Aufgabenblatt 1

(Teil 1)[1]

UK Erweiterungen des linearen Modells

Cordula Eggerth

Matrikelnummer: 00750881

Kursleiter:

Prof. Dr. Marcus Hudec &

Prof. Dr. Wilfried Grossmann

Sommersemester 2019

[1] Upload-Datenvolumen war begrenzt, daher musste ich 2 Teile der Ausarbeitung anfertigen.

Aufgabe 1:

Führen Sie mit dem Datensatz *mtcars* verschiedene sinnvolle regressionsanalytische Auswertungen und Visualisierungen durch.

Als Vorlage können Ihnen die Auswertungen und R-Codes aus dem Kapitel 01 dienen.

Der mtcars Datensatz stammt aus dem Motor Trend US Magazin und bietet Informationen über den Treibstoffverbrauch, die Anzahl an Zylindern und weiteren Messzahlen bezüglich Kraftfahrzeugdesign und -leistung für Automodelle (aus den Jahren 1973 und 1974).[2] Der Datensatz enthält 32 Beobachtungen.

Die Abkürzungen in den 11 Dataframe-Spalten beziehen sich auf die genannten Eigenschaften der Automodelle: [3]

- mpg … Miles per US Gallon
- cyl … Nr. of Cylinders
- disp … Displacement (in cubic inch)
- hp … Gross Horsepower
- drat … Rear Axle Ratio
- wt … Weight (1000 lbs)
- qsec … ¼ Mile Time
- vs … Engine (0=V-shaped; 1=Straight)
- am … Transmission (0=Automatic; 1=Manual)
- gear … Nr. of Forward Gears

Der Datensatz mtcars:

```
> mtcars
                     mpg cyl  disp  hp drat    wt  qsec vs am gear carb
Mazda RX4           21.0   6 160.0 110 3.90 2.620 16.46  0  1    4    4
Mazda RX4 Wag       21.0   6 160.0 110 3.90 2.875 17.02  0  1    4    4
Datsun 710          22.8   4 108.0  93 3.85 2.320 18.61  1  1    4    1
Hornet 4 Drive      21.4   6 258.0 110 3.08 3.215 19.44  1  0    3    1
Hornet Sportabout   18.7   8 360.0 175 3.15 3.440 17.02  0  0    3    2
Valiant             18.1   6 225.0 105 2.76 3.460 20.22  1  0    3    1
Duster 360          14.3   8 360.0 245 3.21 3.570 15.84  0  0    3    4
Merc 240D           24.4   4 146.7  62 3.69 3.190 20.00  1  0    4    2
Merc 230            22.8   4 140.8  95 3.92 3.150 22.90  1  0    4    2
Merc 280            19.2   6 167.6 123 3.92 3.440 18.30  1  0    4    4
Merc 280C           17.8   6 167.6 123 3.92 3.440 18.90  1  0    4    4
Merc 450SE          16.4   8 275.8 180 3.07 4.070 17.40  0  0    3    3
Merc 450SL          17.3   8 275.8 180 3.07 3.730 17.60  0  0    3    3
Merc 450SLC         15.2   8 275.8 180 3.07 3.780 18.00  0  0    3    3
Cadillac Fleetwood  10.4   8 472.0 205 2.93 5.250 17.98  0  0    3    4
Lincoln Continental 10.4   8 460.0 215 3.00 5.424 17.82  0  0    3    4
Chrysler Imperial   14.7   8 440.0 230 3.23 5.345 17.42  0  0    3    4
```

