ldots, X_n$ unabhängig identisch verteilte Zufallsvariablen; X_i habe stetige Verteilung ; x_{med} sei der Median von X, d.h. $P(X \leq x_{med}) = P(X \geq x_{med}) = 0.5$
2. $H_0 : \{x_{med} = \delta_0\}$ vs $H_1 : \{x_{med} \neq \delta_0\}$
3. Festlegung des Signifikanzniveaus α
4. Unter H_0 gilt
$$P(X < \delta_0) = P(X < x_{med}) = 0.5$$
Das heißt
$$Y_i := \begin{cases} 1, & X_i < \delta_0 \\ 0, & X_i \geq \delta_0 \end{cases}$$
ist ein Bernoulli-Experiment mit $Y_i \underset{H_0}{\sim} B(1, 0.5)$ und
$$T := \sum_{i=1}^{n} Y_i \underset{H_0}{\sim} B(n, 0.5)$$
5. Finde $c_{\alpha/2}$ als den größten Wert $\in \{0, 1, \ldots, n\}$ für den die Verteilungsfunktion der $B(n, 0.5)$-Verteilung $\leq \frac{\alpha}{2}$ ist. Definiere dann als Ablehnbereich
$$C = \{a; a \leq c_{\frac{\alpha}{2}} \text{ oder } n - \alpha \leq c_{\frac{\alpha}{2}}\}$$

Bemerkungen:

- Beobachtungen $x_i = \delta_0$ können theoretisch nicht auftreten, da stetige Verteilung. In der Praxis werden diese Beobachtungen weggelassen, so dass sich der Parameter n (Stichprobengröße) entsprechend reduziert
- Der Test wird in der Praxis auch für ordinalskalierte Daten angewandt.
- Für $n \geq 30$ gilt unter H_0 approximativ $B(n, 0.5) \sim N(0.5 \cdot n, 0.25 \cdot n)$, d.h. alternativ
$$T := \frac{\sum_{i=1}^{n} Y_i - 0.5n}{\sqrt{0.25n}} \underset{H_0}{\sim} N(0, 1)$$
mit Ablehnbereich $C =]-\infty; -z_{1-\alpha/2}[\cup]z_{1-\alpha/2}; \infty[$.



2.1.2 Wilcoxon-Vorzeichen-Rang-Test

Anwendungsbereich:

- Alternative zum Vorzeichen-Test bei symmetrischen Verteilungen
- Anwendung bei ordinalskalierten Daten, z.B. Antwortskalen

1. $X_1, \ldots, X_n$ unabhängig identisch verteilt, X_i stetig und symmetrisch; x_{med} der Median von X
2. Die Nullhypothese soll geprüft werden, ob die zentrale Lage der Verteilung bei 0 liegt, d.h.
$$H_0 : \{x_{med} = \delta_0\} \quad vs \quad H_1 : \{x_{med} \neq \delta_0\}$$
3. Festlegung des Signifikanzniveaus α
4. Wahl der Teststatistik: Definiere
$$D_i := X_i - \delta_0$$
Bilde Ränge der $|D_i|$ und definiere
$$W^+ := \sum_{i;D_i>0} rang(|D_i|) \quad W^- := \sum_{i;D_i<0} rang(|D_i|)$$

Unter H_0 erwarten wir wegen der Symmetrie der Verteilung $w^+ \approx w^-$. Da weiter $w^+ + w^- = \frac{n(n+1)}{2}$ ist unter $H_0 \quad E(W^+) = \frac{n(n+1)}{4}$.

5. Der Ablehnbereich für $T = min(W^+, W^-)$ in Abhängigkeit von n ist tabelliert.

Bemerkungen:

- Beobachtungen $x_i = \delta_0$ können theoretisch nicht auftreten, da stetige Verteilung. In der Praxis werden diese Beobachtungen weggelassen, so dass sich der Parameter n (Stichprobengröße) entsprechend reduziert
- Treten Beobachtungen $X_i = X_j$ auf (Bindungen) so wird allen der durchschnittliche Rang zugewiesen. Dies sollte bei Stetigkeitsannahme nicht zu häufig vorkommen. Ansonsten gibt es korrigierte Teststatistiken (Korrektur der Varianzschätzung)
- Der Test wird in der Praxis auch für ordinalskalierte Variablen mit symmetrischer Verteilung angewandt.
- Für $n \geq 30$ gilt unter H_0 approximativ

$$W^+ \underset{H_0}{\sim} \mathcal{N}\left(\frac{n(n+1)}{4}, \frac{n(n+1)(2n+1)}{24}\right)$$

  d.h. alternativ

$$T := \frac{W^+ - \frac{n(n+1)}{4}}{\sqrt{\frac{n(n+1)(2n+1)}{24}}} \underset{H_0}{\sim} \mathcal{N}(0,1)$$

  mit Ablehnbereich $C =]-\infty; -z_{1-\alpha/2}[\cup]z_{1-\alpha/2}; \infty[$.

- Der Test wird - wie der verbundene t-Test - häufig auch für verbundene Stichproben angewandt, d.h. für die Differenzen $X_i - Y_i$
- Ohne die Symmetrie der Verteilung kann der Test antikonservativ werden

2.1.3 Permutationstest für verbundene Stichproben

$(X_i, Y_i)_{i=1\ldots n}$ unabhängig identisch verteilte Zufallsvariablen und $D_i = X_i - Y_i$ symmetrisch um θ. Die Nullhypothese $\{\theta = 0\}$ soll getestet werden. Möglich wäre ein Wilcoxon-Vorzeichen-Rang-Test. Alternative ist ein Permutationstest, der auch unter Bindungen valide bleibt. Unter H_0 gilt $(X_i - Y_i) \sim (Y_i - X_i)$ (exchangeability unter H_0) und damit mit $D_i = X_i - Y_i$: Es sei $M \subset \{1, \ldots n\}$ beliebig.

$$T := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} D_i = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i - Y_i \underset{H_0}{\sim} T_M = \frac{1}{n}\Big(\sum_{i\in M} X_i - Y_i + \sum_{i\notin M} Y_i - X_i\Big)$$

und damit

$$P(T \geq t) = \frac{|\{M \subset \{1 \dots n\}, T_M \geq t\}|}{|\{M \subset \{1 \dots n\}\}|} = \frac{|\{M \subset \{1 \dots n\}, T_M \geq t\}|}{2^n}$$

$$P(T \leq t) = \frac{|\{M \subset \{1 \dots n\}, T_M \leq t\}|}{|\{M \subset \{1 \dots n\}\}|} = \frac{|\{M \subset \{1 \dots n\}, T_M \leq t\}|}{2^n}$$

Die zweiseitige Testentscheidung wird getroffen, indem der kleinere der beiden einseitigen p-Werte mit dem halben Signifikanzniveau $\alpha/2$ verglichen wird.

2.2 Zweistichprobenproblem / unverbundene Stichproben

2.2.1 Wilcoxon-Rangsummen-Test (Mann-Whitney-U-Test)

Anwendungsbereich:

- Vergleich von zwei unabhängigen Stichproben bzgl. der zentralen Lage einer stetigen Variablen
- Alternative zum Zwei-Stichproben-t-Test bei kleinen Fallzahlen und Abweichung von der Normalverteilungsannahme

1. $X_1, \dots, X_n, Y_1 \dots Y_m$ unabhängige Zufallsvariablen, $X_i, i = 1 \dots n$ stetig mit Verteilungsfunktion F_X und $Y_i, i = 1 \dots m$ stetig mit Verteilungsfunktion F_Y. Weiter gelte das Lokations- (Shift-) Modell, d.h. $F_X(x) = F_Y(x + \theta)$ für ein $\theta \in \mathbb{R}$.
2. Die Nullhypothese soll geprüft werden, ob die beiden Verteilungen übereinstimmen, d.h.

   $$H_0 : \{\theta = 0\} = \{F_X(x) = F_Y(x) \forall x \in \mathbb{R}\} \quad vs \quad \{H_1 : \theta \neq 0\}$$

   Bzw. einseitig:

   $$H_0 : \{\theta \leq 0\} \quad vs \quad \{H_1 : \theta > 0\}$$

3. Festlegung des Signifikanzniveaus α
4. Wahl der Teststatistik: Bilde Ränge $rg(X_i)$ der Beobachtungen $X_1, \dots X_n, Y_1, \dots Y_m$ und definiere als Teststatistik

   $$T := \sum_{i=1}^{n} rg(X_i)$$

   Unter H_0 kann die (diskrete) Verteilung von T kombinatorisch hergeleitet werden und die Ablehnregionen sind in Abhängigkeit von n und m tabelliert.

Bemerkungen:

- Umgang mit Bindungen: Bei $x_i = x_j$ werden die Ränge zufällig verteilt (keine Konsequenz für die Teststatistik). Bei $x_i = y_j$ werden Durschnittsränge gebildet

- Für $n \geq 30$ gilt unter H_0 approximativ

$$T \underset{H_0}{\sim} \mathcal{N}\left(\frac{n(n+m+1)}{2}, \frac{nm(n+m+1)}{12}\right)$$

d.h. alternativ

$$\frac{T - \frac{n(n+m+1)}{2}}{\sqrt{\frac{nm(n+m+1)}{12}}} \underset{H_0}{\sim} \mathcal{N}(0,1)$$

mit Ablehnbereich $C =]-\infty; -z_{1-\alpha/2}[\cup]z_{1-\alpha/2}; \infty[$.

2.2.2 Permutationstest

Unter denselben Annahmen wie beim Wilcoxon-Rangsummen-Test, aber ohne die Voraussetzung der Stetigkeit (d.h. Bindungen sind kein Problem), kann der folgende Permutationstest durchgeführt werden:

$$Z := (X_1, \dots X_n, Y_1, \dots Y_m) = (Z_1, \dots Z_{n+m})$$

Unter H_0 (exchangeability under H_0) gilt

$$Z \sim Z_\pi \quad \text{für alle Permutationen mit } Z_\pi = Z_{\pi(1)}, \dots Z_{\pi(n+m)}$$

un damit

$$T = T(Z) := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i - \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} Y_i \underset{H_0}{\sim} \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Z_{\pi(i)} - \frac{1}{m}\sum_{i=n+1}^{n+m} Z_{\pi(i)} = T(Z_\pi) =: T_\pi$$

und

$$P(T \geq t) = \frac{|\{\pi; T_\pi \geq t\}|}{|\{\pi\}|}$$

$$P(T \leq t) = \frac{|\{\pi; T_\pi \leq t\}|}{|\{\pi\}|}$$

Auch hier wird die zweiseitige Testentscheidung getroffen, indem der kleinere der beiden einseitigen p_werte mit dem halben Signifikanzniveau $\alpha/2$ verglichen wird.

