

Statistik

CH.12 - Regression

SS 2022 | | Prof. Dr. Buchwitz, Sommer, Henke

Wirgeben Impulse

Lernziele

- Nachvollziehen der Grundideen des linearen Modells und verinnerlichen der Existenz einer Wirkungsrichtung in der Modellierung.
- Verstehen der Idee der kleinsten Quadrate als zentrale Optimierungsgröße.
- Verknüpfung der inferenzstatistischen vorgehensweise mit der linearen Regression.

■ **Ziel:** Erkennen von Abhängigkeiten und Zusammenhängen zwischen mehreren Merkmalen und Modellierung der Effektgrößen der Zusammenhänge.

Beispiele:

- Umsatz und Werbeetat einer Supermarktkette: Hängt der Umsatz von den eingesetzten Werbemitteln ab?
- Körpergröße und Gewicht von Personen: Ist das Gewicht einer Person von dessen Körpergröße abhängig?
- Benzinpreis und Mineralölpreis: Ist der deutsche Benzinpreis eine Funktion des globalen Mineralölpreises?

Sind die beiden gezeigten Größen voneinander abhängig?

```
##
              х
    [1,] 5.310 32.24
##
##
    [2,] 7.442 35.42
##
    [3.] 11.457 41.16
##
    [4,] 18.164 52.88
##
    [5,] 4.034 28.82
##
    [6,] 17.968 53.04
##
    [7,] 18.894 50.25
##
    [8.] 13.216 44.26
##
    [9.] 12.582 44.82
## [10,] 1.236 27.19
## [11,] 4.119 33.19
## [12,] 3.531 30.15
## [13.] 13.740 46.87
## [14,] 7.682 39.24
## [15,] 15.397 46.37
## [16,] 9.954 36.72
## [17.] 14.352 46.65
## [18.] 19.838 54.17
## [19,] 7.601 35.04
## [20,] 15.549 47.24
## [21.] 18.694 51.42
## [22,] 4.243 33.18
## [23,] 13.033 47.43
## [24,] 2.511 31.25
```

[25.] 5.344 31.94

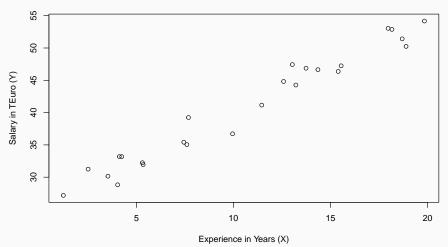
Datenbeschreibung

x Berufserfahrung in Jahren

у Gehalt in Euro

Sind die beiden gezeigten Größen voneinander abhängig?

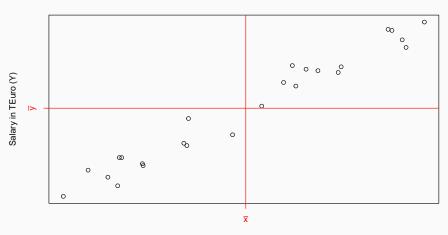




$$Y = f(X) + \epsilon$$

- Wir betrachten zunächst den einfachen Fall, bei dem die abhängige Variable Y durch eine unabhängige Variable X erklärt wird. Unabhängige Variablen bezeichnet man auch als Regressoren oder Prädiktoren.
- ϵ bezeichnet den Anpassungsfehler und wird Fehlerterm oder Residuum genannt.
- Wir verzichten auf die vollständige Herleitung der gezeigten Formeln und fokussieren uns auf die zugrundeliegenden Mechanismen und die zugehörige Intuition.

Salary vs. Experience



Experience in Years (X)

Aufgabe: Bestimmen des Vorzeichens

- $\mathbf{y}_i \bar{\mathbf{y}}$ ist die Differenz jeder Beobachtung \mathbf{y}_i vom arithmetischen Mittel der abhängigen Variablen
- $\mathbf{x}_i \bar{\mathbf{x}}$ ist die Abweichung \mathbf{x}_i vom arithmetischen Mittel des Prädiktors
- $(y_i \bar{y})(x_i \bar{x})$ ist das Produkt der vorherigen beiden Größen

Quadrant	\$y_i -\bar{y}\$	\$x_i - \bar{x}\$	\$(y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})\$
1 (top right)			
2 (top left) 3 (bottom left)			
4 (bottom right)			

Positiver Zusammenhang

- Wenn der Zusammenhang zwischen Y und X positiv ist (also wenn X größer wird, dann wird auch Y größer), dann sind mehr Datenpunkte im ersten und dritten Quadranten als im zweiten und vierten.
- Die Summe der Elemente in der letzten Spalte der vorherigen Tabelle ist dann mit großer Wahrscheinlichkeit positiv, also Cov(Y, X) > 0.