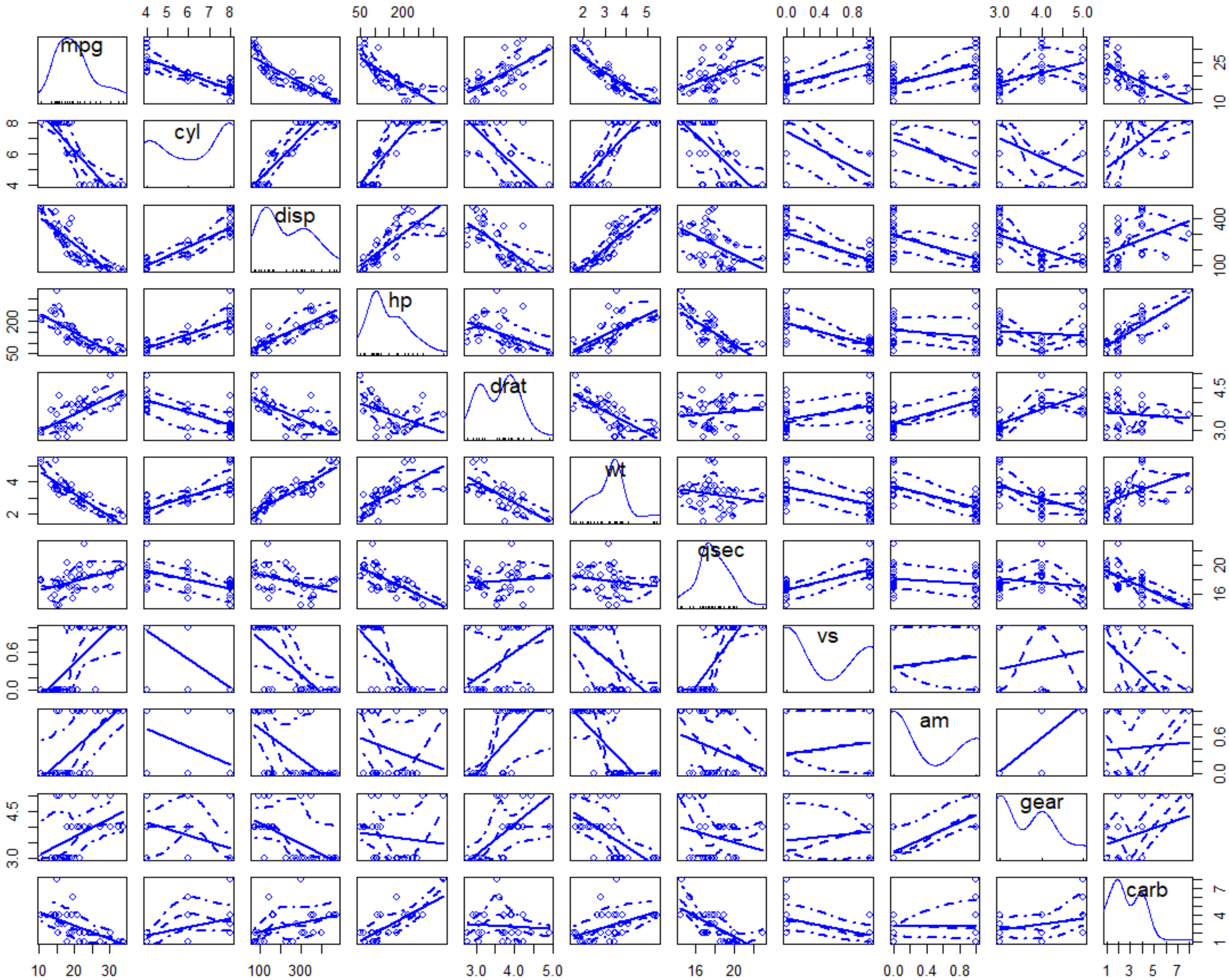
[2] Quelle: https://www.rdocumentation.org/packages/datasets/versions/3.5.3/topics/mtcars.
[3] Quelle: https://www.rdocumentation.org/packages/datasets/versions/3.5.3/topics/mtcars.

```
Fiat 128            32.4   4  78.7  66 4.08 2.200 19.47  1  1    4    1
Honda Civic         30.4   4  75.7  52 4.93 1.615 18.52  1  1    4    2
Toyota Corolla      33.9   4  71.1  65 4.22 1.835 19.90  1  1    4    1
Toyota Corona       21.5   4 120.1  97 3.70 2.465 20.01  1  0    3    1
Dodge Challenger    15.5   8 318.0 150 2.76 3.520 16.87  0  0    3    2
AMC Javelin         15.2   8 304.0 150 3.15 3.435 17.30  0  0    3    2
Camaro Z28          13.3   8 350.0 245 3.73 3.840 15.41  0  0    3    4
Pontiac Firebird    19.2   8 400.0 175 3.08 3.845 17.05  0  0    3    2
Fiat X1-9           27.3   4  79.0  66 4.08 1.935 18.90  1  1    4    1
Porsche 914-2       26.0   4 120.3  91 4.43 2.140 16.70  0  1    5    2
Lotus Europa        30.4   4  95.1 113 3.77 1.513 16.90  1  1    5    2
Ford Pantera L      15.8   8 351.0 264 4.22 3.170 14.50  0  1    5    4
Ferrari Dino        19.7   6 145.0 175 3.62 2.770 15.50  0  1    5    6
Maserati Bora       15.0   8 301.0 335 3.54 3.570 14.60  0  1    5    8
Volvo 142E          21.4   4 121.0 109 4.11 2.780 18.60  1  1    4    2
```

Zusammenfassung der deskriptiven Statistiken zu mtcars:

```
> summary(mtcars) # deskriptive zusammenfassung der daten
      mpg             cyl             disp             hp             drat             wt
 Min.   :10.40   Min.   :4.000   Min.   : 71.1   Min.   : 52.0   Min.   :2.760   Min.   :1.513
 1st Qu.:15.43   1st Qu.:4.000   1st Qu.:120.8   1st Qu.: 96.5   1st Qu.:3.080   1st Qu.:2.581
 Median :19.20   Median :6.000   Median :196.3   Median :123.0   Median :3.695   Median :3.325
 Mean   :20.09   Mean   :6.188   Mean   :230.7   Mean   :146.7   Mean   :3.597   Mean   :3.217
 3rd Qu.:22.80   3rd Qu.:8.000   3rd Qu.:326.0   3rd Qu.:180.0   3rd Qu.:3.920   3rd Qu.:3.610
 Max.   :33.90   Max.   :8.000   Max.   :472.0   Max.   :335.0   Max.   :4.930   Max.   :5.424
      qsec             vs               am              gear            carb
 Min.   :14.50   Min.   :0.0000   Min.   :0.0000   Min.   :3.000   Min.   :1.000
 1st Qu.:16.89   1st Qu.:0.0000   1st Qu.:0.0000   1st Qu.:3.000   1st Qu.:2.000
 Median :17.71   Median :0.0000   Median :0.0000   Median :4.000   Median :2.000
 Mean   :17.85   Mean   :0.4375   Mean   :0.4062   Mean   :3.688   Mean   :2.812
 3rd Qu.:18.90   3rd Qu.:1.0000   3rd Qu.:1.0000   3rd Qu.:4.000   3rd Qu.:4.000
 Max.   :22.90   Max.   :1.0000   Max.   :1.0000   Max.   :5.000   Max.   :8.000
```

