Multiple Lineare Regression

Peter von Rohr

Qualitas AG

Outline

- Das Modell
- Stochastische Komponente: Zufälliger Rest
- Methode der kleinsten Quadrate - Least Squares
- Annahmen und Eigenschaften
- Tests und Konfidenzintervalle
- Analyse der Residuen
- Modellwahl

Das linear Modell

- Gegeben: **Zielgrösse** (response variable) y_i für Individuum i. Entspricht einer Beobachtung oder Messung, welche zu i gehört.
- Gegeben: mehrere **erklärende Variablen** (predictors or covariables) $x_{i,1}, x_{i,2}, ..., x_{i,p}$, welche Eigenschaften von i beschreiben
- Zusammengefasst wissen wir von Individuum i: $(x_{i,1}, x_{i,2}, ..., x_{i,p}, y_i)$

- Multiple lineare Regression sagt:

Zielgrösse = **lineare** Funktion der **erklärenden Variablen** + **Rest**

Das Modell als Formel

$$y_i = \beta_1 x_{i,1} + \beta_2 x_{i,2} + \ldots + \beta_p x_{i,p} + \epsilon_i$$

- In einer Population mit n Individuen, können wir n solche Gleichungen aufstellen, wobei die i von 1 bis n laufen
- Zur Vereinfachung wird eine Matrix-Vektor Schreibweise verwendet

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \epsilon \tag{1}$$

wobei:

$\mathbf{y}$	Vektor mit Beobachtungen (Länge n)
β	Vektor mit Parametern (Länge p)
$\mathbf{X}$	Matrix mit erklärenden Variablen (Dimension $n \times p$)
ϵ	Vektor mit zufälligen Resten (Länge n)

Stochastisches Modell

- Zufällige Komponente ϵ im Lineares Modell (siehe Gleichung (1))
- Somit ist die Zielgrösse ($\mathbf{y}$) auch zufällig
- In unserem Beispiel sind die erklärenden Variablen als fix angenommen
- In gewissen Anwendungen können auch erklärende Variablen als zufällig angenommen werden (BLUP-Zuchtwertschätzung)
- Verschiedene Einflüsse auf ϵ: Messfehler, unbekannte Einflussfaktoren
- Annahme: unbekannte Faktoren haben sich im "Mittel" auf $\rightarrow E(\epsilon) = \mathbf{0}$
- Streuung wird quantifiziert mit: $var(\epsilon) = \mathbf{I} * \sigma^2$

Beispiel

Einfluss des Geburtsgewichts (BW) und Zunahme vor dem Absetzen (WWG) auf Zunahme nach dem Absetzen (PWG)

Calf	BW	WWG	PWG
1	35.0	0.90	1.36
2	25.3	0.58	1.00
3	34.2	0.78	1.36
4	31.2	0.70	1.20
5	38.7	1.00	1.50

Identifikation der Komponenten des Modells

Calf	BW	WWG	PWG
1	35.0	0.90	1.36
2	25.3	0.58	1.00
3	34.2	0.78	1.36
4	31.2	0.70	1.20
5	38.7	1.00	1.50

x1 x2 y

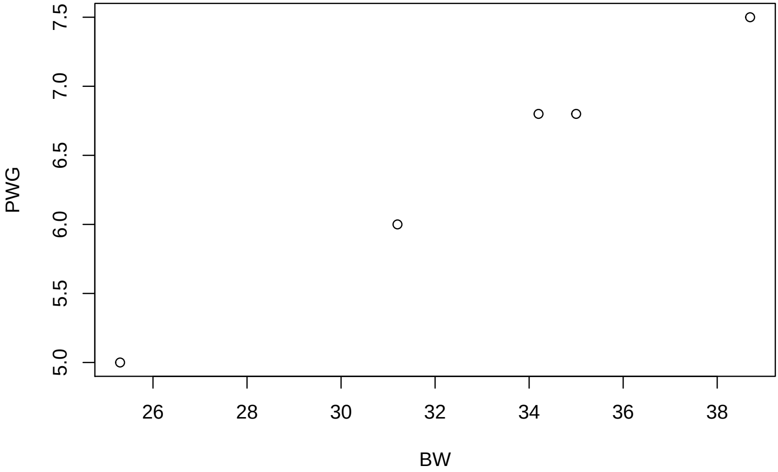
Komponenten als Formeln

$$y = \begin{bmatrix} 6.8 \\ 5.0 \\ 6.8 \\ 6.0 \\ 7.5 \end{bmatrix}, \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 35.00 & 0.90 \\ 25.30 & 0.58 \\ 34.20 & 0.78 \\ 31.20 & 0.70 \\ 38.70 & 1.00 \end{bmatrix}, \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix}, \epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_1 \\ \epsilon_2 \\ \epsilon_3 \\ \epsilon_4 \\ \epsilon_5 \end{bmatrix} \qquad (2)$$

