Fachhochschule Südwestfalen
University of Applied Sciences

Statistik

CH.12 - Multiple Regression

SS 2021 || Prof. Dr. Buchwitz, Sommer, Henke

Wir geben Impulse

Outline

Multiple Lineare Regression

$$Y = f(X_1, X_2, \ldots, X_p) + \epsilon$$

- Mit Hilfe der **einfachen linearen Regression** kann derZusammenhang einer abhängigen Variablen Y mit **einer** unabhängigen Variablen X modelliert werden.
- Die **multiple lineare Regression** erlaubt das modellieren Zusammenhangs einer abhängigen Variablen Y mit **mehreren** unabhängigen Variablen $X_1, X_2, \ldots, X_p$.

Multiple Lineare Regression

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_p X_p + \epsilon$$

- Die zuvor diskutierte einfache lineare Regression kann als **Spezialfall** der multiple linearen Regression aufgefasst werden bei der gilt $p = 1$.
- Wir nehmen weiterhin an, dass *innerhalb des Wertebereichs* der Daten, der wahre Zusammenhang zwischen Y und den Prädiktoren durch ein lineares Modell **approximiert** werden kann.
- Jeder Regressor geht mit einem eigenen Koeffizienten $\beta_0, \beta_2, \ldots, \beta_p$ in die Gleichung ein. Der Fehlerterm ϵ enthält zudem keine **systematischen Informationen** zur Erklärung der Streuung von Y die nicht bereits durch die Regressoren abgebildet wurden.

Multiple Lineare Regression

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \ldots + \beta_p x_{ip} + \epsilon_i$$

$$i = 1, 2, \ldots, n$$

- Aus der Modellgleichung folgt die obige Darstellung für jede Beobachtung. Dabei repräsentiert y_i die i-te Beobachtung der abhängigen Variablen Y. Die Werte $x_{i1}, x_{i2}, \ldots, x_{ip}$ sind die Werte der zugehörigen Regressoren, für die i-te Beobachtung in der Stichprobe (üblicherweise i-te Zeile im Datensatz).
- Der Wert ϵ_i ist der Anpassungsfehler (Fehlerterm) der linearen Approximation für die i-te Beobachtungseinheit.

Beispiel: Autodaten

```
d
```

```
##                        l100km    weight  hp cyl      hub
## Mazda RX4            11.200714 1.1884110 110   6 2.621936
## Mazda RX4 Wag        11.200714 1.3040770 110   6 2.621936
## Datsun 710           10.316447 1.0523334  93   4 1.769807
## Hornet 4 Drive       10.991355 1.4582983 110   6 4.227872
## Hornet Sportabout    12.578342 1.5603565 175   8 5.899356
## Valiant              12.995304 1.5694283 105   6 3.687098
## Duster 360           16.448601 1.6193234 245   8 5.899356
## Merc 240D             9.639959 1.4469585  62   4 2.403988
## Merc 230             10.316447 1.4288148  95   4 2.307304
## Merc 280             12.250781 1.5603565 123   6 2.746478
## Merc 280C            13.214326 1.5603565 123   6 2.746478
## Merc 450SE           14.342378 1.8461194 180   8 4.519562
## Merc 450SL           13.596243 1.6918982 180   8 4.519562
## Merc 450SLC          15.474671 1.7145778 180   8 4.519562
## Cadillac Fleetwood   22.616827 2.3813580 205   8 7.734711
## Lincoln Continental  22.616827 2.4602830 215   8 7.538066
## Chrysler Imperial    16.001020 2.4244492 230   8 7.210324
## Fiat 128              7.259722 0.9979024  66   4 1.289665
## Honda Civic           7.737336 0.7325511  52   4 1.240503
## Toyota Corolla        6.938496 0.8323413  65   4 1.165123
## Toyota Corona        10.940233 1.1181043  97   4 1.968091
## Dodge Challenger     15.175161 1.5966438 150   8 5.211098
## AMC Javelin          15.474671 1.5580885 150   8 4.981678
## Camaro Z28           17.685338 1.7417933 245   8 5.735485
## Pontiac Firebird     12.250781 1.7440612 175   8 6.554840
## Fiat X1-9             8.615934 0.8777005  66   4 1.294581
```

Datenbeschreibung

`l100km` Kraftstoffverbrauch in Litern pro 100km bei normaler Fahrweise.

`weight` Fahrzeuggewicht in Tonnen.

