Fachhochschule Südwestfalen
University of Applied Sciences

# Statistik

CH.13 - Multiple Regression

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

Wir geben Impulse

# Lernziele

- Ziel 1
- Ziel 2
- Ziel 3

# Inhaltsübersicht

# 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 des 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 $\beta_0, \beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_p$ in die Gleichung ein. Der Fehlerterm $\epsilon$ 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 $\epsilon_i$ ist der Anpassungsfehler (Fehlerterm) der linearen Approximation für die $i$-te Beobachtungseinheit.

# Beispiel: Autodaten

```
d
```

```
##                     l100km weight  hp  cyl   hub
## Mazda RX4           11.201 1.1884 110    6 2.622
## Mazda RX4 Wag       11.201 1.3041 110    6 2.622
## Datsun 710          10.316 1.0523  93    4 1.770
## Hornet 4 Drive      10.991 1.4583 110    6 4.228
## Hornet Sportabout   12.578 1.5604 175    8 5.899
## Valiant             12.995 1.5694 105    6 3.687
## Duster 360          16.449 1.6193 245    8 5.899
## Merc 240D            9.640 1.4470  62    4 2.404
## Merc 230            10.316 1.4288  95    4 2.307
## Merc 280            12.251 1.5604 123    6 2.746
## Merc 280C           13.214 1.5604 123    6 2.746
## Merc 450SE          14.342 1.8461 180    8 4.520
## Merc 450SL          13.596 1.6919 180    8 4.520
## Merc 450SLC         15.475 1.7146 180    8 4.520
## Cadillac Fleetwood  22.617 2.3814 205    8 7.735
## Lincoln Continental 22.617 2.4603 215    8 7.538
## Chrysler Imperial   16.001 2.4244 230    8 7.210
## Fiat 128             7.260 0.9979  66    4 1.290
## Honda Civic          7.737 0.7326  52    4 1.241
## Toyota Corolla       6.938 0.8323  65    4 1.165
## Toyota Corona       10.940 1.1181  97    4 1.968
## Dodge Challenger    15.175 1.5966 150    8 5.211
## AMC Javelin         15.475 1.5581 150    8 4.982
## Camaro Z28          17.685 1.7418 245    8 5.735
## Pontiac Firebird    12.251 1.7441 175    8 6.555
## Fiat X1-9            8.616 0.8777  66    4 1.295
## Porsche 914-2        9.047 0.9707  91    4 1.971
## Lotus Europa         7.737 0.6863 113    4 1.558
## Ford Pantera L      14.887 1.4379 264    8 5.752
## Ferrari Dino        11.940 1.2564 175    6 2.376
## Maserati Bora       15.681 1.6193 335    8 4.933
```

**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

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

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

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

```
##            Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
## l100km  6.9385  10.316  12.251  12.755  15.250  22.617
## weight  0.6863   1.171   1.508   1.459   1.637   2.460
## hp     52.0000  96.500 123.000 146.688 180.000 335.000
## cyl     4.0000   4.000   6.000   6.188   8.000   8.000
## hub     1.1651   1.980   3.217   3.781   5.342   7.735
```

# Beispiel: Autodaten

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

```
##          l100km  weight      hp      cyl      hub
## l100km   14.925  1.5258  202.09   5.6144   6.9033
## weight    1.526  0.1970   20.05   0.6202   0.8004
## hp      202.086 20.0454 4700.87 101.9315 110.1403
## cyl       5.614  0.6202  101.93   3.1895   3.2719
## hub       6.903  0.8004  110.14   3.2719   4.1249
```

```
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

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

- 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.

# 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.

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

```
##
## Call:
## lm(formula = l100km ~ 1 + weight + hp, data = d)
##
## Coefficients:
## (Intercept)       weight           hp
##      1.4831       5.9558       0.0176
```

- 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.
- $\beta_0$ ist der Achsenabschnitt und der abgebildete Wert von $Y$, wenn $X_1 = X_2 = \ldots = X_p = 0$.
- Die Steigungskoeffizienten $\beta_j$ haben mehrere Interpretationen:
    - $\beta_j$ ist die **Veränderung** in $Y$, wenn sich $X_j$ um eine Einheit erhöht und alle anderen Prädiktoren konstant gehalten werden (ceteris paribus).
    - $\beta_j$ 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
## -3.968 -1.167  0.180  0.941  3.344
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  1.48306    0.96288    1.54    0.134
## weight       5.95580    0.84011    7.09  8.4e-08 ***
## hp           0.01759    0.00544    3.23    0.003 **
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 1.56 on 29 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.847,  Adjusted R-squared:  0.837
## F-statistic: 80.3 on 2 and 29 DF,  p-value: 1.49e-12
```

**Your Turn**

Interpretieren Sie die Schätzergebnisse ($\alpha$ = 0.05) und das Gütemaß des Regressionsmodells.

