Freie Universität Berlin
Fachbereich Erziehungswissenschaft und Psychologie
Wissenschaftsbereich Psychologie
Arbeitsbereich Methoden der Psychologie

Prof. Dr. Albrecht Iseler

Herleitung der multiplen Regression

Gegeben
- eine Matrix **X**, deren Element x_{ij} den Meßwert von Person i (i = 1..n) in Prädiktor j (j = 1..m) darstellt, sowie
- ein n-dimensionaler Spaltenverktor **y**, dessen Element y_i den Meßwert von Person i (i = 1..n) in der Kriteriumswvariablen darstellt.

Gesucht ist für die Schätzgleichung

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{X} \cdot \mathbf{b} \tag{1}$$

ein m-dimensionaler Spaltenvektor von Gewichtszahlen b_j (= Gewicht von Variable j) so daß die Summe der Abweichungsquadrate

$$SAQ := \sum_{i=1..n} (y_i - \hat{y}_i)^2 \tag{2}$$

minimal wird.

Aus der oben (Gleichung 1) in Matrixalgebra angegebenen Schätzgleichung folgt für $\hat{y}_i$ (den Schätzwert für Person i):

$$\hat{y}_i = x_{i1} \cdot b_1 + x_{i2} \cdot b_2 + ... + x_{im} \cdot b_m \tag{3}$$

Dann können wir für SAQ auch schreiben:

$$SAQ = \sum_i [\, y_i^2 + \sum_j x_{ij}^2 \cdot b_j^2 + 2 \cdot (-y_i \cdot \sum_j x_{ij} \cdot b_j + \sum_{j<j'} x_{ij} \cdot b_j \cdot x_{ij'} \cdot b_{j'}) \,] \tag{4}$$

Damit dieses SAQ durch geeignete Wahl der Gewichtszahlen b_j ein Minimum erreicht, müssen die "partiellen Ableitungen" nach diesen Gewichtszahlen 0 sein. Die Ableitung nach b_1 lautet z.B.

$$\partial\, SAQ / \partial\, b_1 = \sum_i [\, 0 + 2\, b_1 \cdot x_{i1}^2 + 2 \cdot (-y_i \cdot x_{i1} + \sum_{j'=2..m} x_{i1} \cdot x_{ij'} \cdot b_{j'})]$$

$$= 2 \cdot \sum_i x_{i1} \cdot [\, b_1 \cdot x_{i1} - y_i + \sum_{j'=2..m} x_{ij'} \cdot b_{j'}]$$

$$= 2 \cdot \sum_i x_{i1} \cdot [\, \sum_{j=1..m} x_{ij} \cdot \mathrm{b}_j - y_i]$$

$$= 2 \cdot [\, \sum_{j=1..m} (\sum_i x_{i1} \cdot x_{ij}) \cdot b_j - \sum_i x_{i1} \cdot y_i \,] \tag{5}$$

Damit diese partielle Ableitung 0 wird, muß der Inhalt der eckigen Klammer in der letzten Zeile 0 werden; es muß also gelten:

$$\textstyle\sum_{j = 1..m} (\sum_i x_{i1} \cdot x_{ij}) \cdot b_j \;=\; \sum_i x_{i1} \cdot y_i \tag{6}$$

Das alles folgte aus der Forderung, daß die partielle Ableitung von *SAQ* nach der Gewichtszahl b_1 null sein soll. Damit die partielle Ableitung nach b_2 null wird, ergibt sich fast dieselbe Gleichung - es ist nur x_{i1} durch x_{i2} zu ersetzen usw.; für die Ableitung nach b_m ist in Gleichung (6) die Größe x_{i1} durch x_{im} zu ersetzen. Wenn wir diese Gleichungen untereinander schreiben, ergibt sich:

$$\textstyle\sum_{j = 1..m} (\sum_i x_{i1} \cdot x_{ij}) \cdot b_j \;=\; \sum_i x_{i1} \cdot y_i \tag{7.1}$$

$$\textstyle\sum_{j = 1..m} (\sum_i x_{i2} \cdot x_{ij}) \cdot b_j \;=\; \sum_i x_{i2} \cdot y_i \tag{7.2}$$

usw., bis

$$\textstyle\sum_{j = 1..m} (\sum_i x_{im} \cdot x_{ij}) \cdot b_j \;=\; \sum_i x_{im} \cdot y_i \tag{7.m}$$

Die Forderung, daß alle diese Gleichungen gelten sollen, läßt sich in Matrix-Algebra in einer einzigen Gleichung zusammenfassen: Es muß gelten

$$\mathbf{X'\,X \cdot b = X'\,y} \tag{8}$$

Um diese Behauptung zu überprüfen, vergegenwärtigt man sich, daß links und rechts vom Gleichheitszeichen der Gleichung 8 jeweils ein Spaltenvektor steht, dessen erstes, zweites und m-tes Element von den obigen drei Gleichungen (7.1), (7.2) und (7.m) angegeben werden.

Nun sind wir fast am Ziel. Wir erinnern uns:

$$\mathbf{S} := (1/n) \cdot \mathbf{X'\,X} \tag{9}$$

ist die Varianz-Kovarianz-Matrix der Prädiktoren, und

$$\mathbf{s} := (1/n) \cdot \mathbf{X'\,y} \tag{10}$$

ist ein Spaltenvektor der Kovarianzen aller Prädiktoren mit dem Kriterium. Also können wir das bisherige Ergebnis (d.h. die beiden Seiten der Gleichung 8) auch mit 1/n multiplizieren und erhalten:

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{s}. \tag{11}$$

Wenn nun die Matrix **S** eine Inverse $\mathbf{S}^{-1}$ hat, dann können wir beide Seiten mit dieser Inversen prämultiplizieren und erhalten

$$\mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{s} \tag{12}$$

Das Produkt $\mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{S}$ ergibt aber eine Einheitsmatrix (Definition der Inversen), und die Multiplikation mit einer Einheitsmatrix ändert nichts und kann deshalb entfallen. Also können wir auch schreiben:

$$\mathbf{b} = \mathbf{S}^{-1} \cdot \mathbf{s} \tag{13}$$