`hp` Motorleistung in PS.

`cyl` Anzahl der Zylinder des Fahrzeugmotors.

`hub` Hubraum des Motors in Litern.

Beispiel: Autodaten

```r
dim(d)                  # Anzahl Beobachtungen und Anzahl Variablen
```

```
## [1] 32  5
```

```r
t(sapply(d, summary)) # Deskriptive Statistik für alle Variablen
```

```
##              Min.   1st Qu.     Median       Mean    3rd Qu.       Max.
## l100km  6.9384956 10.316447  12.250781  12.755060  15.250039  22.616827
## weight  0.6862847  1.170834   1.508193   1.459319   1.637467   2.460283
## hp     52.0000000 96.500000 123.000000 146.687500 180.000000 335.000000
## cyl     4.0000000  4.000000   6.000000   6.187500   8.000000   8.000000
## hub     1.1651228  1.979971   3.216788   3.780862   5.342195   7.734711
```

Beispiel: Autodaten

```r
round(var(d),4)        # Varianz-Kovarianz-Matrix
```

```
##           l100km  weight        hp      cyl      hub
## l100km   14.9247  1.5258  202.0862   5.6144   6.9033
## weight    1.5258  0.1970   20.0454   0.6202   0.8004
## hp      202.0862 20.0454 4700.8669 101.9315 110.1403
## cyl       5.6144  0.6202  101.9315   3.1895   3.2719
## hub       6.9033  0.8004  110.1403   3.2719   4.1249
```

```r
round(cor(d),4)        # Paarweise Korrelationskoeffizienten
```

```
##        l100km weight     hp    cyl    hub
## l100km 1.0000 0.8899 0.7629 0.8137 0.8798
## weight 0.8899 1.0000 0.6587 0.7825 0.8880
## hp     0.7629 0.6587 1.0000 0.8324 0.7909
## cyl    0.8137 0.7825 0.8324 1.0000 0.9020
## hub    0.8798 0.8880 0.7909 0.9020 1.0000
```

Wovon ist die Größe `l100km` abhängig?

Multiple Lineare Regression

$$\begin{aligned} Y &= \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \epsilon \\ \text{Kraftstoffverbrauch} &= \beta_0 + \beta_1 \text{Gewicht} + \beta_2 \text{Motorleistung} + \epsilon \end{aligned}$$

- Wir nehmen an, dass Y linear von (mindestens) zwei erklärenden Variablen abhängig ist.
- Diese Annahme muss verifiziert werden (was wir zunächst ignorieren), da sonst nicht sichergestellt ist, dass diese Variablen einen Einfluss haben oder entscheidende Variablen im Modell fehlen.

Multiple Lineare Regression

$$
\begin{array}{ccccccccc}
Y & = & \beta_0 & + & \beta_1 X_1 & + & \beta_2 X_2 & + & \epsilon \\
\text{Kraftstoffverbrauch} & = & \beta_0 & + & \beta_1 \text{Gewicht} & + & \beta_2 \text{Motorleistung} & + & \epsilon
\end{array}
$$

- Wir nehmen an, dass Y linear von (mindestens) zwei erklärenden Variablen abhängig ist.
- Diese Annahme muss verifiziert werden (was wir zunächst ignorieren), da sonst nicht sichergestellt ist, dass diese Variablen einen Einfluss haben oder entscheidende Variablen im Modell fehlen.

Wie können die Parameter $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$ bei der multiplen linearen Regression bestimmt werden?

Parameterschätzung

Wie können die Regressionsparameter $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$ bestimmt werden?

Parameterschätzung

- **Lösung:** Minimieren der Fehlerquadratsumme nach dem Prinzip der kleinsten Quadrate (Kleinste-Quadrate-Schätzung).

- Der Anpassungsfehler für jede Beobachtung ergibt sich aus der umgestellten Beobachtungsgleichung:

$$\epsilon_i = y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{i1} - \beta_2 x_{i2} - \ldots - \beta_p x_{ip}$$

- Die zu minimierende Funktion in Abhängigkeit der Parameter $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$ ergibt sich damit wie folgt:

$$S(\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p) = \sum_{i=1}^{n} \epsilon_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_{i1} - \beta_2 x_{i2} - \ldots - \beta_p x_{ip})^2$$

- $\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1, \ldots, \hat{\beta}_p$ bzw. $b_0, b_1, \ldots, b_p$ sind die Werte, die die Funktion $S(\ )$ minimieren.

