Fachhochschule Südwestfalen
University of Applied Sciences

Statistik

CH.13 - Multiple Regression

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

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 der Zusammenhang 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 multiplen 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 $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_p$ 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           11.201 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

```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   6.9385  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

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

Your Turn

Schreiben Sie die zugehörige Regressionsgleichung auf.

```
##
## 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.
- 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
## -3.968 -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.

- 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 α.
- Das bedeutet, 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

```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

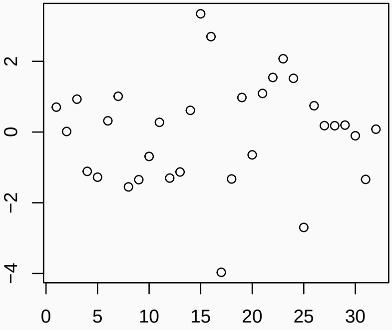
- Modellierungsprobelme wie inkorrekt spezifizierte Modelle, fehlende und vergessene Variablen **äußern sich häufig in einer Verletzung der Annahmen der Residuen**.
- Um zu überprüfen, ob das ausgewählte Regressionsmodell den theoretischen Anforderungen genügt, müssen daher die Residuen inspiziert werden.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

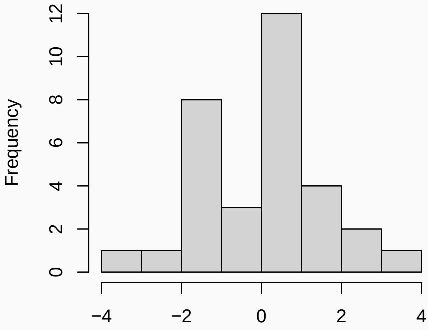
- Darstellung Residuen der Regression Kraftstroffverbrauch Y erklärt durch Fahrzeuggewicht (X_1) und Motorleistung (X_2).

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

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 Multikollinearitätsprobleme 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 VIF_j resultieren.

Ein Wert von $\mathrm{VIF} > 10$ 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

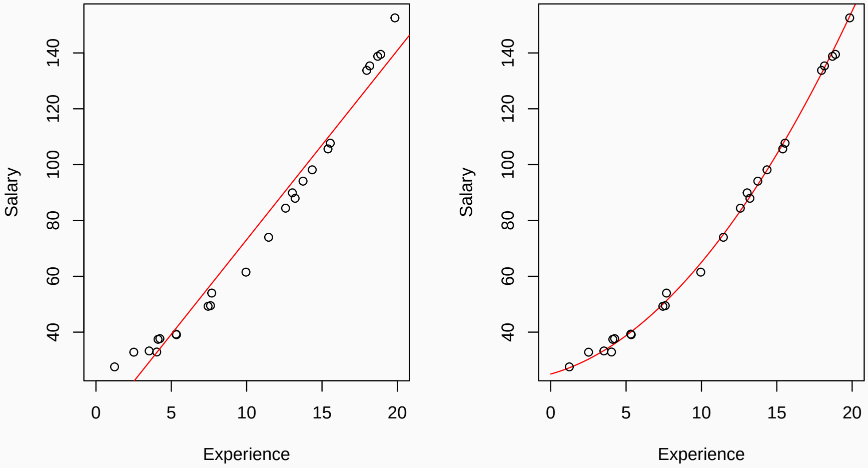
Nichtlinearität

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

- Die lineare Regression ist linear in Bezug auf die Tatsache, dass die Parameter $\beta_0, \beta_1, \ldots, \beta_p$ **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?