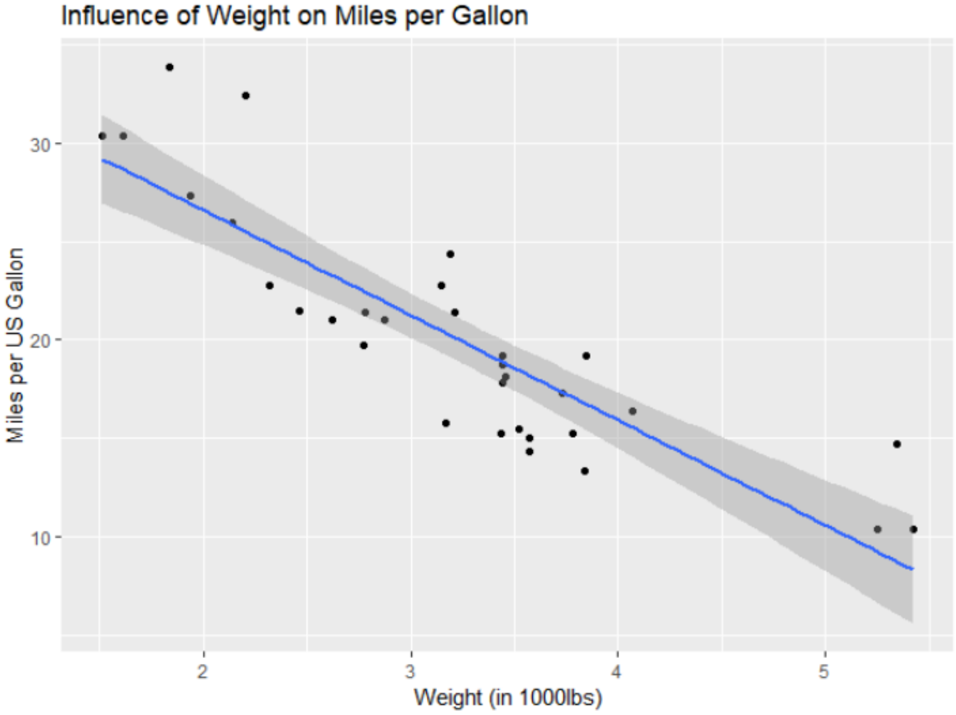
Scatterplotmatrix aller Variablen:



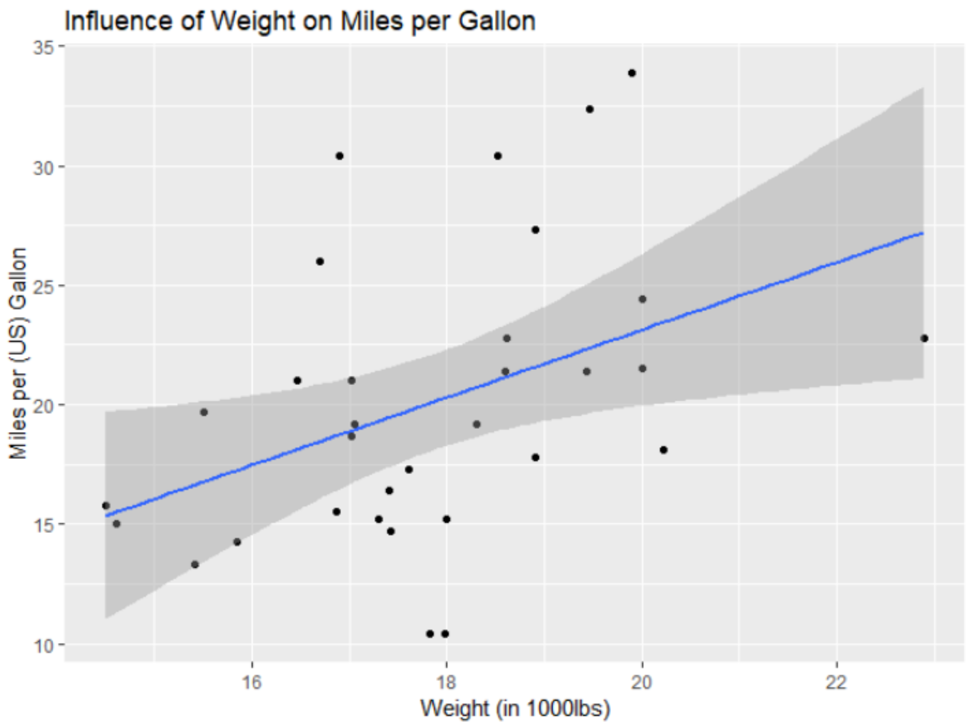
Auf den Datensatz mtcars wurden sodann verschiedene regressionsanalytische Verfahren angewandt und Plots angefertigt, die in weiterer Folge vorgestellt werden:

1.a. LINEAR REGRESSION (univariat):

Man erkläre mpg (miles per US gallon) durch die variable wt (weight in 1000lbs), wobei für die Visualisierung ggplot verwendet wurde. Der Plot zeigt in blau die Regressionsgerade und in dunkelgrau um die Regressionsgerade die Konfidenzbänder.