Parameterschätzung

Your Turn

Schreiben Sie die zugehörige Regressionsgleichung auf.

```r
mod <- lm(l100km ~ 1 + weight + hp, data=d)
mod
```

```
##
## Call:
## lm(formula = l100km ~ 1 + weight + hp, data = d)
##
## Coefficients:
## (Intercept)       weight           hp
##     1.48306      5.95580      0.01759
```

- Multiple lineare Regressionsmodelle können in R ebenfalls mit Hilfe der Funktion `lm()` geschätzt werden.
- R greift für die Bestimmung der Parameterschätzer ebenfalls auf die Methode der kleinsten Quadrate zurück.

Darstellung und Interpretation

- Einfache Regressionsmodelle (nur X_1) können als Gerade dargestellt werden. Multiple Regressionsmodelle (X_1 und X_2) können mit einer Ebene oder als Hyperebene (mehr als zwei Prädiktoren) dargestellt werden. Diese Darstellung wird sehr schnell unübersichtlich.
- β_0 ist der Achsenabschnitt und der abgebildete Wert von Y, wenn $X_1 = X_2 = \ldots = X_p = 0$.
- Die Steigungskoeffizienten β_j haben mehrere Interpretationen:
  - β_j ist die **Veränderung** in Y wenn sich X_j um eine Einheit erhöht und alle anderen Prädiktoren konstant gehalten werden (ceteris paribus).
  - β_j wird also als **Partialeffekt** bezeichnet, weil er den Effekt von X_j auf Y abbildet, nachdem die Zielvariable um die Effekte der anderen Variablen adjustiert wurde.

Darstellung und Interpretation

```r
mod <- lm(l100km ~ 1 + weight + hp, data=d)
summary(mod)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = l100km ~ 1 + weight + hp, data = d)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -3.9678 -1.1667  0.1802  0.9415  3.3444
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 1.483062   0.962884   1.540  0.13435
## weight      5.955801   0.840115   7.089 8.45e-08 ***
## hp          0.017592   0.005438   3.235  0.00303 **
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 1.562 on 29 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.8471, Adjusted R-squared:  0.8365
## F-statistic: 80.33 on 2 and 29 DF,  p-value: 1.494e-12
```

Your Turn

Interpretieren Sie die Schätzergebnisse (α = 0.05) und das Gütemaß des Regressionsmodells.

Darstellung und Interpretation

- In wissenschaftlichen Aufsätzen werden Regressionsmodelle häufig schrittweise aufgebaut und in übersichtlich in Tabellen dargestellt.

	Model 1	Model 2	Model 3
(Intercept)	1.45	6.45^{***}	1.48
	(1.10)	(1.07)	(0.96)
weight	7.75^{***}		5.96^{***}
	(0.72)		(0.84)
hp		0.04^{***}	0.02^{**}
		(0.01)	(0.01)
R^2	0.79	0.58	0.85
Adj. R^2	0.78	0.57	0.84
Num. obs.	32	32	32

$^{***}p < 0.001$; $^{**}p < 0.01$; $^{*}p < 0.05$

Statistical models

Outline

Hypothesentests

- Ergänzend zum t-Test für die einzelnen Koeffizienten ($H_0 : \beta_j = 0$ vs. $H_1 : \beta_j \neq 0$) gibt es auch die Möglichkeit **alle Koeffizienten auf einmal** einem Hypothesentest zu unterziehen.
- Das Szenario ob alle Regressoren zusammen genommen einen Effekt auf die abhängige Variable Y haben kann mit Hilfe des **F-Tests** untersucht werden.
- Die Idee dieses simultanen Testens ist zu prüfen, ob mit hoher Wahrscheinlichkeit davon auszugehen ist, dass nicht alle Parameter $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_p$ gleich 0 sind, also zu prüfen:

$$H_0 : \beta_1 = \beta_2 = \ldots = \beta_p = 0 \quad \text{vs} \quad H_1 : \beta_j \neq 0 \text{ für min. ein } j$$

Hypothesentests

$$\begin{aligned} \text{FM:} \quad & Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_p X_p + \epsilon \\ \text{RM:} \quad & Y = \beta_0 + \epsilon \end{aligned}$$