9

Positiver Zusammenhang

- Wenn der Zusammenhang zwischen Y und X positiv ist (also wenn X größer wird, dann wird auch Y größer), dann sind mehr Datenpunkte im ersten und dritten Quadranten als im zweiten und vierten.
- Die Summe der Elemente in der letzten Spalte der vorherigen Tabelle ist dann mit großer Wahrscheinlichkeit positiv, also Cov(Y, X) > 0.

Negativer Zusammenhang

- Wenn der lineare Zusammenhang zwischen Y und X negativ ist (z.B. wenn X sinkt, steigt Y), dann befinden sich mehr Datenpunkte im zweiten und vierten Quadranten als im ersten und dritten.
- Die Summe der Elemente in der letzten Spalte der vorherigen Tabelle ist dann mit großer Wahrscheinlichkeit negativ, also Cov(Y, X) < 0.

9

$$Cov(X, Y) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})$$

- Die aufwändig berechnete Größe ist die Kovarianz zwischen Y und X.
- Das Vorzeichen der Kovarianz gibt die Richtung des Zusammenhangs zwischen Y und X an.
- Die Kovarianz gibt nur die Richtung des Zusammenhangs an und erlaubt keine Beurteilung der Stärke dieses Zusammenhangs.
- Die Kovarianz verändert sich mit Veränderungen der Einheit der Daten (z.B. von Euro in TEuro).

Your turn

Wie ändert sich die Kovarianz, wenn Sie Cov(X, Y) anstelle von Cov(Y, X) berechnen?

Korrelationskoeffizient

$$Cor(Y, X) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^{n} (\frac{y_i - \bar{y}}{s_y}) (\frac{x_i - \bar{x}}{s_x}) = \frac{Cov(Y, X)}{s_y s_x}$$

- Cor(Y, X) kann auf zwei Arten interpretiert werden:
 - als Kovarianz der z-standardisierten Variablen X und Y.
 - als Verhältnis von Kovarianz zum Produkt der Standardweichungen der Variablen.
- Im Gegensatz zur Kovarianz ist Cor(Y,X) skaleninvariant mit einem Wertebereich von $-1 \ge Cor(Y,X) \le 1$ und erlaubt daher die Beurteilung von **Richtung** und **Stärke** des Zusammenhangs.

Kovarianz und Korrelation

```
cov(y, x)

## [1] 49.67

cor(y, x)

## [1] 0.981
```

Verwendung des Zusammenhangs

Kovarianz und Korrelationskoeffizient können nicht für Vorhersagen (X gegeben und Y gesucht) verwendet werden!

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

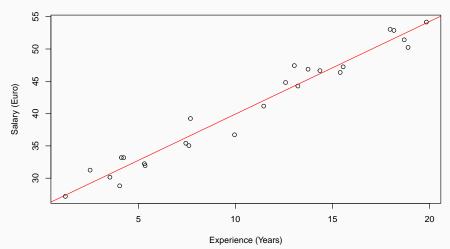
- Regressionsanalyse ist eine Erweiterung der Korrelationsanalyse und erlaubt es, den Zusammehang zwischen abhängiger und unabhängigen Variablen numerisch zu beschreiben.
- eta_0 und eta_1 sind Konstanten, die als **Regressionskoeffizienten** bezeichnet werden, ϵ ist der Fehlerterm
 - ho ist der Achsenabschnitt und ist der vorhergesagte Wert, wenn X = 0.
 - β_1 ist die Steigung und kann interpretiert werden als Änderung in Y, wenn X sich um eine Einheit erhöht.

Parameterschätzung

Wie bestimmen wir Werte für β_0 und β_1 ?

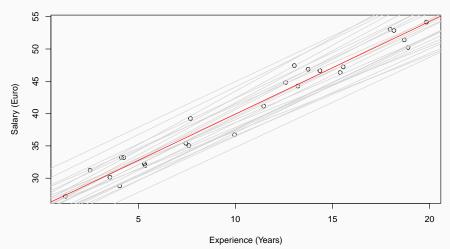
Parameterschätzung



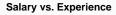


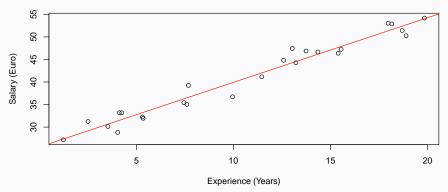
Parameterschätzung





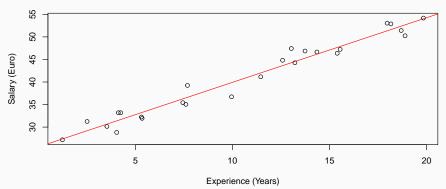
Residuen: Wieso ist die eingezeichnete Gerade optimal?