Man erkläre mpg durch qsec (i.e. ¼ mile time), wobei man sieht, dass die Konfidenzbänder der untersuchten Variable sehr weit sind, und die Daten (im Scatterplot) nicht linear sind:

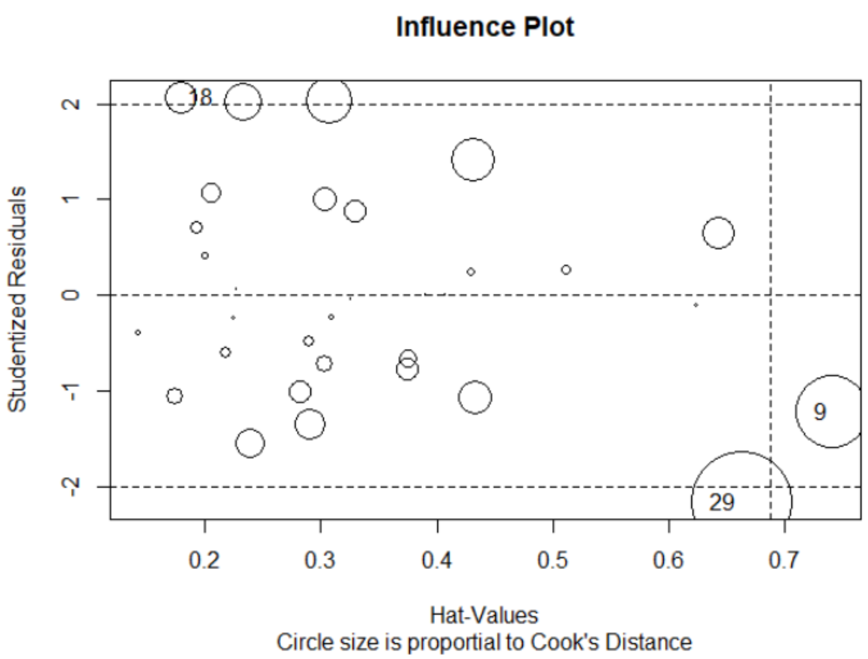


1.b. LINEAR REGRESSION (multiple):

Bei der multiplen linearen Regression wird in diesem Beispiel mpg durch die restlichen Variablen in Form eines additiven Zusammenhangs erklärt. Signifikant ist hier nur wt (weight in 1000lbs) und R² (i.e. erklärter Anteil der Gesamtvariabilität) liegt bei ca. 87% in diesem Modell.

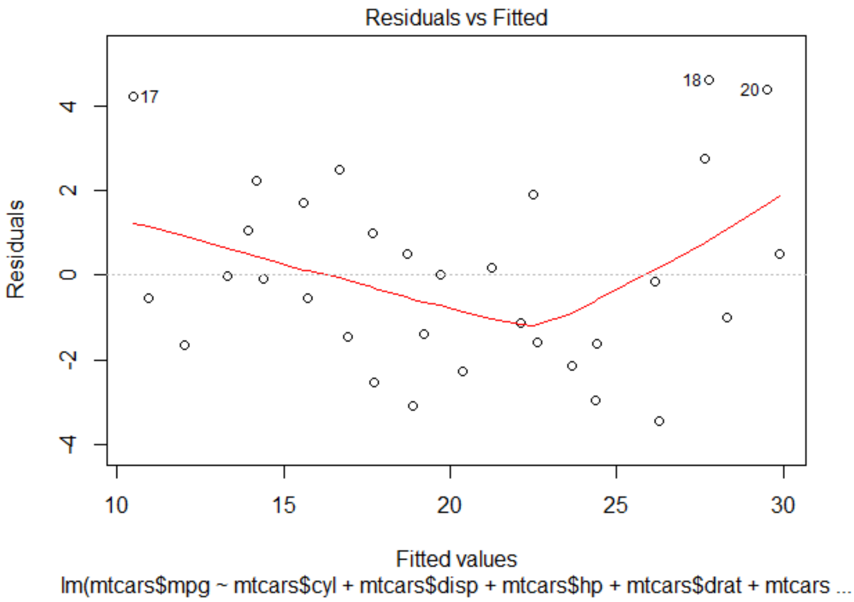
```
> summary(multiple_lm)

Call:
lm(formula = mpg ~ cyl + disp + hp + drat + wt + qsec + vs +
    am + gear + carb)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-3.4506 -1.6044 -0.1196  1.2193  4.6271 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)  
(Intercept) 12.30337   18.71788   0.657   0.5181  
cyl         -0.11144    1.04502  -0.107   0.9161  
disp         0.01334    0.01786   0.747   0.4635  
hp          -0.02148    0.02177  -0.987   0.3350  
drat         0.78711    1.63537   0.481   0.6353  
wt          -3.71530    1.89441  -1.961   0.0633 .
qsec         0.82104    0.73084   1.123   0.2739  
vs           0.31776    2.10451   0.151   0.8814  
am           2.52023    2.05665   1.225   0.2340  
gear         0.65541    1.49326   0.439   0.6652  
carb        -0.19942    0.82875  -0.241   0.8122  
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 2.65 on 21 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.869,	Adjusted R-squared:  0.8066 
F-statistic: 13.93 on 10 and 21 DF,  p-value: 3.793e-07
```

Der Influence-Plot zeigt, dass einzelne Punkte, wie z.B. 8, 9 oder 29 einen großen Einfluss auf die Residuen haben:



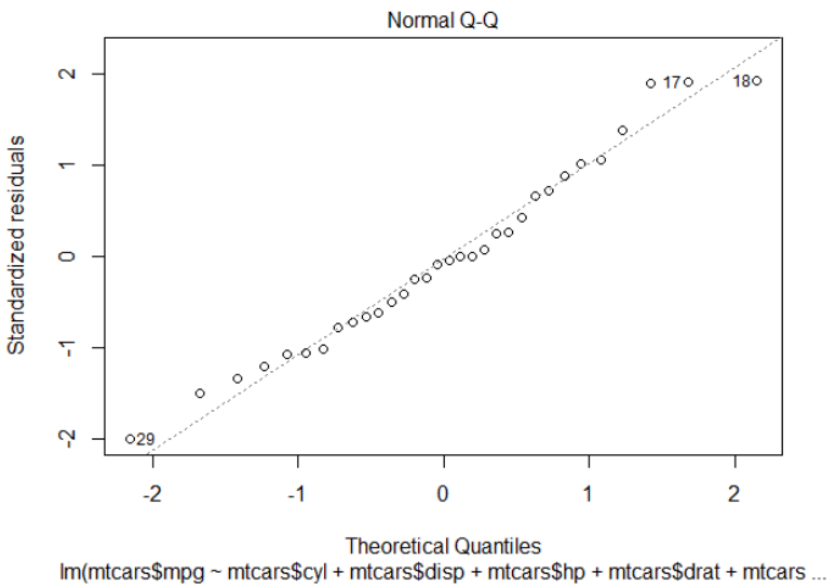
Residuen vs. gefittete Werte:

In diesem Beispiel sind die Residuen zufällig um die Nulllinie verteilt, daher ist keine starke Abweichung von der Linearität anzunehmen.



Q-Q-Plot:

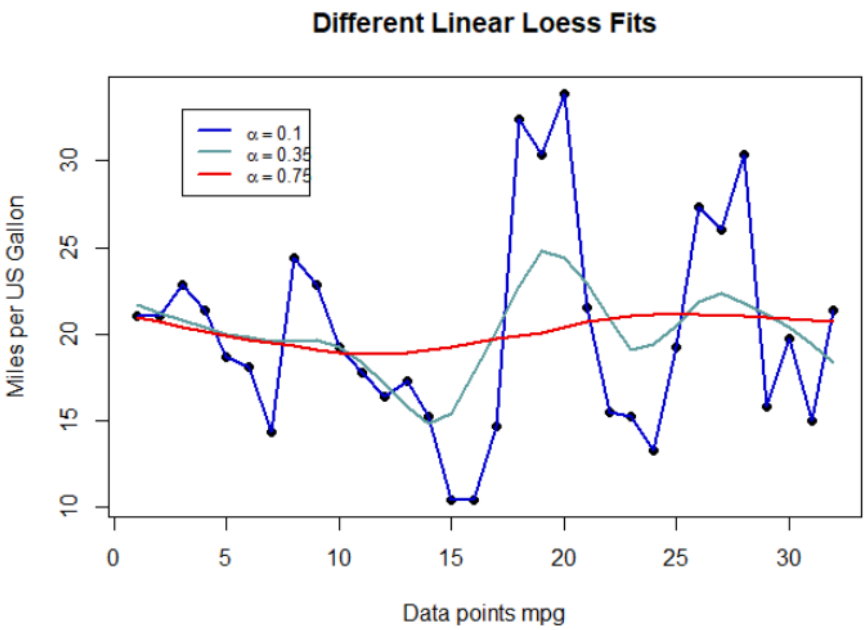
Der Q-Q-Plot vergleicht die theoretischen Quantile mit jenen, die in den Daten beobachtet wurden. Wenn die Punkte auf der Gerade der theoretischen Quantile liegen, sind die Residuen normalverteilt – im Plot weichen die Enden von der Gerade relativ stark ab, daher ist wohl keine exakte Normalverteilung der Residuen in den Daten vorhanden.



2.a. LOCAL REGRESSION:

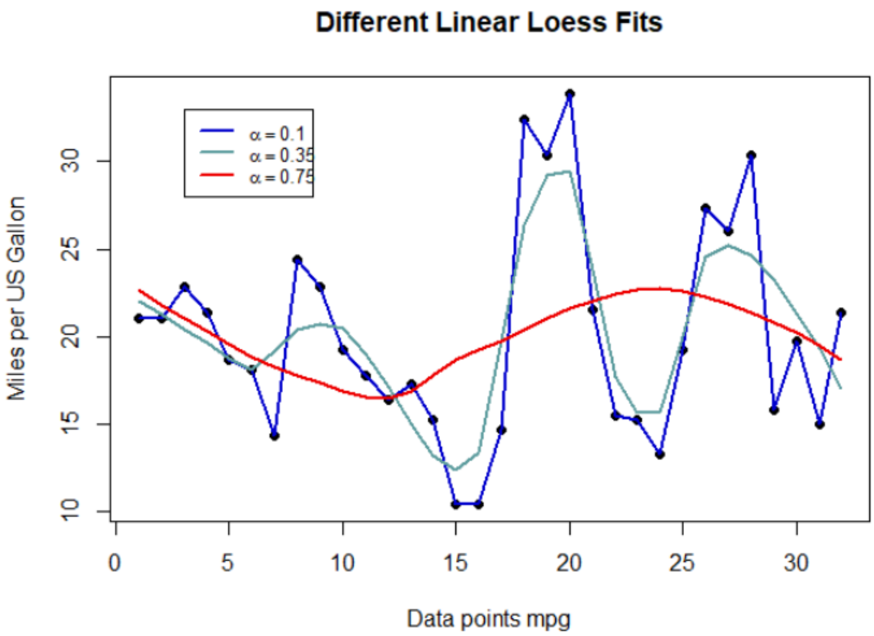
LINEAR LOESS FIT (Polynome 1. Grades):

Die lokale polynomial Regression bzw. LOESS ist ein Verfahren, bei der lokal eine bestimmte Nachbarschaft um den jeweiligen untersuchten Punkt in die Regression miteinbezogen wird. Die Größe der inkludierten Nachbarschaft richtet sich nach dem Parameter alpha, der der Spannweite-Parameter ist. Auf die Nachbarschaft wird außerdem eine Gewichtung angewandt, je nachdem wie weiter die Punkte vom untersuchten Punkt entfernt sind. Im untenstehenden Plot werden Polynome 1. Grades, also Geraden zur Modellierung verwendet.