3 Statistische Modellierung: Vorhersagefehler

Es liegt ein wahres datengenerierendes statistisches Modell

$$Y = f(X) + \epsilon, \qquad E(\epsilon) = 0, Var(\epsilon) = \sigma^2, \epsilon \text{ und X sind unabhängig}$$

zugrunde. Ein statistisches Verfahren schätzt f aus einer Stichprobe und liefert als Ergebnis $\hat{f}$. Für eine neue Beobachtung mit $X = x$ kann dann y als $\hat{y} = \hat{f}(x)$ geschätzt werden. Wie gut ist nun das statistische Verfahren zur Schätzung von f bzw. wie groß ist der zu erwartende Vorhersagefehler?

Dazu benötigen wir zunächst eine Verlustfunktion, die den Fehler zwischen y und $\hat{y}$ beschreibt.

Verlustfunktion

Als Verlustfunktion bezeichnen wir eine Funktion $L : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, die den Fehler zwischen einem beobachteten Wert y und einem geschätzten Wert $\hat{y} = \hat{f}(x)$ definiert, z.B.

$$L(y, \hat{f}(x)) = \begin{cases} (y - \hat{f}(x))^2 & \text{quadratische Verlustfunktion / quadratischer Fehler} \\ |y - \hat{f}(x)| & \text{absolute Verlustfunktion / absoluter Fehler} \\ -2 * logL(y|\hat{\theta}(x)) & \text{Log-Likelihood-Funktion} \end{cases}$$

mit L der Likelihood von y unter aus dem Modell geschätzten Prädiktor $\hat{\theta}(x)$.

Bemerkungen:

- Diese Verlustfunktionen eignen sich gut für stetige Outcomes, in Klassifikationsverfahren (diskrete Outcomes) werden häufig andere Verlustfunktionen genutzt.
- Wir schreiben $L(y, \hat{f}(x))$ als Wert der Verlustfunktion für eine Realisierung (x, y) von (X, Y). Wir schreiben $L(Y, \hat{f}(X))$, wenn X und Y Zufallsvariablen bezeichnen und damit auch L eine Zufallsvariable ist. Diese beschreibt den (zufälligen) Vorhersagefehler für eine (zufällige) Trainingsstichprobe, die $\hat{f}$ bestimmt, und eine (zufällige) Teststichprobe (X, Y). Der erwartete Vorhersagefehler des statistischen Verfahrens, $E(L(Y, \hat{f}(X))$, kann als Gütekriterium des Verfahrens und zum Vergleich verschiedener statistischer Modelle dienen.

Fehlerdefinitionen

Der Trainingsfehler beschreibt den mittleren Fehler auf den Trainingsdaten, d.h. den Daten auf denen das Modell geschätzt wurde. Dieser unterschätzt i.d.R. den Vorhersagefehler

$$\text{Training Error: } \bar{err} := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} L(y_i, \hat{f}(x_i)) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{f}(x_i))^2 = MSE = n \times RSS$$

Der Testfehler (generalization error) beschreibt den erwarteten Vorhersagefehler auf neuen unabhängigen Daten (X, Y)

$$\text{Test Error: } Err := E_{(X,Y)}(L(Y, \hat{f}(X))|traindata)) = E_{(X,Y)}((Y - \hat{f}(X))^2|traindata))$$

Der erwartete Testfehler beschreibt den erwarteten Vorhersagefehler, wenn auch die Modellanpassung $\hat{f}$ als zufällig angenommen wird, d.h. betrachtet nicht allein das konkrete aus unseren Daten geschätzte Modell.

$$\text{Expected Test Error: } E_{train}(Err) = E_{traindata}E_{(X,Y)}(L(Y, \hat{f}(X)|traindata))$$

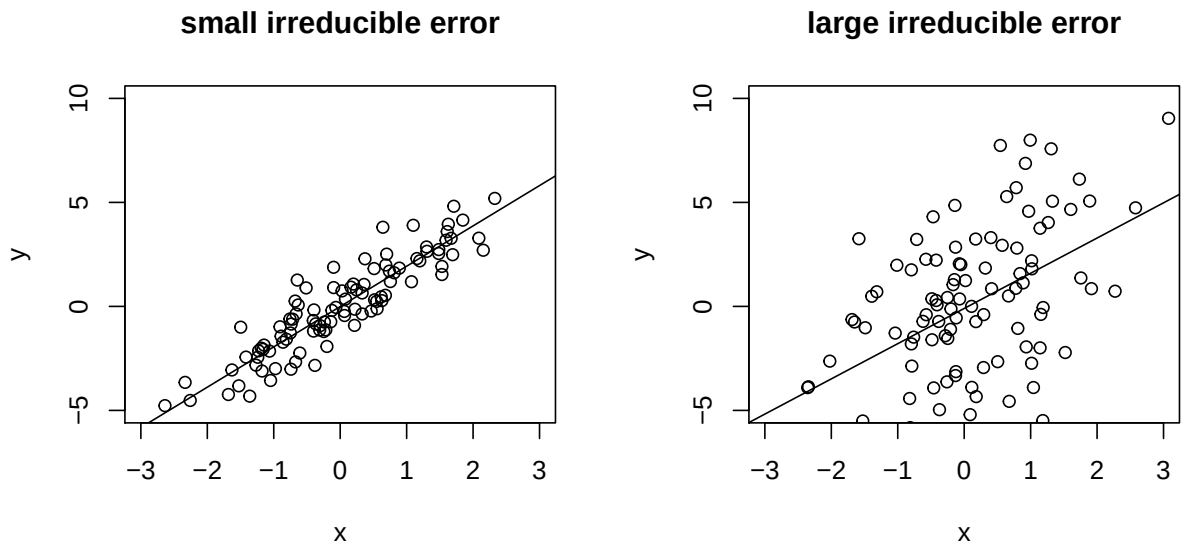
Bias-Varianz-Zerlegung

Wir legen im folgenden immer die quadratische Verlustfunktion zugrunde. Es gilt

$$\begin{aligned} \text{Expected Test Error in x} &:= E(L(Y, \hat{f}(x))|X = x) \\ &= \sigma^2 + Bias^2(\hat{f}(x)) + Var(\hat{f}(x)) \\ &= \text{Irreducible Error} + Bias^2(\hat{f}(x)) + \text{Var}(\hat{f}(x)) \end{aligned}$$

Bemerkungen

- Ist der irreducible error groß im Verhältnis zu f(X), wird kein Prognosemodell eine präzise Vorhersage liefern
- In einem guten Vorhersagemodell sind Bias($\hat{f}$) und Var($\hat{f}$) klein
- Oft kann eine Reduktion der Varianz auf Kosten einer Erhöhung des quadratischen Bias erreicht werden
- Underfitting: $\hat{f}$ hat einen (zu) großen Bias
- Overfitting: $\hat{f}$ hat eine (zu) große Bias
- Dieser Bias-Varianz-Trade-Off wird z.B. in regularisierten Regressionsmodellen (shrinkage, variable selection...) über Hyper-Parameter (λ) optimiert