- Achsenabschnitt: **y** und ϵ ändern sich nicht

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & 35.00 & 0.90 \\ 1 & 25.30 & 0.58 \\ 1 & 34.20 & 0.78 \\ 1 & 31.20 & 0.70 \\ 1 & 38.70 & 1.00 \end{bmatrix}, \beta = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{bmatrix} \qquad (3)$$

Weshalb ein Achsenabschnitt



Quadratische Regression und Transformationen

- **Wichtig**: Auch das sind lineare Regressionen

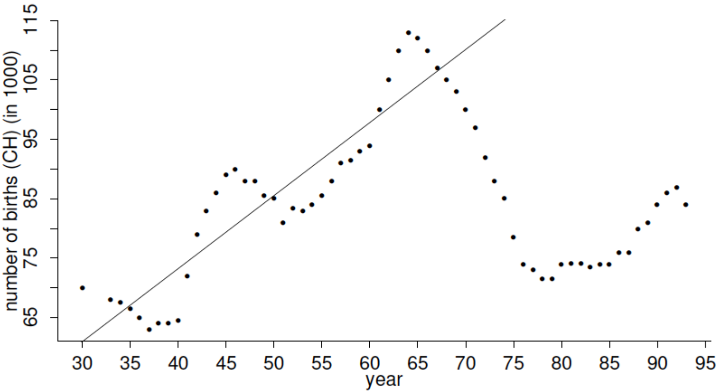
$$\mathbf{X} = \left[\begin{array}{ccc} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \\ 1 & x_4 & x_4^2 \\ 1 & x_5 & x_5^2 \end{array}\right], \mathbf{X} = \left[\begin{array}{ccc} 1 & log(x_{12}) & sin(x_{13}) \\ 1 & log(x_{22}) & sin(x_{23}) \\ 1 & log(x_{32}) & sin(x_{33}) \\ 1 & log(x_{42}) & sin(x_{43}) \\ 1 & log(x_{52}) & sin(x_{53}) \end{array}\right] \tag{4}$$

$\rightarrow$ Modell $\mathbf{y} = \mathbf{X}\beta + \epsilon$ heisst **lineares** Modell, weil es linear in den Koeffizienten β ist.

Ziele einer Regression

- **Anpassung**: Möglichst kleine Abweichungen der angepassten Ebenen und der Zielgrösse
- Gute **Schätzung** der unbekannten Parameter: Sollen Änderungen der Zielgrösse in Abhängigkeit der Änderung der erklärenden Variablen darstellen
- Gute **Voraussage**: Soll neue Zielgrössen als Funktion von neuen Werten der erklärenden Variablen voraussagen können. **Achtung**: keine Extrapolation
- **Unsicherheit** bei der Schätzung: Vertrauensintervallen und statistische Tests als gute Werkzeuge

Keine Extrapolation



Schätzung der Parameter

- Methode der kleinsten Quadrate (Least Squares)
- Suche einer guten Schätzung für β, so dass die Abweichungen oder Reste möglichst klein sind
- Mathematische Formulierung: Abweichungen entsprechen

$$L = ||\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta||^2 = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)$$

- Möglichst kleine Abweichung: Minimierung durch Ableiten und die Ableitung 0 setzen
- Somit ist der Least Squares Schätzer $\hat{\beta}$ definiert als

$$\hat{\beta} = argmin_{\beta}||\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta||^2$$

Normalgleichungen

- Der Schätzer $\hat{\beta}$ berechnet sich als p dimensionaler Gradient

$$\frac{\partial L}{\partial \beta} = (-2)\mathbf{X}^T(\mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\beta})$$

- Daraus folgen die **Normalgleichungen**

$$(\mathbf{X}^T\mathbf{X})\hat{\beta} = \mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

- Auflösung nach $\hat{\beta}$

$$\hat{\beta} = (\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}^T\mathbf{y}$$

Restvarianz

- Least Squares liefert eigentlich keine Schätzung für die Restvarianz σ^2
- Aufgrund der Residuen $r_i = y_i - \mathbf{x}_i^T\hat{\beta}$, ergibt sich die Schätzung

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-p}\sum_{i=1}^{n} r_i^2$$

- Schätzung ist plausible, da sie auf der Momentenmethode basiert
- Ungewöhnlicher Faktor $1/(n-p)$ so gewählt, dass:

$$E(\hat{\sigma}^2) = \sigma^2$$

- Dieser Schätzer wird oft als Least-Squares Schätzer für σ^2 bezeichnet

Annahmen für ein lineares Modell

- Ausser, dass die Matrix $\mathbf{X}$ vollen Rang hat ($p < n$) wurden bis jetzt keine Annahmen gemacht
- Lineares Modell ist korrekt $\rightarrow E(\epsilon) = \mathbf{0}$
- Die Werte in $\mathbf{X}$ sind exakt
- Die Varianz der Fehler ist konstant ("Homoskedazidität") für alle Beobachtungen $\rightarrow Var(\epsilon) = \mathbf{I} * \sigma^2$
- Die Fehler sind unkorreliert
- Weitere Eigenschaften folgen, falls die Fehler normal verteilt sind