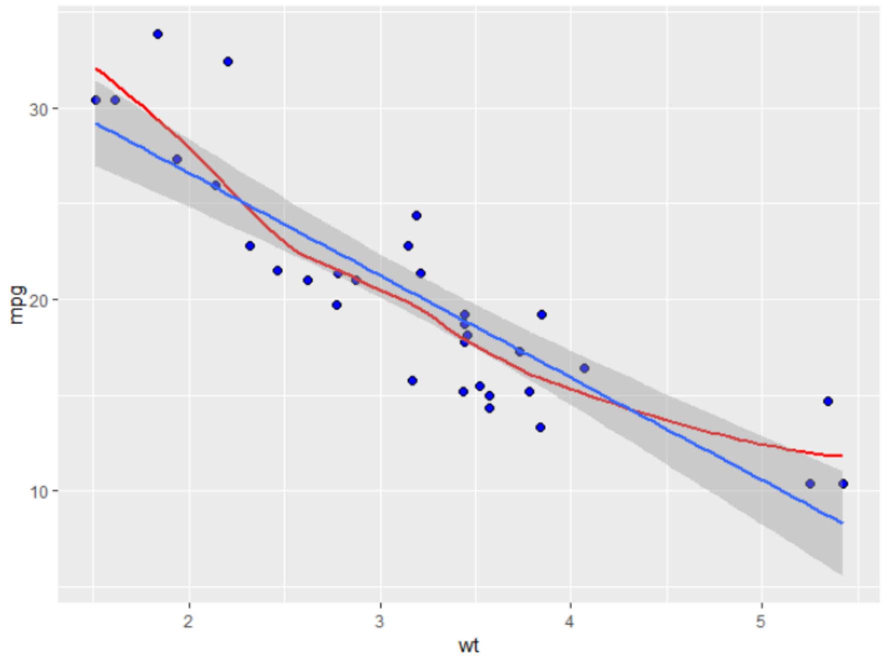


QUADRATIC LOESS FIT (Polynome 2. Grades):

Im folgenden Plot warden Polynome 2. Grades verwendet, wodurch die Kurven glatter aussehen.

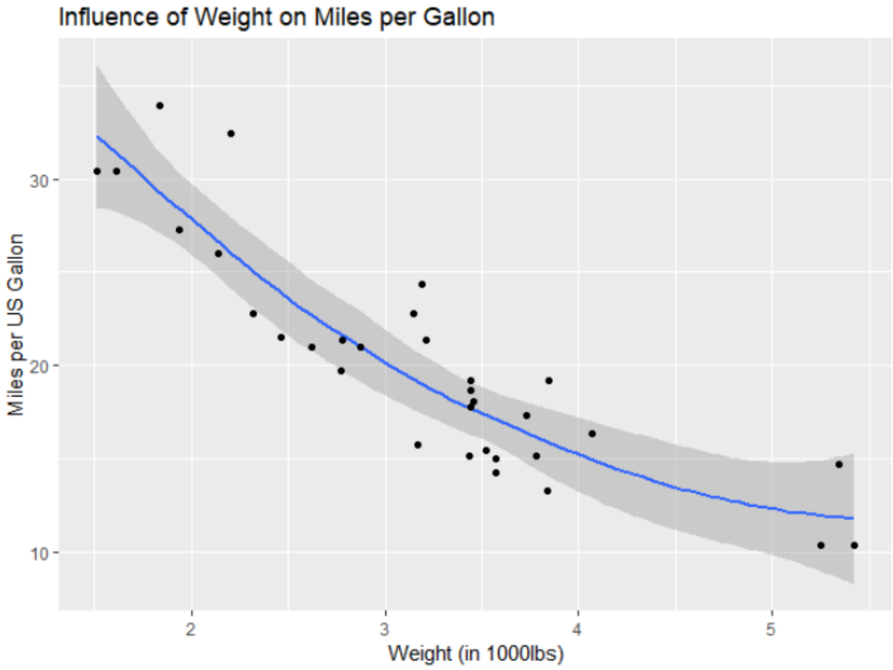


Lineare Regression (blaue Linie) vs. LOESS (rote Linie):