Modellwahl auf Basis von training, test und expected test error

- Validierungsstichprobe
- Kreuzvalidierung
- Informationskriterien

$$AIC := -2LL + 2p$$

$$BIC := -2LL + p \cdot log(n)$$

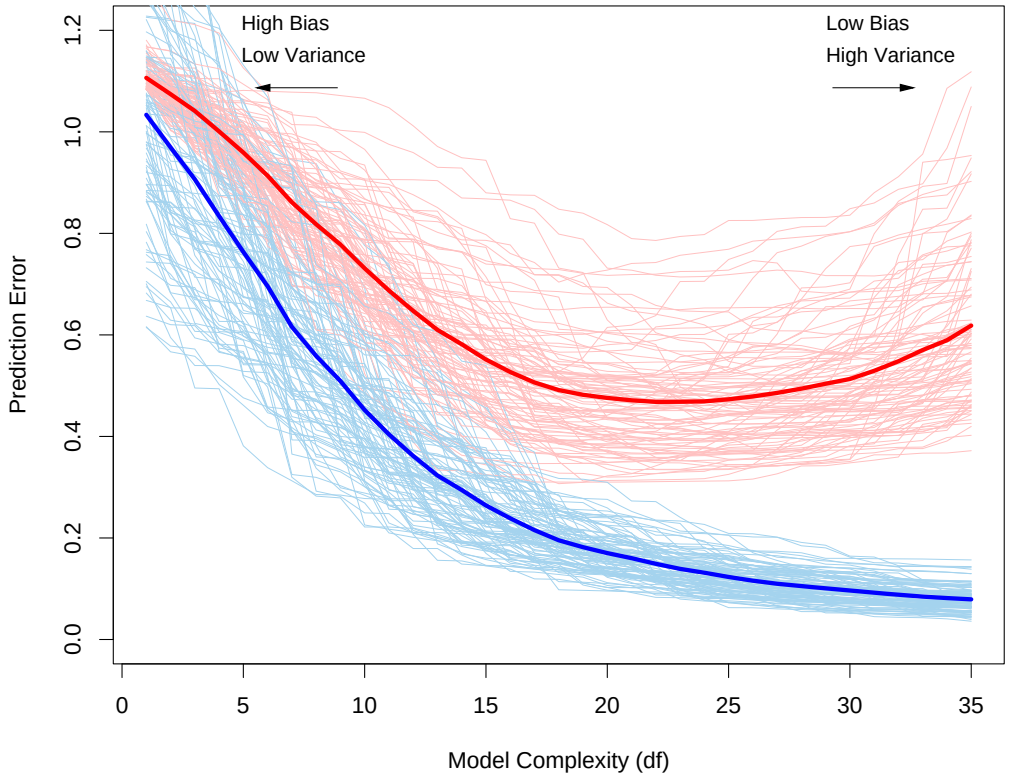


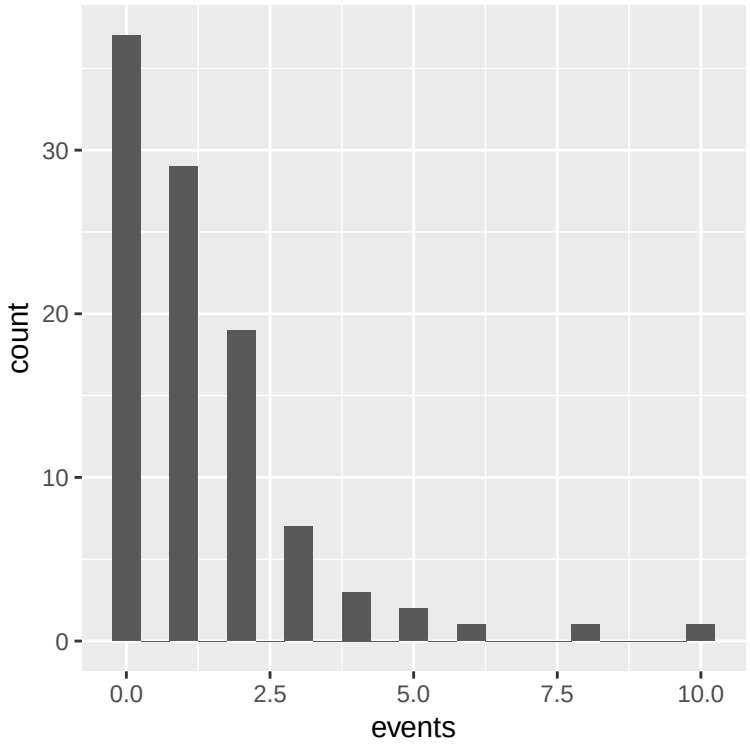
FIGURE 7.1. *Behavior of test sample and training sample error as the model complexity is varied. The light blue curves show the training error* $\overline{\text{err}}$*, while the light red curves show the conditional test error* $\text{Err}_{\mathcal{T}}$ *for* 100 *training sets of size* 50 *each, as the model complexity is increased. The solid curves show the expected test error* Err *and the expected training error* $\text{E}[\overline{\text{err}}]$*.*

4 Verallgemeinerte lineare Modelle (GLM)

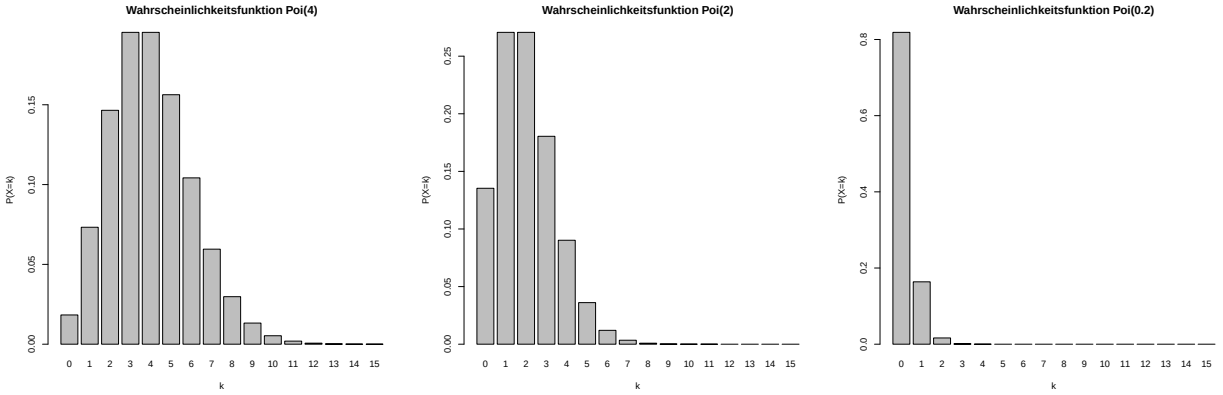
Im folgenden bezeichnet x_i den Kovariatenvektor der Beobachtung i, dem schon eine 1 vorangestellt ist, d.h. bei p Kovariaten $x_i = (1, x_{i1}, \dots x_{ip})$

4.1 Poisson-Regression

Beispiel Rekurrenzen nach Ersttumortherapie:



Wahrscheinchkeitsfunktion der Poisson-Verteilung:



Ziel: Modellierung von Kovariateneffekten auf $E(Y)$, d.h. Schätzung von $E(Y|x) = f(x)$

Definition 4.1. Poisson-Regressionsmodell

Es seien $Y_1 \dots Y_n$ (bedingt) unabhängige Zufallsvariablen mit Wertebereich $\mathbb{N}$. $X_1 \dots X_n$ seien p-dimensionale Zufallsvektoren (oder deterministisch). Dann ist durch

$$Y_i|X_i = x_i \sim Poi(\lambda_i)$$

mit $\lambda_i = exp(b^T x_i) \quad bzw. \quad log(\lambda_i) = b^T x_i$ ein Poisson-Regressions-Modell definiert.

Interpretation der Regressionskoeffizienten:

$$E(Y_i|x_i) = exp(b^T x_i)$$

ML-Schätzung

$$\begin{aligned} L(b) &= \prod_{i=1}^{n} P(Y_i = y_i|b, x_i) = \prod_{i=1}^{n} e^{-exp(b^T x_i)} \frac{exp(b^T x_i)^{y_i}}{y_i!} \\ LL(b) &= \sum_{i=1}^{n} y_i(b^T x_i) - exp(b^T x_i) - log(y_i!) \\ \Delta l &= \sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - exp(b^T x_i)) \\ &= s(b) \quad \text{Score-Funktion} \end{aligned}$$

$s(b) = 0$ ist ein nichtlineares Gleichungssystem zu dessen Lösung numerische Verfahren, z.B. Newton-Raphson, herangezogen werden. Hierzu wird die Hesse-Matrix von l an der Stelle des ML-Schätzers, H, benötigt. -H heisst in diesem Kontext auch "beobachtete Informationsmatrix".

Eigenschaften der Schätzer

Asymptotisch gilt

$$\hat{b} \sim N(b, F^{-1}(\hat{b})) \quad mit\ F^{-1}(\hat{b}) = \hat{Cov}(\hat{b})$$

F ist die Fisher-Matrix $= E(-H(\hat{b})) = Cov(s(\hat{b}))$

Statistische Tests und Konfidenzintervalle

Wald-Test:

$$H_0 = \{b_j = 0\}\ vs\ H_1 = \{b_j \neq 0\}$$

$$T = \frac{\hat{b}_j}{\sqrt{F^{-1}(\hat{b})_{jj}}}$$

oder $1-\alpha$-CI für b_j

$$\hat{b}_j \pm z_{\alpha/2}\sqrt{F^{-1}(\hat{b})_{jj}}$$

Likelihood-Ratio-Test

$$T = -2(LL_{M1}(\hat{b}_{M1}) - LL_{M2}(\hat{b}_{M2})) \underset{H_0}{\sim} \chi^2_1$$

wobei $\hat{b}_{M1}$ und $\hat{b}_{M2}$ die ML-Schätzer unter einem Modell mit und ohne die Kovariable X_j und LL_{M_1} und LL_{M_2} die Log-Likelihood-Funktion an der Stelle $\hat{b}_{M1}$ bzw. $\hat{b}_{M2}$ unter diesen Modellen.

Anpassungsgüte

AIC:

$$AIC = -2LL + 2(p+1)$$

Prüfung der Modellannahmen

Pearson-Residuen: Unter der modellierten Poisson-Verteilung gilt $E(Y_i|x_i) = Var(Y_i|x_i) = \exp(b^T x_i)$. Daher sollten die Pearson-Residuen

$$\frac{y_i - \exp(\hat{b}^T x_i)}{\sqrt{\exp(\hat{b}^T x_i)}} = \frac{y_i - \hat{\eta}_i}{\sqrt{\hat{\eta}_i}}$$

mit einer Varianz von 1 um den Erwartungswert 0 streuen.

4.2 Poisson-Regression mit offset

Angenommen, die Follow-Up-Zeit der Beobachtungen ist unterschiedlich und t_i bezeichnet die Follow-Up-Länge von Individuum i. Definiere

$$Y_i = \text{Anzahl Ereignisse in Zeitintervall } [0, t_i]$$

Dann wird ein Poisson-Regressionsmodell defniert durch

$$Y_i|x_i, t_i \sim Poi(t_i\eta_i) = Poi(t_i \exp(b^T x_i)) = Poi(\exp(log(t_i) + b^T x_i))$$

(denn die erwartetet Ereigniszahl sollte sinnvollerweise proportional zur Beobachtungslänge ansteigen. $log(t_i)$ heisst offset-Variable und muss dem Statistikprogramm übergeben werden.

4.3 Poisson-Regression mit overdispersion

Im Poisson-Modell gilt

$$Var(Y|X = x_i) = E(Y|X = x_i)$$

Um diese Annahme abzuschwächen wird ein weiterer Modellparameter, der Overdispersion-Parameter hinzugefügt

$$Var(Y|X = x_i) = \phi \cdot E(Y|X = x_i)$$

Schätzer werden nicht mehr mit dem ML-Verfahren, sondern einem quasi-ML-Verfahren geschätzt. Daher werden Statistiken wie AIC, Devianz, LR-Test nicht mehr berechnet.