Residuen: Wieso ist die eingezeichnete Gerade optimal?





Minimieren:
$$S(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - (\beta_0 + \beta_1 \cdot x_i))^2$$

$$S(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - (\beta_0 + \beta_1 \cdot x_i))^2$$

- Die quadratische Funktion $S(\beta_0, \beta_1)$ muss minimiert werden und liefert dann die Lösung $\hat{\beta}_0$ und $\hat{\beta}_1$. Diese Werte werden zuweilen auch mit b_0 und b_1 bezeichnet.
- Die Werte $\hat{\beta}_0 = b_0$ und $\hat{\beta}_1 = b_1$ werden **Kleinste-Quadrate-Schätzer** (Ordinary Least Squares Estimates, OLS Estimates) genannt und spezifizieren die Gerade mit der kleinsten möglichen Summe der quadrierten vertikalen Distanzen zu den Beobachtungen.

Die mit der Methode der kleinsten Quadrate bestimmten Regresssionslinie existiert immer und ist gegeben durch:

$$\hat{Y} = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 X$$

Mit Hilfe der Beobachtungsgleichung können die angepassten Werte (fitted Values) berechnet werden:

$$\hat{y}_i = \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1 x_i$$
 for $i = 1, 2, ..., n$

- Jeder Punkt (x_i, \hat{y}_i) liegt auf der Regressionsgerade.
- Die zugehörigen Residuen (Ordinary Least Squares Residuals) geben die vertikale Distanz zwischen Beobachtung und Gerade (Anpassungsfehler) an und können wie folgt berechnet werden:

$$\hat{\epsilon}_i = y_i - \hat{y}_i$$
 for $i = 1, 2, \dots, n$

Analytische Lösung

■ Für die Lösung des Minimierungsproblems gibt es eine analytische Lösung:

$$\hat{\beta}_1 = b_1 = \frac{\sum (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sum (x_i - \bar{x})^2}$$
 und $\hat{\beta}_0 = b_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$

Herleitung der Formeln:

- Minimierung der quadratischen Funktion $S(\beta_0, \beta_1)$ mit Hilfe der Differentialrechnung
- lacksquare Bildung der partiellen Ableitungen nach b_0 and b_1
- Setzen der Ableitungen = 0
- Lösen des resultierenden Gleichungssystems
- Die gezeigten Formeln sind die erhaltene Lösung

```
summary(x) # Experience in Years
   Min. 1st Qu. Median Mean 3rd Qu.
                                     Max.
   1.24 5.31 11.46 10.64 15.40 19.84
summary(y) # Salary in Euro
   Min. 1st Qu. Median Mean 3rd Qu.
                                     Max.
   27.2 33.2 41.2 40.8 47.2 54.2
cor(y,x)
## [1] 0.981
lm(y \sim 1 + x)
##
## Call:
## lm(formula = y ~ 1 + x)
##
## Coefficients:
## (Intercept)
   25.60 1.43
##
```

Hypothesentests

- Die bestimmte Gerade beschreibt die Daten der Stichprobe. Interessant ist jedoch die Frage, ob der Zusammenhang auch verallgemeinert werden und für die Grundgesamtheit angenommen werden kann.
- Prüfen der Hypothese β_1 = 0 ist äquivalent zur Aussage, dass **kein linearer Zusammenhang** vorhanden ist.
- Sollte $\beta_1 > 0$ oder $\beta_1 < 0$ gelten (Annahme der entsprechenden Alternativhypothese), liefert **Evidenz** (keinen Beweis) für die Existenz eines linearen Zusammenhangs.

Hypothesentests

■ Unter der Annahme, dass die Residuen **unabhängig und gleich verteilt** (i.i.d.) sind ($\epsilon \sim N(0, \sigma^2)$), kann die Residualvarianz σ^2 geschätzt werden.