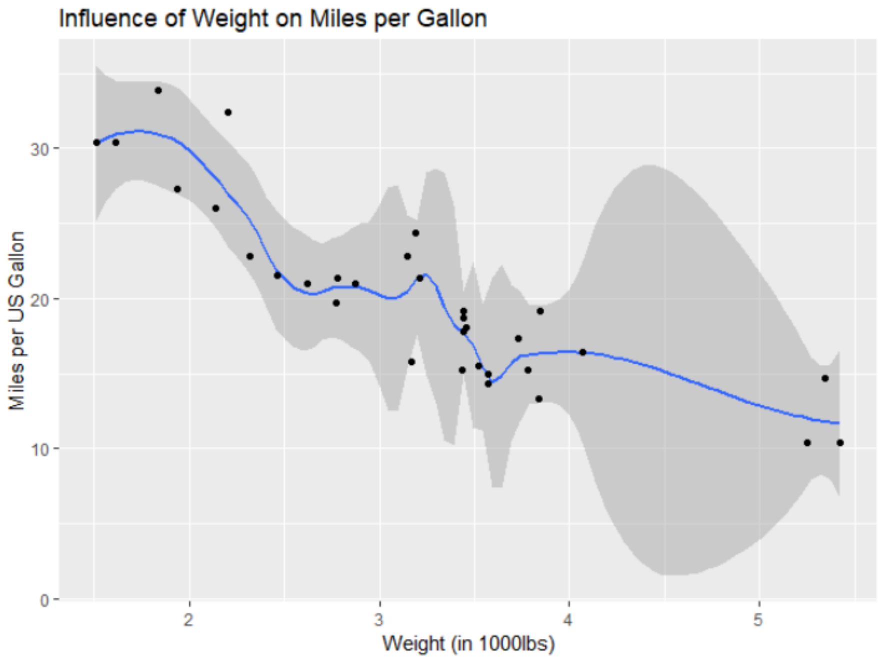


2.b. LOESS bzw. LOCAL POLYNOMIAL REGRESSION ("smoothing", univariat, mittels ggplot library)

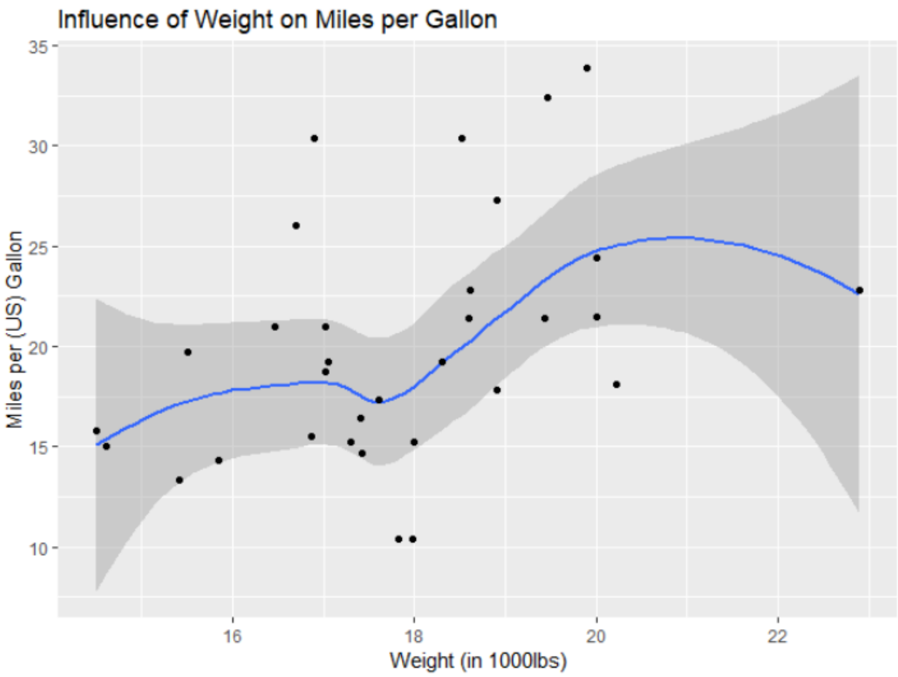
Man erkläre mpg durch wt mit einem Span-Parameter von 0.9, also unter Einbeziehung von 90% der Punkte. Wenn eine größere Anzahl von Punkten in der Umgebung des betrachteten Punktes miteinbezogen wird, erhält man, wie hier, eine glattere Kurve.



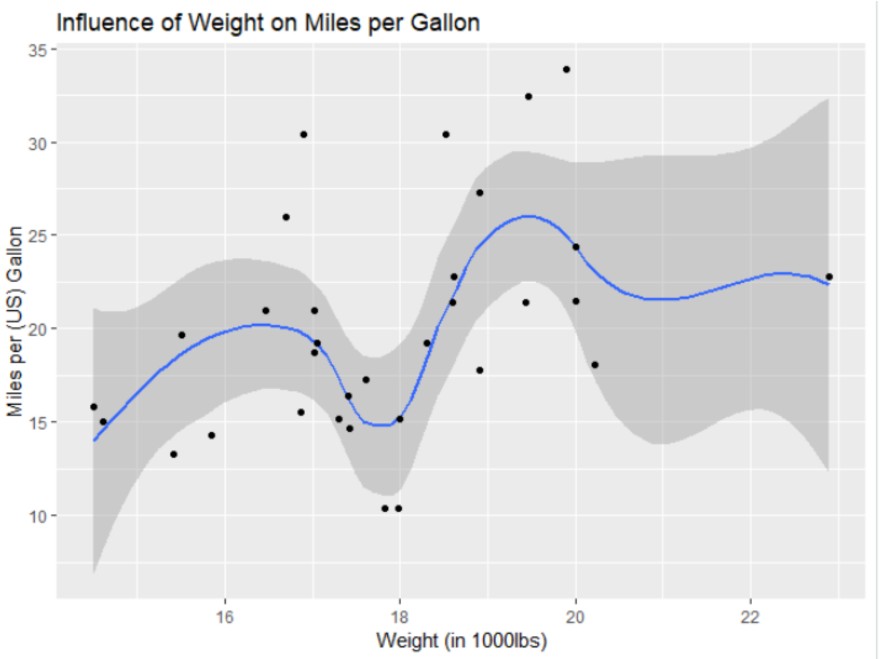
Bei einem Span-Parameter von nur 30% werden weniger Punkte in der Umgebung miteinbezogen und die Berechnung ist weniger glatt, wie es das untenstehende Bild zeigt.