4.4 Verallgemeinerte lineare Modelle

ALM	GLM
linearer Prädiktor ($\eta_i = b^T x_i$)	linearer Prädiktor ($\eta_i = b^T x_i$)
$\eta_i = E(Y_i\|x_i)$	$\eta_i = g(E(Y_i\|x_i))$ mit Link-Fkt. g^*
$Y_i\|x_i$ normalverteilt	Verteilung von $Y_i\|x_i$ in Exponentialfamilie
$Y_i\|x_i$ konstante Varianz	-

* g invertierbar; Wertebereich von g nicht beschränkt; g^{-1}:= Response-Funktion

4.5 Devianz, Anpassungsgüte und Modellvergleich in verallgemeinerten linearen Modellen

Es sei M ein verallgemeinertes lineares Modell. Für eine Stichprobe sei $\hat{b}_M$ der ML-Schätzer. Dann bezeichne

$$\begin{aligned} L_M := L_M(\hat{b}_M) &= \text{Likelihood-Funktion an der Stelle des ML-Schätzers} \\ &= \text{maximierte Likelihood-Funktion unter Modell M} \in [0,1] \\ LL_M := log(L_M) &= \text{maximierte Log-Likelihood-Funktion (unter Modell M)} \in]-\infty, 0] \end{aligned}$$

Es werde weiterhin ein saturiertes Modell geschätzt, d.h. für jede Beobachtung i wird ein eigener Parameter für $E(Y_i)$ geschätzt. LL_{opt} bezeichne den maximierten Log-Likelihood unter diesem saturierten Modell. Die Devianz eines Modells M ist definiert als Abweichung von diesem maximal erreichbaren Log-Likelihood:

$$D_M := 2 \cdot (LL_{opt} - LL_M) = -2 \cdot (LL_M - LL_{opt}) \quad = \quad \text{Devianz des Modells M} \in]-\infty, 0]$$

Die Devianzen verschiedener Modelle $M1$ und $M2$ können nun verglichen werden, um das Modell mit der besseren Anpassungsgüte zu identifizieren:

$$D_{M1} - D_{M2} = 2(LL_{opt} - LL_{M1}) - 2(LL_{opt} - LL_{M2}) = 2(LL_{M2} - LL_{M1})$$

Bei verschachtelten Modellen ist die Verteilung der Differenz der Devianzen bekannt, so dass sich statistische Tests (Likelihood-Ratio-Tests) entwickeln lassen:

Satz 4.1. (Likelihood-Ratio-Test)

Bezeichnen in einem verallgemeinerten linearen Modell M^- und M verschachtelte Modelle mit p Kovariaten $X_1, \dots X_p$ bzw. $p+q$ Kovariaten $X_1, \dots X_p, X_{p+1} \dots X_{p+q}$. Dann gilt unter der Nullypothese

$$H_0 = \{b_{p+1} = \dots = b_{p+q} = 0\}$$

$$LR = D_{M^-} - D_M = 2(LL_M - LL_{M^-}) \sim \chi^2_q$$

Dies kann als Teststatistik zum Prüfen von H_0 herangezogen werden.

5 Modelle und nichtparametrische Methoden für Ereigniszeitdaten

Beobachtet werden unabh. identisch verteilte Realisisierungen einer Zufallsvariable T, die die Zeit bis zum Eintreten eines bestimmtesn Ereignis beschreibt. Beispiele

- T = Zeit von Diagnose bis Tod (Überlebenszeit)
- T = Zeit von Diagnose bis Genesung
- T = Zeit bis zum Ausfall einer technischen Komponente

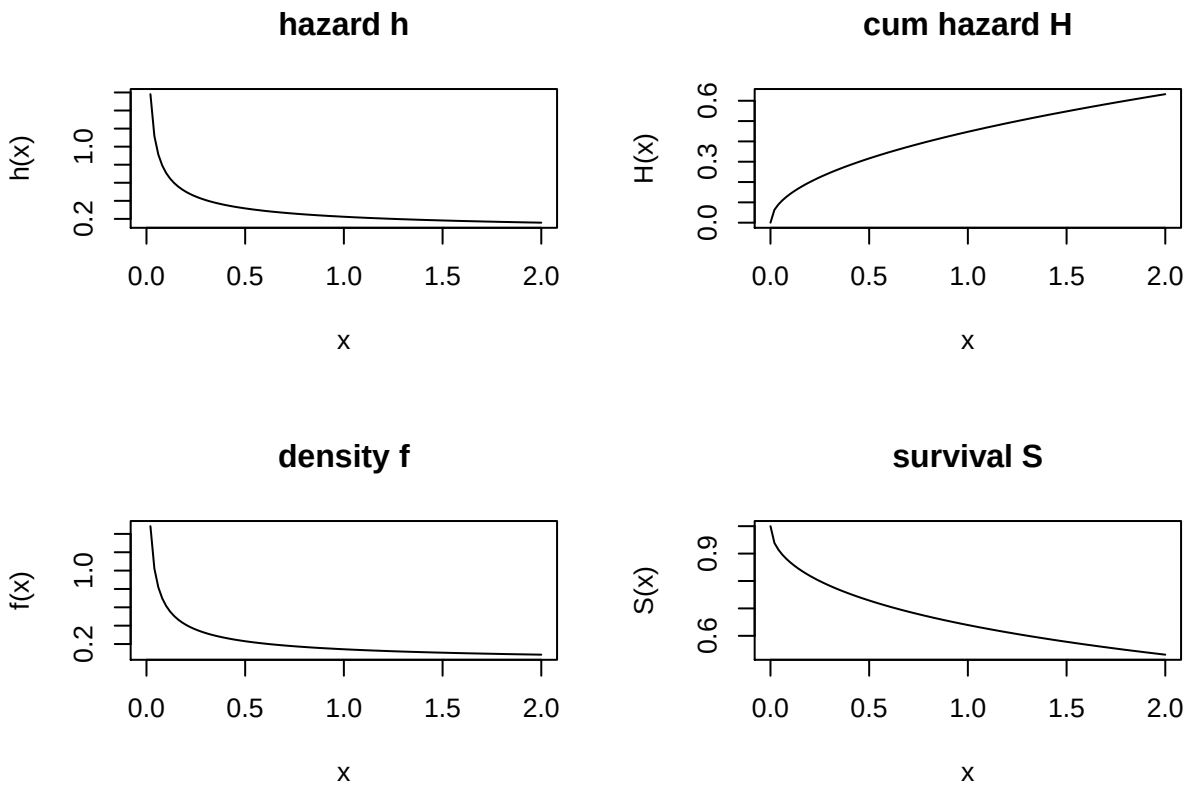
Wir nehmen im folgenden immer an, dass T eine stetige Zufallsvariable ist mit Dichte f.

Dichte, Überlebens- und Hazardfunktion

$$
\begin{aligned}
F(t) &:= P(T \leq t) = \int_0^t f(x)dx \quad \text{Verteilungsfunktion / cumulative incidence function} \\
S(t) &:= 1 - F(t) = P(T > t) \quad \text{Überlebensfunktion / survivor function} \\
h(t) &:= lim_{\Delta \downarrow 0} \frac{P(t \leq T < t + \Delta | T \geq t)}{\Delta} \quad \text{hazard rate / instantaneous event rate} \\
H(t) &:= \int_0^t h(x)dx \quad \text{cumulative hazard function}
\end{aligned}
$$

Dabei kann jede dieser Funktionen aus einer der anderen Funktionen berechnet werden, d.h. eine Funktion spezifiziert die Verteilung eindeutig.

Beispiel:



Es gilt:

$$\begin{aligned} h(t) &= \frac{f(t)}{S(t)} \\ H(t) &= -log(S(t)) \\ S(t) &= exp(-H(t)) \end{aligned}$$

Ziele der Überlebenszeitanalysen

- Schätzer $\hat{S}(t)$ oder Vorhersage $\hat{S}(t|x)$
- Einfluss von Kovariablen auf $S(t)$
- Identifikation von statistisch signifikanten Unterschieden in den Überlebenswahrscheinlichkeiten zwischen zwei oder mehr Gruppen

Rechtszensierung

- Ereigniszeiten t_i, die wir nicht beobachten, heissen zensiert
- Wissen wir nur, dass $t_i > c_i$ für ein $c_i > 0$, so heisst t_i rechts-zensierte Beobachtung
- Wir nehmen im folgenden immer an, dass T_i und die Zensierungszeit C_i unabhängig sind (ggf. bedingt auf die Kovariaten)

5.1 Nichtparametrische Schätzer von S(t)

- $(T_i, C_i)_{i=1\ldots n}$ sind iid Zufallsvariablen
- $t_1, \ldots t_n)$ sind die beobachteten Ereigniszeiten, d.h. die Realisierungen von $min(T_i, C_i)$
- r der n beobachteten Ereigniszeiten sind unzensiert, n-r sind zensiert
- $t_{(1)} < \cdots < t_{(r)}$ sind die geordenten nicht-zensierten Ereigniszeiten
- n_j ist die Anzahl an Individuen, die unmittelbar vor $t_{(j)}$ noch unter Risiko stehen, d.h. weder zensiert noch verstorben vor $t_{(j)}$ sind, $j = 1 \ldots r$
- d_j ist die Anzahl an Individuen, die z,Zp. $t_{(j)}$ versterben

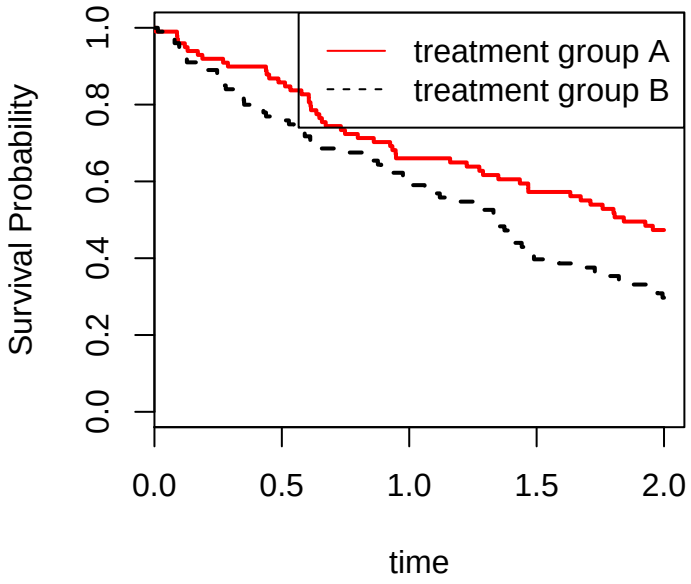
Kaplan-Meier-Schätzer:

$$\hat{S}(t) \quad = \quad \prod_{i=1}^{k(t)} \frac{n_i - d_i}{n_i} \qquad \text{mit } k(t) = max\{j; t_{(j)} \leq t\}$$

Bemerkung: Ohne Zensierungen ist $n_j - d_j = n_{j+1}$ und damit

$$\hat{S}(t_{(j)}) = 1 - \hat{F}(t)$$

mit $\hat{F}$ die empirische Verteilungsfunktion.