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\sum \epsilon_i^2}{n-2} = \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{n-2} = \frac{SSE}{n-2}$$

■ Mit Hilfe der geschätzten Residualvarianz $\hat{\sigma}^2$ kann der Standardfehler (s.e.) der Regressionsparameter geschätzt werden.

$$s.e.(\hat{\beta}_0) = \hat{\sigma}^2 \sqrt{\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{\sum (x_i - \bar{x})^2}} \quad \text{und} \quad s.e.(\hat{\beta}_1) = \frac{\hat{\sigma}^2}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2}}$$

Hypothesentests

 Unter der Annahme der Normalverteilung kann der t-Test für die Regressionskoeffizienten durchgeführt werden:

$$H_0: \beta_1 = 0$$
 versus $H_1: \beta_1 \neq 0$

■ Die Teststatistik t folgt einer t-Verteilung mit n-2 Freiheitsgraden. Ergänzend muss noch eine Irrtumswahrscheinlichkeit α für den Test festgelegt werden.

$$t_1 = \frac{\hat{\beta}_1}{s.e.(\hat{\beta}_1)}$$

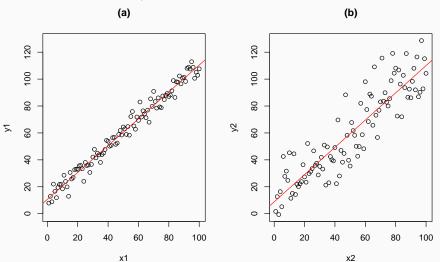
■ Die Nullhypothese β_1 = 0 kann für eine gegebene Irrtumswahrscheinlichkeit α verworfen werden, wenn gilt:

$$|t| \geq t_{(n-2,1-\alpha/2)}$$

```
summary(lm(y \sim 1 + x))
##
## Call:
## lm(formula = v ~ 1 + x)
##
## Residuals:
##
     Min 10 Median 30 Max
## -3.141 -0.966 -0.270 1.502 3.158
##
## Coefficients:
##
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 25.601 0.714 35.8 <2e-16 ***
              1.433 0.059 24.3 <2e-16 ***
## x
## ---
## Signif. codes: 0 '*** 0.001 '** 0.01 '* 0.05 '.' 0.1 ' 1
##
## Residual standard error: 1.7 on 23 degrees of freedom
## Multiple R-squared: 0.962, Adjusted R-squared: 0.961
## F-statistic: 589 on 1 and 23 DF, p-value: <2e-16
```

Anpassungsgüte

Welche Gerade hat eine höhere Anpassungsgüte und bildet daher den Sachverhalt in den Daten präziser ab?



Anpassungsgüte

Definition von Streugrößen:

$$SST = \sum (y_i - \bar{y})^2 \qquad SSR = \sum (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \qquad SSE = \sum (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- Sum of Squares Total (SST) ist die gesamte Abweichung von Y vom zugehörigen arithmetischem Mittel ȳ.
- Sum of Squares Regression (SSR) ist die erklärte Variation, die durch die Regressionsgerade abgebildet werden kann.
- Sum of Squares Error (SSE) ist die unerklärte Streuung und die Varianz der Residuen.

Bestimmtheitsmaß

- **SSR** misst die Qualität von X als Prädiktor für Y
- SSE misst den Fehler in dieser Prädiktion
- Das Verhältnis R^2 = SSR/SST ist der Anteil der durch X erklärten Varianz an der totalen Varianz. Zur Beurteilung der Anpassungsgüte einer Regressionsgerade kann entsprechend das Bestimmtheitsmaß R^2 herangezogen werden.

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST} = [Cor(Y, \hat{Y})]^2$$

■ Es gilt $0 \le R^2 \le 1$ und je näher R^2 an 1 liegt, desto intensiver ausgeprägt ist der lineare Zusammenhang.

Im Fall von nur einem einzigen Prädiktor gilt zudem $[Cor(Y,X)]^2!$

```
summary(lm(y \sim 1 + x))
##
## Call:
## lm(formula = v ~ 1 + x)
##
## Residuals:
##
     Min 10 Median 30 Max
## -3.141 -0.966 -0.270 1.502 3.158
##
## Coefficients:
##
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 25.601 0.714 35.8 <2e-16 ***
              1.433 0.059 24.3 <2e-16 ***
## x
## ---
## Signif. codes: 0 '*** 0.001 '** 0.01 '* 0.05 '.' 0.1 ' 1
##
## Residual standard error: 1.7 on 23 degrees of freedom
## Multiple R-squared: 0.962, Adjusted R-squared: 0.961
## F-statistic: 589 on 1 and 23 DF, p-value: <2e-16
```

Verständnisfragen

- Wozu wird die Methode der linearen Regression verwendet?
- Was ist die zugrundeliegende Methodik zur Bestimmung der Parameter der Regressionsgeraden?
- Wozu dient das Bestimmtheitsmaß R²?