

# Statistik

CH.13 - Multiple Regression

2024 || Prof. Dr. Buchwitz, Sommer, Henke

Wir geben Impulse

- Erweitern des Prinzips der einfachen linearen Regression auf mehrere Variablen.
- Unterscheidung zwischen und Test von Partial- und aggregierten Effekten mittels Hypothesentest.
- Identifikation von und Umgang mit speziellen Problemen (Residualannahmen, Multikollinearität, Nichtlinearität) im Kontext der Regression.

1 Multiple Lineare Regression

2 Hypothesentests

3 Residualdiagnostik

4 Multikollinearität

5 Nichtlinearität

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

- 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  $X_1, X_2, \dots, X_p$ .

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

- 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  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$  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.

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

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

- Aus der Modellgleichung folgt die obige Darstellung für jede Beobachtung. Dabei repräsentiert  $y_i$  die  $i$ -te Beobachtung der abhängigen Variablen  $Y$ . Die Werte  $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip}$  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

	1100km	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

1100km 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.
## 1100km	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
```

# Multiple Linear Regression

Wovon ist die Größe 1100km abhängig?



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

- 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.

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

- 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  $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$  bei der multiplen linearen Regression bestimmt werden?

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



- **Lösung:** Minimieren der Fehlerquadratsumme nach dem Prinzip der kleinsten Quadrate (Kleinste-Quadrate-Schätzung).
- Der Anpassungsfehler für jede Beobachtung ergibt sich aus der umgestellten Beobachtungsgleichung:

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

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

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

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

## 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.

- 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  $X_1 = X_2 = \dots = X_p = 0$ .
- 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.



```
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 (1.10)	6.45*** (1.07)	1.48 (0.96)
weight	7.75*** (0.72)		5.96*** (0.84)
hp		0.04*** (0.01)	0.02** (0.01)
R <sup>2</sup>	0.79	0.58	0.85
Adj. R <sup>2</sup>	0.78	0.57	0.84
Num. obs.	32	32	32

\*\*\*  $p < 0.001$ ; \*\*  $p < 0.01$ ; \*  $p < 0.05$

**Table 1:** Statistical models

1 Multiple Lineare Regression

2 Hypothesentests

3 Residualdiagnostik

4 Multikollinearität

5 Nichtlinearität

- 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  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_p$  gleich 0 sind, also zu prüfen:

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

$$\text{FM: } Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_p X_p + \epsilon$$

$$\text{RM: } Y = \beta_0 + \epsilon$$

- 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.

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

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

- Die Differenz  $SSE(RM) - SSE(FM)$  gibt die Erhöhung der Residualstreuung durch Rückgriff auf das reduzierte Modell 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

```
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
```

1 Multiple Lineare Regression

2 Hypothesentests

3 Residualdiagnostik

4 Multikollinearität

5 Nichtlinearität



- Modellierungsprobleme 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 Zusammenhangsstruktur 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.

- Darstellung Residuen der Regression Kraftstoffverbrauch  $Y$  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



1 Multiple Lineare Regression

2 Hypothesentests

3 Residualdiagnostik

4 Multikollinearität

5 Nichtlinearität

- 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.

```
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
```

- 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.

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

- $R_j^2$  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  $\text{VIF}_j$  resultieren.

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

- 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
```

1 Multiple Lineare Regression

2 Hypothesentests

3 Residualdiagnostik

4 Multikollinearität

5 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  $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$  **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?



```
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
```

- 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?