Nelson-Aalen-Schätzer:

$$\hat{S}_{NA}(t) = \prod_{i=1}^{k(t)} \exp(-\frac{d_j}{n_j})$$

Schätzer von H(t)

$$\hat{H}(t) = -log(\hat{S}(t)) = -log\Big(\prod_{j=1}^{k} \frac{n_j - d_j}{n_j}\Big) = -\sum_{j=1}^{k} log\Big(\frac{n_j - d_j}{n_j}\Big)$$

Schätzer der medianen Überlebenszeit

Für die mediane Überlebenszeit $t_{(50)}$ gilt $S(t_{(50)}) = 0.5$

$$\hat{t}_{(50)} = \begin{cases} min\{t_{(j)}; \hat{S}(t_{(j)}) < 0.5\}; \hat{S}(t) \neq 0.5 \forall t \\ \frac{t_{(j)} + t_{(j+1)}}{2}; \hat{S}(t_{(j)}) = 0.5 \end{cases}$$

5.2 Nichtparametrische Tests auf Gleichheit der Verteilungen

Es seien nun jeweils unabhängig identisch verteilte Ereigniszeiten $X_1, \dots X_n$ und $Y_1, \dots Y_m$ gegeben, z.B. aus zwei verschiedenen Populationen/Gruppen mit $S_i, h_i, f_i, F_i, H_i, i = 1, 2$.

Aus den Stichprobendaten dieser beiden Gruppen werden die geordneten nicht-zensierten Ereigniszeiten $t_{(1)} < t_{(2)} < ...t_{(r)}$ beobachtet.

- $n_{1j}, n_{2j}, \dots n_j$ die Anzahl an Ind. unter Risiko vor $t_{(j)}$ in den Gruppen 1, 2 und Gesamt
- $d_{1j}, d_{2j}, \dots d_j$ die Anzahl an Ereignissen zum Zp. $t_{(j)}$ in den Gruppen 1, 2 und Gesamt

Zu einem Zp. $t_{(j)}$ ergibt sich die folgende Datensituation:

Gruppe	Anzahl Events zum Zp. $t_{(j)}$	Anzahl den Zp. $t_{(j)}$ Überlebender	Anzahl unter Risiko vor $t_{(j)}$
1	d_{1j}	$n_{1j} - d_{1j}$	n_{1j}
2	d_{2j}	$n_{2j} - d_{2j}$	n_{2j}
Total	d_j	$n_j - d_j$	n_j

Logrank-Test:

Zum Testen der Nullhypothese

$$H_0 = \{S_1(t) = S_2(t) \forall t \in \mathbb{R}\}$$

kann die Logrank-Teststatistik herangezogen werden:

$$T := \frac{\sum_{j=1}^r (d_{1j} - E(d_{1j}))}{\sqrt{Var(\sum_{j=1}^r (d_{1j} - E(d_{1j})))}} = \frac{\sum_{j=1}^r (d_{1j} - n_{1j}\frac{d_j}{n_j})}{\sqrt{\sum_{j=1}^r Var(d_{1j})}} \underset{H_0}{\sim} N(0,1)$$

Wilcoxon-Test:

$$T := \frac{\sum_{j=1}^r n_j (d_{1j} - E(d_{1j}))}{\sqrt{\sum_{j=1}^r n_j^2 Var(d_{1j})}} \underset{H_0}{\sim} N(0,1)$$

Der Wilcoxon-Test gewichtet die Avweichungen $d_{1j} - E(d_{1j})$ mit der Anzahl an Personen unter Risiko. D.h. Unterschiede in $S(t)$ zu frühen Zeitpunkten t werden stärker gewichtet als die zu späteren Zeitpunkten.

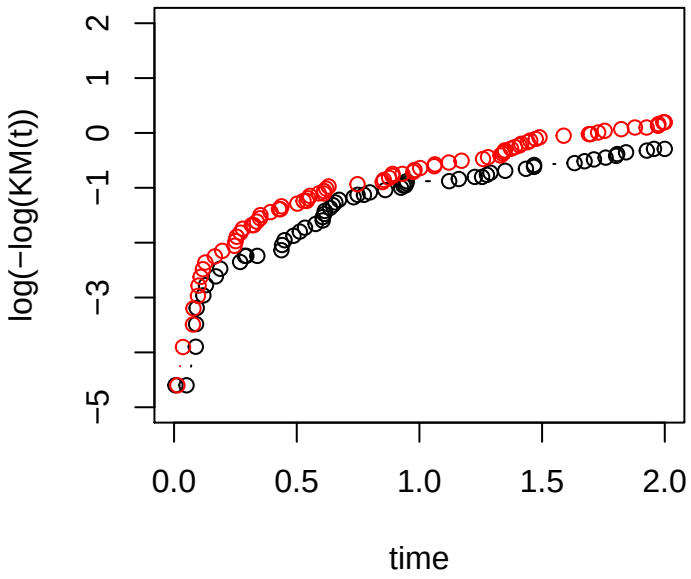
5.3 Die Proportional Hazards Annahme

Der Logrank-Test ist vorzuziehen, wenn die PH-Annahme erfüllt ist, d.h.

$$\frac{h_1(t)}{h_2(t)} \equiv \phi$$

Eine graphische Methode, um dies zu überprüfen ergibt sich aus:

$$\begin{aligned} & h_1(t) = \phi h_2(t) \\ \Leftrightarrow \quad & H_1(t) = \phi H_2(t) \\ \Leftrightarrow \quad & log(H_1(t)) = log(\phi) + log(H_2(t)) \end{aligned}$$



5.4 Parametrische Modelle

Wird die hazard-Funktion parametrisch spezifiziert (und damit auch f, S und H) können die Parameter und damit die Verteilung mit Maximum-Likelihood-Mehoden geschätzt werden.

Exponential-Modell

$$\begin{aligned} h(t) &\equiv \lambda, \quad \lambda > 0 \\ H(t) &= \lambda t \\ S(t) &= exp(-\lambda t) \\ f(t) &= \lambda exp(-\lambda t) \end{aligned}$$

Medianes Überleben:

$$S(t) = 0.5 \Leftrightarrow exp(-\lambda t) = 0.5 \Leftrightarrow t = -\frac{log(0.5)}{\lambda} = \frac{log(2)}{\lambda}$$

Weibull-Modell

$$\begin{aligned} h(t) &= \lambda\gamma t^{\gamma-1}, \quad \lambda > 0, \gamma > 0 \\ H(t) &= \lambda\gamma \int_0^t x^{\gamma-1} dx = \lambda x^{\gamma}|_0^t = \lambda t^{\gamma} \\ S(t) &= exp(-\lambda t^{\gamma}) \\ f(t) &= -(-\lambda)\gamma t^{\gamma-1} exp(-\lambda t^{\gamma}) = \lambda\gamma t^{\gamma-1} exp(-\lambda t^{\gamma}) \end{aligned}$$

Medianes Überleben:

$$S(t) = 0.5 \Leftrightarrow exp(-\lambda t^{\gamma}) = 0.5 \Leftrightarrow t^{\gamma} = \frac{log(2)}{\lambda} \Leftrightarrow t = \left(\frac{log(2)}{\lambda}\right)^{1/\gamma}$$

Proportional hazard Exponential- / Weibull-Modell

$$h(t|x) = exp(b^T x) h_0(t)$$

mit $h_0(t) = \lambda$ bzw. $h_0(t) = \lambda\gamma t^{\gamma-1}$

6 Modelle mit Basisfunktionserweiterungen in X

Im folgenden ist X eine eindimensionale Kovariable. Wir gehen weiter von einem statistischen Modell mit additivem Fehlerterm ϵ mit Erwartungswert 0 und Varianz σ^2 aus:

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

6.1 Polynomiale Regression

Definition 6.1. Eine Polynomfunktion vom Grad d ist eine Funktion, die sich als Linearkombination der Potenzen vom Grad 0 bis d des Funktionsparameters definiert, d.h.

$$f(x) = \sum_{i=0}^{d} a_i x^i = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots a_d x^d$$

Definition 6.2. (Polynomiales Regressionsmodell)

Es seien X, Y und ϵ eindimensionale Zufallsvariablen. Ein polynomiales Regressionsmodell ist definiert als

$$Y = f(X) + \epsilon = b_1 + b_2 X + b_3 X^2 + \dots b_{d+1} X^d + \epsilon$$

mit $E(\epsilon) = 0, Var(\epsilon) = \sigma^2$.

Liegen Stichprobendaten aus n unabhängigen Wiederholungen von (X, Y) vor, kann f mit den Methoden der linearen Regression geschätzt werden.

6.2 Stückweise konstantes Modell

Es werden K Knotenpunkte $\xi_1 < \xi_2 < \dots < \xi_K$ festgelegt. Innerhalb der durch die Knotenpunkte definierten Intervalle wird f als konstant angenommen. Definieren wir Indikatorfunktionen

$$\begin{aligned}
h_0(x) &= I(x \leq \xi_1) := \begin{cases} 0 & x > \xi_1 \\ 1 & x \leq \xi_1 \end{cases} \\
h_1(x) &= I(\xi_1 < x \leq \xi_2) := \begin{cases} 0 & x \leq \xi_1 \vee x > \xi_2 \\ 1 & \xi_1 < x \leq \xi_2 \end{cases} \\
&\dots \\
h_K(x) &= I(\xi_K < x) :=:= \begin{cases} 0 & x \leq \xi_K \\ 1 & x > \xi_K \end{cases}
\end{aligned}$$

können wir das Modell f definieren als

$$f(X) = b_0 + b_1 h_1(x) + b_2 h_2(x) + \dots b_K h_K(x)$$

Dabei wird h_0 nicht in das Modell aufgenommen, da bereits ein Intercept b_0 modelliert wird.

6.3 Basisfunktionserweiterungen

Allgemein können anstelle einer Kovariaten X, m Basisfunktionen $h_i : \mathbb{R} \mapsto \mathbb{R}, i = 1 \dots m$ als additive Terme in das Modell aufgenommen werden. Das Modell

$$f(X) = b_0 + b_1 h_1(X) + \dots + h_p(X) = b_0 + \sum_{k=1}^{m} b_m h_m(X)$$

heisst lineare Basiserweiterung in X. Dadurch können Modelle definiert werden, die nicht linear in X sind, aber mit den Methoden der multiplen linearen Regression geschätzt werden können. Dazu wird für Stichprobendaten $(x_i, y_i)_{i=1\dots n}$ (mit $x_i, y_i \in \mathbb{R}$) die Designmatrix

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & h_1(x_1) & \dots & h_m(x_1) \\ 1 & h_1(x_2) & \dots & h_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & h_1(x_n) & \dots & h_m(x_n) \end{pmatrix}$$

definiert.