- Die Nullhypothese ist gleichbedeutend mit der Tatsache, dass auch ein **reduziertes Modell** (RM) ohne Regressoren den gleichen Erklärungsgehalt liefert wie das volle Modell (FM) mit allen p Regressoren.
- Dieser fehlende **Fit** kann mit Hilfe der Fehlerquadratsumme (SSE), für die beiden Modelle messbar gemacht werden.

$$SSE(FM) = \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 \qquad SSE(RM) = \sum (y_i - \hat{y}_i^*)^2$$

Hypothesentests

$$F = \frac{[SSE(RM) - SSE(FM)]/(p+1-k)}{SSE(FM)/(n-p-1)}$$

- Die Differenz $SSE(RM) - SSE(FM)$ gibt die Erhöhung der Residualstreuung durch Rückgriff auf das reduzierte Model an. Wenn diese Differenz groß ist, ist das RM mit k Parametern **nicht adäquat**.
- Wenn der beobachtete F-Wert größer ist als der kritische Wert, ist der F-Test signifikant zum Level α.
- Das beudetet, dass das reduzierte Modell (RM) nicht zufriedenstellend ist und die Nullhypothese (und die entsprechenden Werte für die β's) verworfen werden kann.
- Verwerfe H_0 wenn gilt:

$$F \geq F_{(p+1-k,\ n-p-1\ ;1-\alpha)} \quad \text{oder} \quad p(F) \leq \alpha$$

Hypothesentests

```
mod <- lm(l100km ~ 1 + weight + hp, data=d)
summary(mod)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = l100km ~ 1 + weight + hp, data = d)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -3.9678 -1.1667  0.1802  0.9415  3.3444
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 1.483062   0.962884   1.540  0.13435
## weight      5.955801   0.840115   7.089 8.45e-08 ***
## hp          0.017592   0.005438   3.235  0.00303 **
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 1.562 on 29 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.8471, Adjusted R-squared:  0.8365
## F-statistic: 80.33 on 2 and 29 DF,  p-value: 1.494e-12
```

Outline

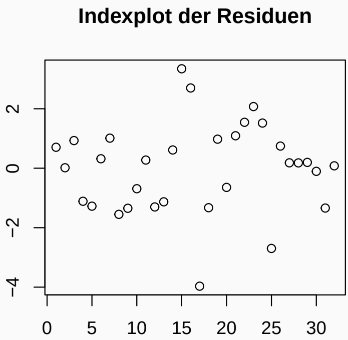
Residualdiagnostik

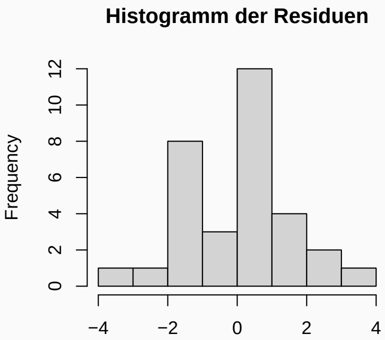
- Modellierungsprobelme, wie inkorrekt spezifizierte Modelle, fehlende und vergessene Variablen **äußern sich häufig in einer Verletzung der Annahmen der Residuen**.
- Um zu überprüfen ob das ausgewählte Regressionsmodelle den theoretischen Anfroderungen genügt, müssen daher die Residuen inspiziert werden. Dieses Prozess nennt man Resdidualdiagnostik.
- Residuen sollten (annähernd) Normalverteilt sein, keine Zusammenhangsstrutkur aufweisen (i.i.d.) und frei von Ausreißern sein. Diese Eigenschaften werden häufig in **grafischen Darstellungen** der Residuen sichtbar.
- **R-Funktion:** `residuals()` erlaubt das Extrahieren von Residuen aus der Rückgabe der `lm()` Funktion.

Residualdiagnostik

- Darstellung Residuen der Regression Kraftstroffverbrauch Y erklärt durch Fahrzeuggewicht (X_1) und Motorleistung (X_2).

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \epsilon$$





Outline

Multikollinearität

- Die Interpretation der Koeffizienten eines multiplen Regressionsmodells setzt vorraus, dass die Prädiktoren keinen ausgeprägten Zusammenhang untereinander haben, da die (ceteris paribus) Interpretation der Koeffizienten dann nicht mehr greift.
- Wenn eine starke Abhängigkeitsstruktur zwischen den Prädiktoren vorhanden ist, dann bezeichnet man dieses Problem als **Multikollinearität**. Multikollinearität ist ein Problem in den Daten und kein Problem der Modellierung.
- Multikollinearität führt zu unplausiblen Werten der Koeffizientenschätzer und wird durch spezielle Maßzahlen, wie Varianzinflationsfaktoren (VIF), messbar.