# Darstellung und Interpretation

- In wissenschaftlichen Aufsätzen werden Regressionsmodelle häufig schrittweise aufgebaut und 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 |

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

**Table 1:** Statistical models

# Inhaltsübersicht

# 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 $\alpha$.
- Das bedeutet, dass das reduzierte Modell (RM) nicht zufriedenstellend ist und die Nullhypothese (und die entsprechenden Werte für die $\beta$'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

```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
## -3.968 -1.167  0.180  0.941  3.344
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept)  1.48306    0.96288    1.54    0.134
## weight       5.95580    0.84011    7.09  8.4e-08 ***
## hp           0.01759    0.00544    3.23    0.003 **
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 1.56 on 29 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.847,  Adjusted R-squared:  0.837
## F-statistic: 80.3 on 2 and 29 DF,  p-value: 1.49e-12
```

# Inhaltsübersicht

# Residualdiagnostik

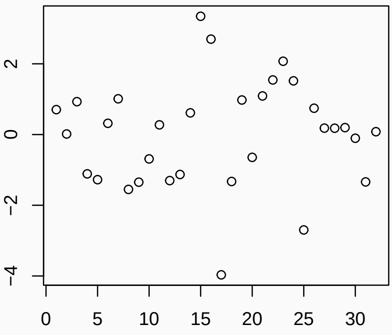
- Modellierungsprobelme, wie inkorrekt spezifizierte Modelle, fehlende und vergessene Variablen **äußern sich häufig in einer Verletzung der Annahmen der Residuen**.
- Um zu überprüfen, ob das ausgewählte Regressionsmodell den theoretischen Anforderungen genügt, müssen daher die Residuen inspiziert werden. Dieses Prozess nennt man Resdiualdiagnostik.
- 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

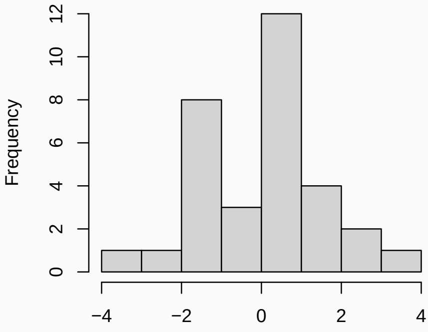
- Darstellung Residuen der Regression Kraftstroffverbrauch $Y$ erklärt durch Fahrzeuggewicht ($X_1$) und Motorleistung ($X_2$).

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

**Indexplot der Residuen**




**Histogramm der Residuen**



# Inhaltsübersicht

# Multikollinearität

- Die Interpretation der Koeffizienten eines multiplen Regressionsmodells setzt voraus, 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

```r
cor(d)
```

```
##        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
```

# Varianzinflationsfaktoren

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

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

- $R_j^2$ 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 $\mathrm{VIF}_j$ 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
##  1.767  1.767
```

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

```
## weight     hp    hub    cyl
##  4.848  3.406 10.373  6.738
```

# Inhaltsübersicht

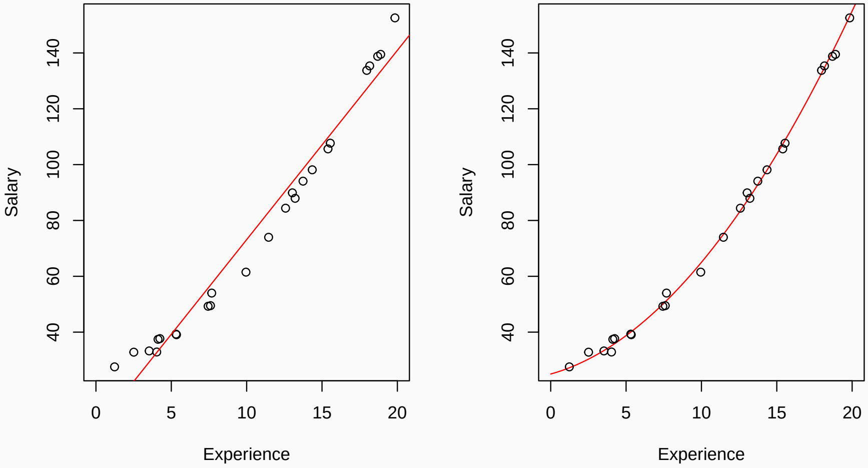
# Nichtlinearität

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

- 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.

# Nichtlinearität

**Welches Modell passt besser zu den gezeigten Daten?**



# Nichtlinearität

```
mod1
```

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ 1 + x)
##
## Coefficients:
## (Intercept)            x
##        5.33         6.78
```

```
mod2
```

```
##
## Call:
## lm(formula = y ~ 1 + x + x_sq)
##
## Coefficients:
## (Intercept)            x         x_sq
##       25.58         1.44         0.25
```

# 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?