Bemerkung 1. Das polymomiale Regressionsmodell und das stückweise konstante Regressionsmodell können als Spezialfälle betrachtet werden.

6.4 Stückweise polynomiale Regression

Definition 6.3. (Stückweises polynomiales Regressionsmodell)

Der Wertebereich von X wird durch K Knotenpunkte $\xi_1, \dots \xi_K$ in $K + 1$ disjunkte Intervalle aufgeteilt:

$$(-\infty, \xi_1), [\xi_1, \xi_2), \dots [\xi_{K-1}, \xi_K), [\xi_{K+1}, \infty)$$

. In jedem Intervall k gilt

$$Y = f_k(X) + \epsilon, \quad \text{mit } f_k \text{ Polynom vom Grad d}$$

6.4.1 Modellkomplexität

Die Anzahl zu schätzender Parameter (= Anzahl freie Parameter) ist $(d + 1)(K + 1)$

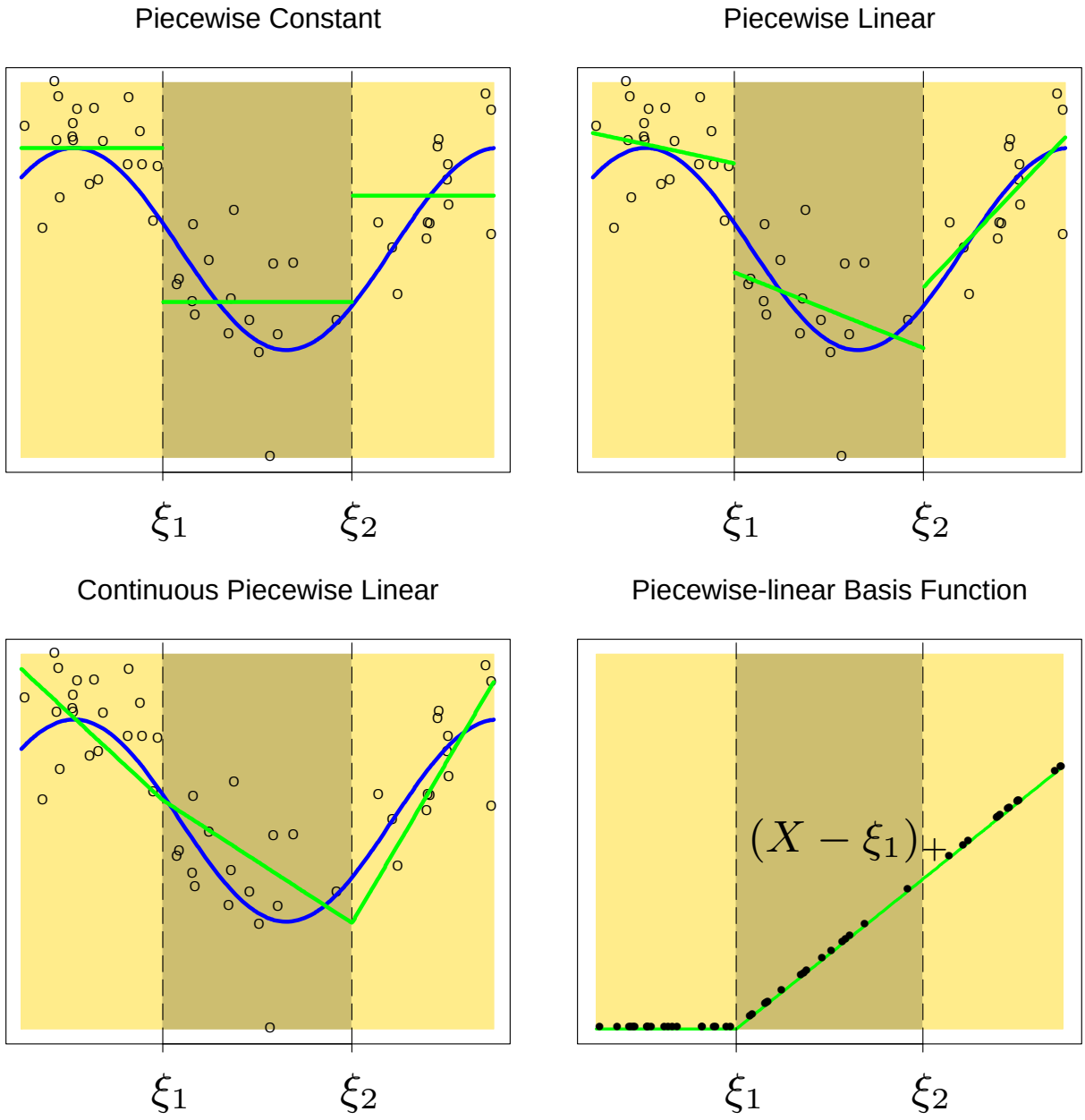


FIGURE 5.1. *The top left panel shows a piecewise constant function fit to some artificial data. The broken vertical lines indicate the positions of the two* knots *ξ_1 and ξ_2. The blue curve represents the true function, from which the data were generated with Gaussian noise. The remaining two panels show piecewise linear functions fit to the same data—the top right unrestricted, and the lower left restricted to be continuous at the knots. The lower right panel shows a piecewise–*

6.5 Regression Splines

Zusätzliche Bedigungen an die Parameter, die z.B. Stetigkeit in den Knotenpunkten etc. definieren, reduzieren die Anzahl freier Parameter udn damit die Modellkomplexität.

Definition 6.4. Eine Funktion $f : [a, b] \mapsto \mathbb{R}$ heisst Grad-d-Spline mit Knoten $a < \xi_1 < \xi_2 < \cdots < \xi_K < b$, wenn f ein stückweises Polynom vom Grad d und d-1-mal stetig differenzierbar ist.

Bemerkung 2. Ausserhalb der Knoten ist f als Polynom immer beliebig oft stetig differenzierbar. Nur an den Knotenpunkten definiert dies daher eine Restriktion.

Definition 6.5. (Regression Spline Modell)

Ein Modell

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

mit f Spline vom Grad d heisst Regression Spline Model

6.5.1 Modellkomplexität

Die Anzahl freier Parameter reduziert sich durch die zusätzlichen Restriktionen an f auf d+K+1.

6.5.2 Darstellung als Basiserweiterung in X

Die Bedingungen an die Polynome im Regression Spline Modell können über Basisfunktionserweiterungen in X mit geeigneter Wahl an Basisfunktionen ausgedrückt werden. Jedes Grad-d-Spline Regressionsmodell kann dargestellt werden als

$$f(X) = \sum_{m=1}^{d+1} b_m X^{m-1} + \sum_{k=1}^{K} b_{d+1+k}(X - \xi_k)_+^d = \sum_{m=1}^{d+K+1} b_m h_m(X)$$

Die Basisfunktionen

$$h_i(x) = x^{i-1}, i = 1 \ldots d+1 \quad h_i(x) = (x - \xi_{i-d-1})_+^d, i = d+2, \ldots, d+K+1$$

heisst Basis der trunkierten Potenzfunktionen (truncated power basis).

Statt der trunkierten Potenzfunktionen können auch B-Spline-Basisfunktionen genutzt werden, um ein Regression Spline Modell zu definieren (Funktion bs in R). Dies hat insbesondere numerische Vorteile.

6.5.3 Wahl der Knoten und Knotenanzahl

- Die Knoten werden häufig an die entsprechenden Quantile der beobachteten Werte gelegt und/oder die Wahl wird visuell getroffen.
- Die Anzahl an Knoten kann durch Kreuzvalidierung geschätzt werden
- Es kann sinnvoll sein, in Bereichen scheinbar größerer Variabilität der Modellfunktion mehr Knoten zu definieren.