Multikollinearität

```
cor(d)
```

```
##           l100km    weight        hp       cyl       hub
## l100km 1.0000000 0.8898927 0.7629477 0.8137493 0.8798217
## weight 0.8898927 1.0000000 0.6587479 0.7824958 0.8879799
## hp     0.7629477 0.6587479 1.0000000 0.8324475 0.7909486
## cyl    0.8137493 0.7824958 0.8324475 1.0000000 0.9020329
## hub    0.8798217 0.8879799 0.7909486 0.9020329 1.0000000
```

Varianzinflationsfaktoren

- Um Multikollinearitätprobleme zu diagnostizieren, müssen die Zusammenhangsstrukturen zwischen den Prädiktoren untersucht werden. Das beinhaltet die Analyse des R^2, dass aus der Regression jedes Prädiktors auf alle verbleibenden Prädiktoren resultiert.

$$\mathrm{VIF}_j = \frac{1}{1 - R_j^2} \quad \text{with} \quad j = 1, \ldots, p$$

- R_j^2 bezeichnet das Bestimmtheitsmaß bei der Erklärung von X_j durch alle verbleibenden $p-1$ Prädiktoren. Wenn X_j gut durch die anderen Variablen erklärt werden kann, wird das R_j^2 nah bei 1 sein und in einem großen Wert des VIF_j resultieren.

Ein Wert von VIF > 10 wird oft als Grenzwert gesehen, ab dem man von Multikollinearität in problematischem Ausmaß ausgeht.

Varianzinflationsfaktoren

- Varianzinflationsfaktoren können mit der **R-Funktion** `vif()` aus dem Zusatzpaket `car` berechnet werden.

```
mod1 <- lm(l100km ~ 1 + weight + hp, data=d)
car::vif(mod1)
```

```
##   weight       hp
## 1.766625 1.766625
```

```
mod2 <- lm(l100km ~ 1 + weight + hp + hub + cyl, data=d)
car::vif(mod2)
```

```
##    weight        hp       hub       cyl
##  4.848016  3.405983 10.373286  6.737707
```

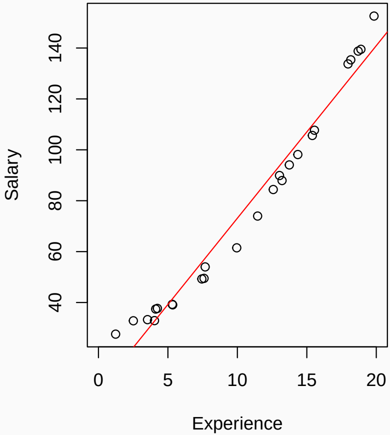
Outline

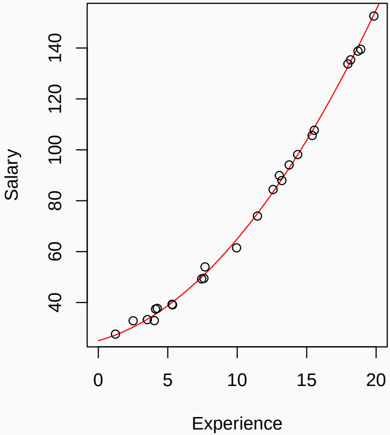
Nichtlinearität

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_1^2 + \epsilon$$

- Die lineare Regression ist linear im Bezug auf die Tatsache, dass die Paramter $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$ **linear** in das Modell eingehen.
- Mit der linearen Regression können dennoch **nicht-lineare** Zusammenhänge modelliert werden indem **nicht-lineare Transformationen** als zusätzliche unabhängige Variablen in das Modell integriert werden.

Welches Modell passt besser zu den gezeigten Daten?





Nichtlinearität

```r
mod1
```

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ 1 + x)
##
## Coefficients:
## (Intercept)            x
##       5.334        6.779
```

```r
mod2
```

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ 1 + x + x_sq)
##
## Coefficients:
## (Intercept)            x         x_sq
##     25.5809       1.4377       0.2498
```

Verständnisfragen

- Wie ist das Bestimmtheitsmaß R^2 bei der multiplen Regression zu interpretieren?
- Was ist damit gemeint, dass die diskutierten Regressionsmodelle lineare Modelle sind?
- Was ist Multikollinearität?