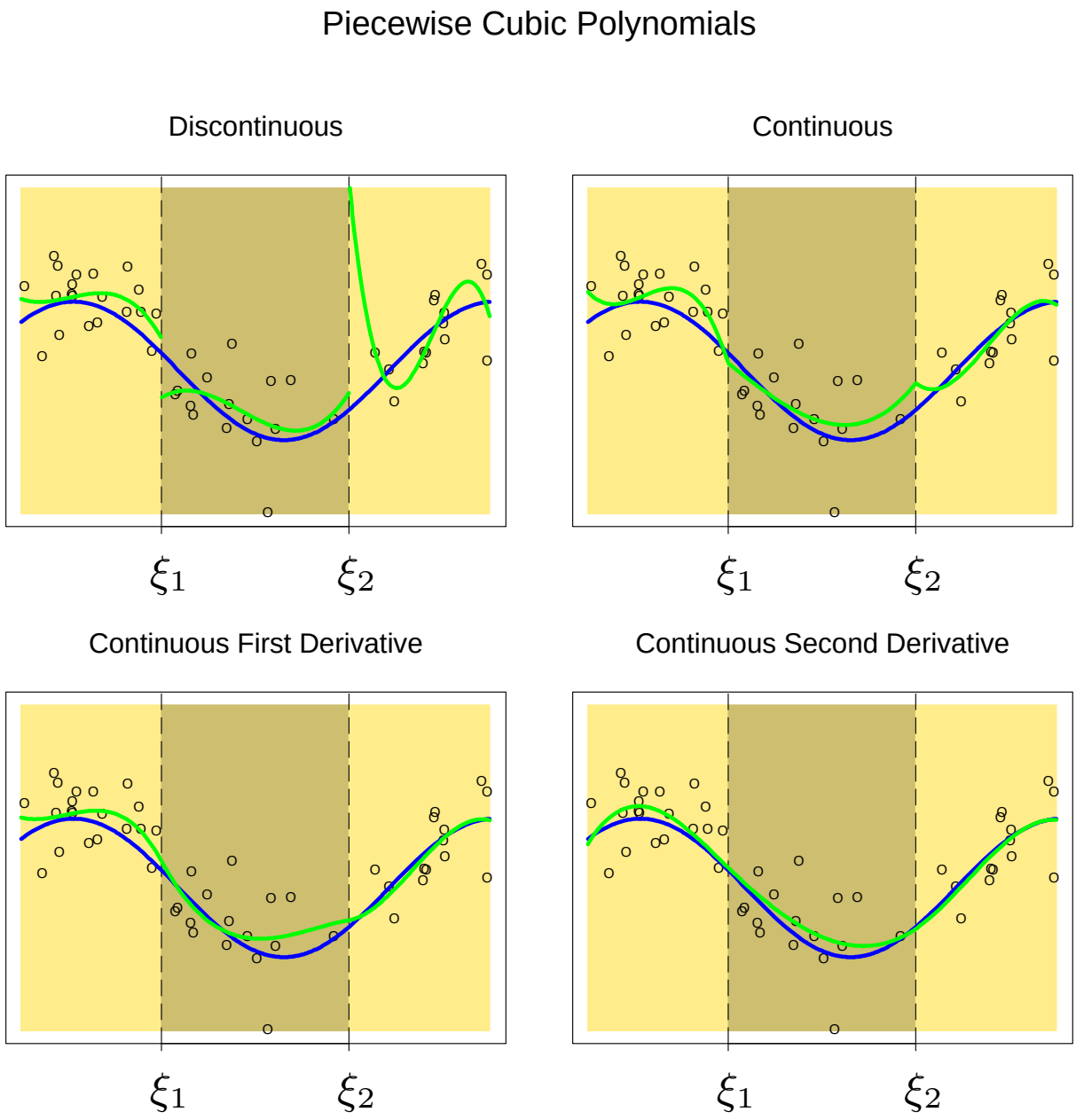


FIGURE 5.2. *A series of piecewise-cubic polynomials, with increasing orders of continuity.*

6.6 Natural Regression Splines

Wird eine weitere Restriktion gemacht, dass die stückweise polynomiale Funktion f in den Bereichen $(-\infty, \xi_1]$ und $[\xi_K, \infty)$ linear ist, reduziert das die Anzahl freier Parameter weiter auf K+d+1-2*(d-1)=K-d+3

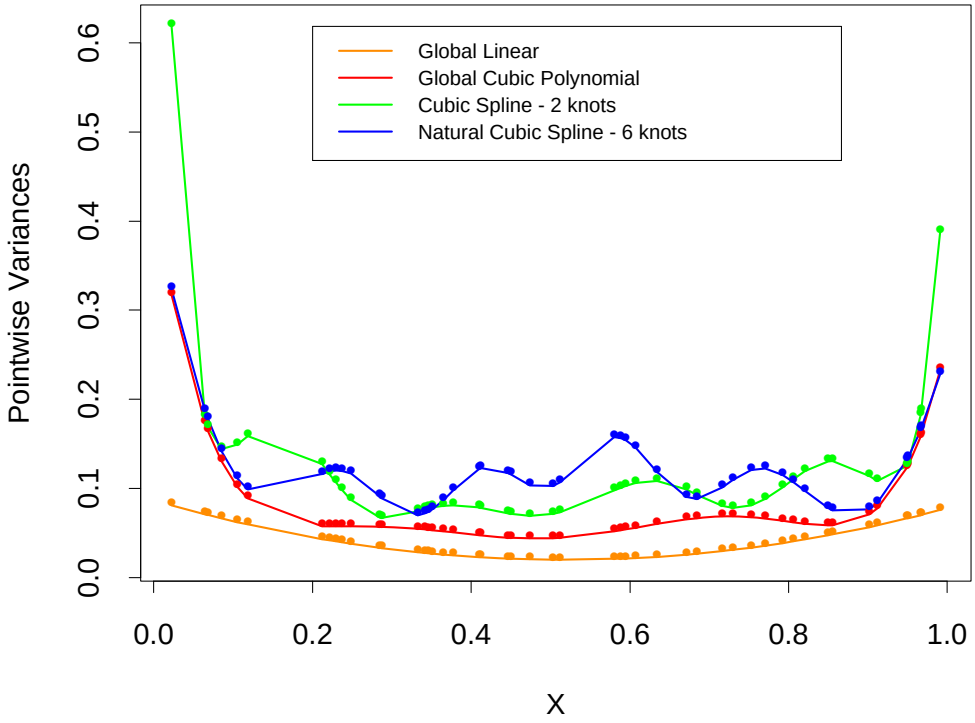


FIGURE 5.3. *Pointwise variance curves for four different models, with X consisting of 50 points drawn at random from $U[0, 1]$, and an assumed error model with constant variance. The linear and cubic polynomial fits have two and four degrees of freedom, respectively, while the cubic spline and natural cubic spline each have six degrees of freedom. The cubic spline has two knots at 0.33 and 0.66, while the natural spline has boundary knots at 0.1 and 0.9, and four interior knots uniformly spaced between them.*

7 Smoothing Regression Splines

Bei natural splines bestimmt die Anzahl an Knoten die Anzahl freier Parameter und so kann z.B. der optimale Bias-Varianz-Tradeoff erzielt werden. Die Smoothing Splines wählen eine maximale Zahl an Knoten und führen dann einen Penalisierungsterm ein.

Definition 7.1. Eine Smoothing Regression Spline ist die Funktion f, die unter allen 2-fach stetig differenzierbaren Funktionen $RSS(f, \lambda)$ minimiert mit

$$RSS(f, \lambda) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 + \lambda \int (f^{\text{tt}}(t))^2 dt$$

λ heisst smoothing parameter und wird z.B. mit CV ermittelt.

Satz 7.1. Die Funktion f, die die o.g. Minimierungseigenschaft erfüllt, ist eine natural cubic spline mit Knoten in den Punkten $x_1, \dots x_n$

Bemerkung: Durch den Penalisierungsterm unterscheiden sich die Parameterschätzer und damit $\hat{f}$ von einer Modellanpassung durch eine unpenalisierte natural cubic spline.

8 Kernel Smoother

8.1 K-nearest-neighbour Smoother

Idee: Moving Average (s. Bild nächste Seite)

Es sei $N_K(x)$ die K-Nächste-Nachbarn-Umgebung von x. D.h. mit $(x_{(1)}, x_{(2)}, \dots x_{(n)})$ die nach $|x - x_i|$ aufsteigend geordneten Werte ist $N_K(x) = \{x_{(1)}, \dots x_{(K)}\}$. Dann ist der K-nearest-neighbour Smoother definiert als

$$\begin{aligned}
\hat{f}(x) &:= \frac{1}{K} \sum_{i; x_i \in N_K(x)} y_i \\
&= \sum_{i=1}^{n} K(x, x_i) y_i \\
&= \hat{b}_0(x) := \underset{b_0}{argmin} \sum_{i; x_i \in N_K(x)} (y_i - b_0)^2 \\
&= \underset{b_0}{argmin} \sum_{i=1}^{n} K(x, x_i)(y_i - b_0)^2
\end{aligned}$$

mit $K(x, x_i) = I(x_i \in N_K(x))$. D.h. wir schätzen f aus einer lokalen polynomialen Regression vom Grad 0.

Die geschätzte Kurve ist jedoch nicht glatt, denn $\hat{f}$ ist konstant solange bis ein x_i die Menge $N_k(x)$ verlässt und springt dann auf eine andere Stufe. Dies verbessern die Kernel Average Smoother

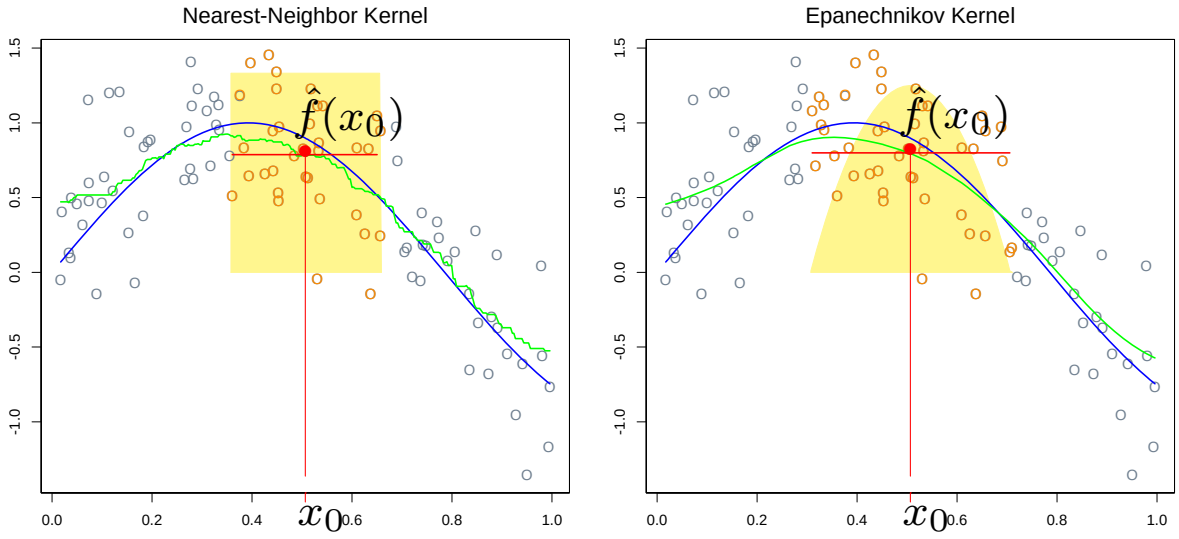


FIGURE 6.1. *In each panel* 100 *pairs* x_i, y_i *are generated at random from the blue curve with Gaussian errors:* $Y = \sin(4X) + \varepsilon$, $X \sim U[0,1]$, $\varepsilon \sim N(0, 1/3)$. *In the left panel the green curve is the result of a* 30*-nearest-neighbor running-mean smoother. The red point is the fitted constant* $\hat{f}(x_0)$, *and the red circles indicate those observations contributing to the fit at* x_0. *The solid yellow region indicates the weights assigned to observations. In the right panel, the green curve is the kernel-weighted average, using an Epanechnikov kernel with (half) window width* $\lambda = 0.2$.

8.2 Kernel Average Smoother

Statt $K(x, x_i) = I(x_i \in N_K(x))$ wird eine andere Gewichtsfunktion K (Kernel) gewählt, die x_i ein Gewicht relativ zu seiner euklidischen Distanz zu x zuordnet, d.h. eine Funktion (Kern) $K_\lambda : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^+$ mit

a) Für festes x_i ist $x \mapsto K_\lambda(x, x_i)$ stetig

b) Für festes x_i hat $x \mapsto K_\lambda(x, x_i)$ ein globales Maximum in x_i und ist monoton fallend mit $|x - x_i|$ (bzw. $||x - x_i||^2$), d.h. mit wachsendem Abstand zu x_i

c) $\int_{-\infty}^{\infty} K_\lambda(x, x_i)dx = 1$

d) Optional: Für festes x_i ist $K_\lambda(x, x_i) = 0 \quad \forall x \notin [x_i - \lambda, x_i + \lambda]$, d.h. ausserhalb eines Fensters der Breite 2λ um x_i.

   In Zusammenhang mit der Stetigkeit bedeutet dies insbesondere $K_\lambda(x_i - \lambda, x_i) = K_\lambda(x_i + \lambda, x_i) = 0$

Dann definiert

$$\hat{f}(x) := \frac{\sum_{i=1}^n K_\lambda(x, x_i)y_i}{\sum_{i=1}^n K_\lambda(x, x_i)}$$

den Nadaraya-Watson Kernel Average Smoother

8.2.1 Häufig gewählte Kerne

Epanechnikov quadratic Kernel:

$$K_\lambda(x, x_i) = D(\frac{|x - x_i|}{\lambda}) \quad \text{mit} \quad D(t) = \begin{cases} \frac{3}{4}(1 - t^2), & |t| \leq 1 \\ 0, & sonst \end{cases}$$

$$\Rightarrow K_\lambda(x, x_i) = \begin{cases} \frac{3}{4}\left(1 - (\frac{x - x_i}{\lambda})^2\right), & |x - x_i| \leq \lambda \\ 0, & sonst \end{cases}$$

Tricube Kernel:

$$K_\lambda(x, x_i) = D(\frac{|x - x_i|}{\lambda}) \quad \text{mit} \quad D(t) = \begin{cases} (1 - |t|^3)^3, & |t| \leq 1 \\ 0, & sonst \end{cases}$$

$$\Rightarrow K_\lambda(x, x_i) = \begin{cases} \left(1 - (|\frac{x - x_i}{\lambda}|)^3\right)^3, & |x - x_i| \leq \lambda \\ 0, & sonst \end{cases}$$

Gauss Kernel:

$$K_\lambda(x, x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\lambda} \exp(-\frac{(x - x_i)^2}{2\lambda^2})$$

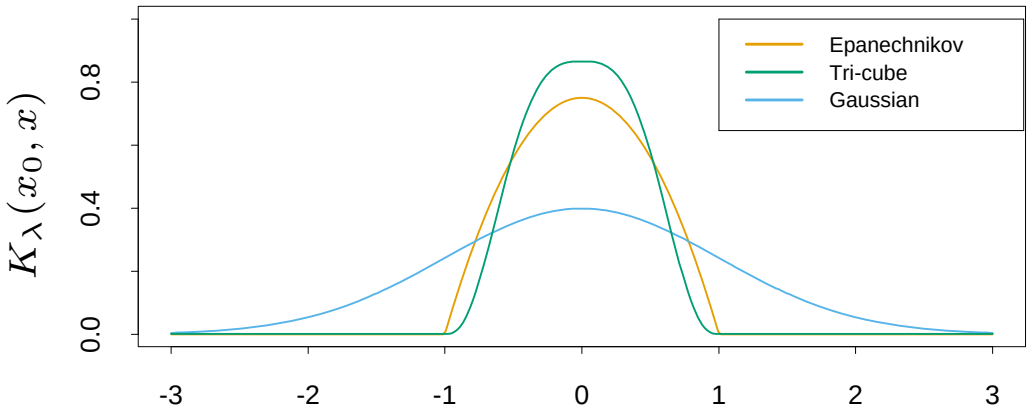


FIGURE 6.2. *A comparison of three popular kernels for local smoothing. Each has been calibrated to integrate to* 1. *The tri-cube kernel is compact and has two continuous derivatives at the boundary of its support, while the Epanechnikov kernel has none. The Gaussian kernel is continuously differentiable, but has infinite support.*

8.2.2 Wahl des Kerns und der Bandbreite

- Die Bandbreite λ gibt beim tricube Kern und beim Epanechnikov Kern den Radius des Supports von $K_\lambda(\cdot, x_i)$ an, d.h. die halbe Fensterbreite um x_i, innnerhalb der $K(\cdot, x_i) \neq 0$. Beim Gauss-Kern ist λ die Standardabweichung.
- λ ist ein Smoothing Parameter, der z.B. durch Kreuzvalidierung geschätzt werden kann
- λ kann auch für jedes x separat gewählt werden, dann wird die Bandbreite in x durch den Wert einer entsprechenden Funktion h_λ an der Stelle x, $h_\lambda(x)$ gewählt. Entsprechend wird $\hat{f}(x)$ mit dem Kern $K_{h_\lambda(x)}(x, x_i)$ geschätzt. Dies kann zum Beispiel bei einer heterogenen Datendichte der x_i sinnvoll sein.
- Die Wahl von λ bestimmt auch hier wieder den Bias-Varianz-Tradeoff.

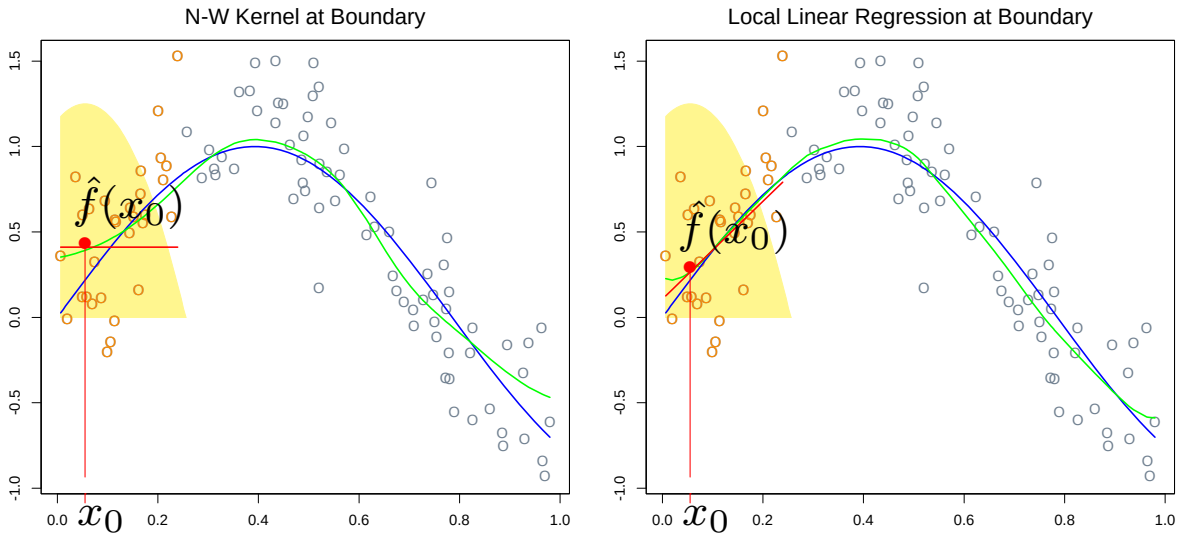


FIGURE 6.3. *The locally weighted average has bias problems at or near the boundaries of the domain. The true function is approximately linear here, but most of the observations in the neighborhood have a higher mean than the target point, so despite weighting, their mean will be biased upwards. By fitting a locally weighted linear regression (right panel), this bias is removed to first order*

8.3 Local Linear Regression

Die Figure zeigt, dass an den Rändern möglicherweise verstärkt Bias in $\hat{f}(x)$ auftritt wegen der Asymmetrie der Datendichte um x. Wir haben gesehen, dass der Kernel Average Smoother als lokale gewichtete polynomiale Regression vom Grad 0 betrachtet werden kann. Dies wird nun erweitert zur lokalen gewichteten linearen Regression (d.h. Grad 1):

$$\hat{f}(x) = \hat{b}_0(x) + \hat{b}_1(x)x$$

mit

$$(\hat{b}_0(x), \hat{b}_1(x)) = \underset{(b_0,b_1)\in\mathbb{R}^2}{argmin} \sum_{i=1}^{n} K_\lambda(x, x_i)(y_i - b_0 - b_1 x_i)^2$$

- Zur Schätzung und Bias von $\hat{f}$ und zur Begründung, warum die lokale lineare Regression an den Rändern den Bias verringert, s. Vorlesung.

8.4 Local Polynomial Regression

Die lokale lineare Regression kann Bias insbesondere an Stellen $f''(x) >> 0$ aufweisen (s. Vorlesung). Dies kann - um den Preis einer höheren Varianz - durch eine lokale gewichtete quadratische Regression reduziert werden. Genauso sind lokale gewichtete polynomiale Regressionen vom Grad $d > 2$ möglich (aber unüblich).

8.5 Lokale Regression in $\mathbb{R}^p$

Man definiert einen Kern über eine radiale Basisfunktion f, d.h. $K : \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^+$ mit $K_\lambda(x, y) = f(x - y)$. Da f RBF gilt $K(x, y_1) = K(x, y_2)$ für zwei Punkte y_1, y_2 mit gleichem euklidischen Abstand zu x, d.h. $||x - y_1|| = ||x - y_2||$. Dann kann analog definiert werden:

$$\hat{f}(x) = \hat{b}_0(x) + x^T \hat{b}(x)$$

mit

$$(\hat{b}_0(x), \hat{b}(x)) = \underset{(b_0,b)\in\mathbb{R}^{p+1}}{argmin} \sum_{i=1}^{n} K_\lambda(x, x_i)(y_i - b_0 - b^T x_i)^2$$

In höheren Dimensionen liegen mehr Punkte an den Rändern des mehrdimensionalen Raums der Einflussgrößen, wodurch die oft schlechtere Anpassung an den Rändern sich hier stärker auswirkt.

8.6 Modellierung bei >1 Kovariate: Generalized Additive Models (GAM)