Erklärung von mpg durch qsec mit Span von 0.9:

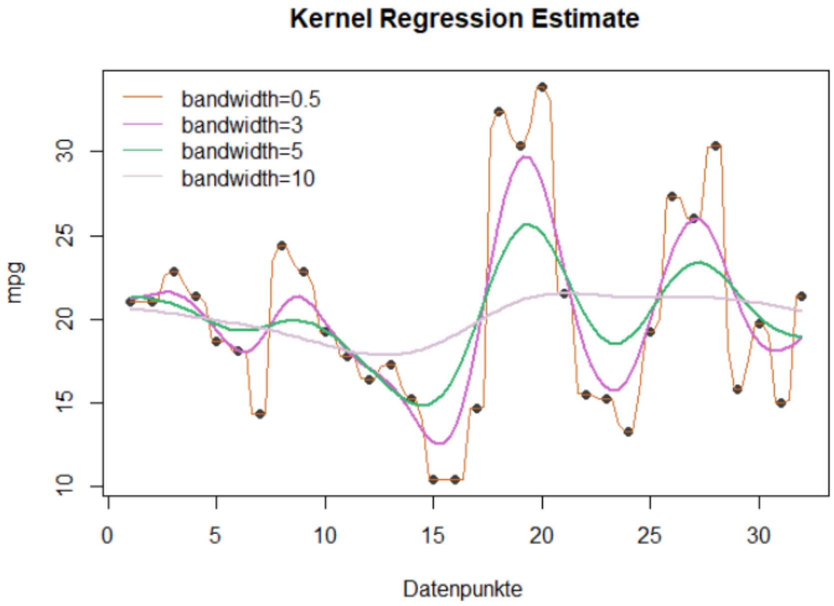


Erklärung von mpg durch qsec mit Span von 0.7:

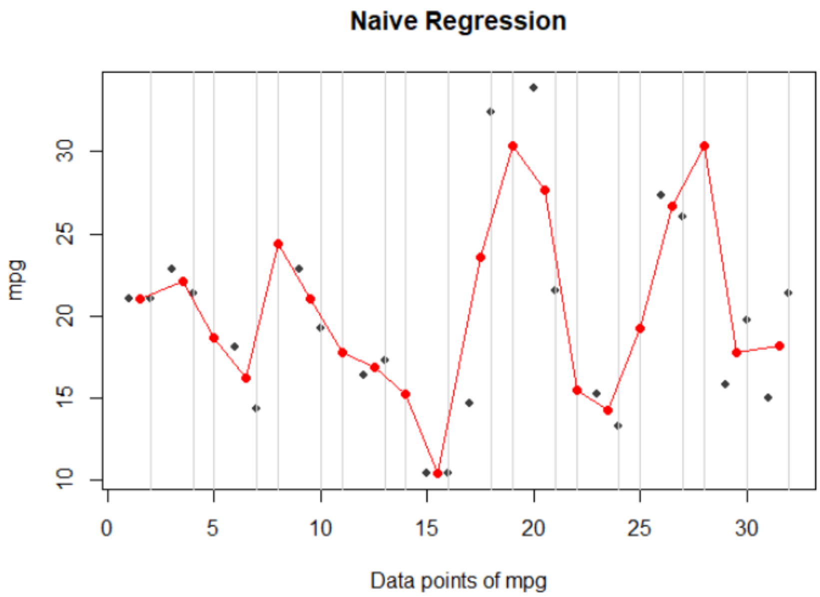


3. KERNSCHAETZUNG (KERNEL REGRESSION - nicht-parametrisch)

Der folgende Kernschätzer wurde mittels verschiedener Bandbreiten berechnet. Eine größere Bandbreite führt zu einer eher zackigen Struktur, während eine große Bandbreite zu einer sehr „glatten“ Struktur mit weniger Ausrissen führt, wie es aus der untenstehenden Grafik ersichtlich ist.

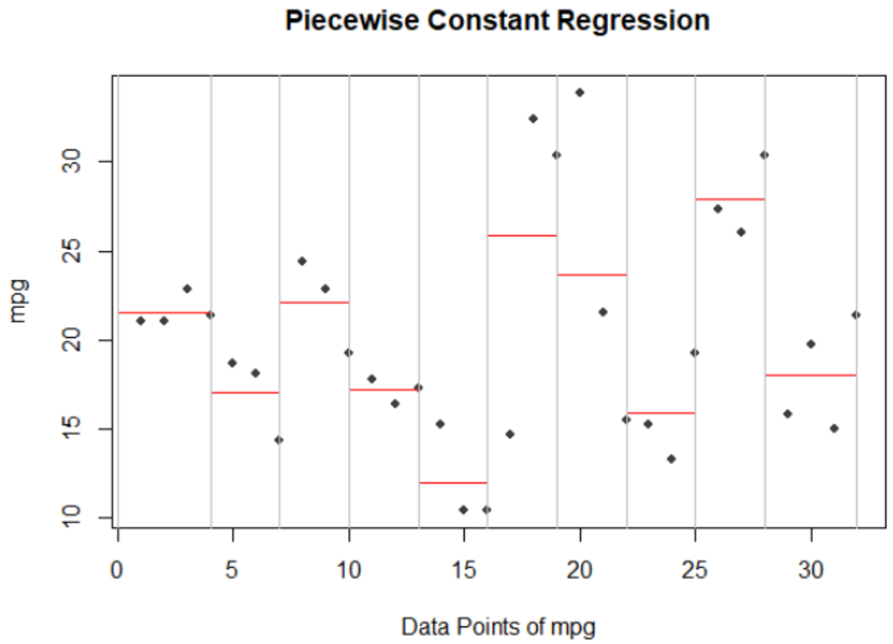


4. NAIVE REGRESSION



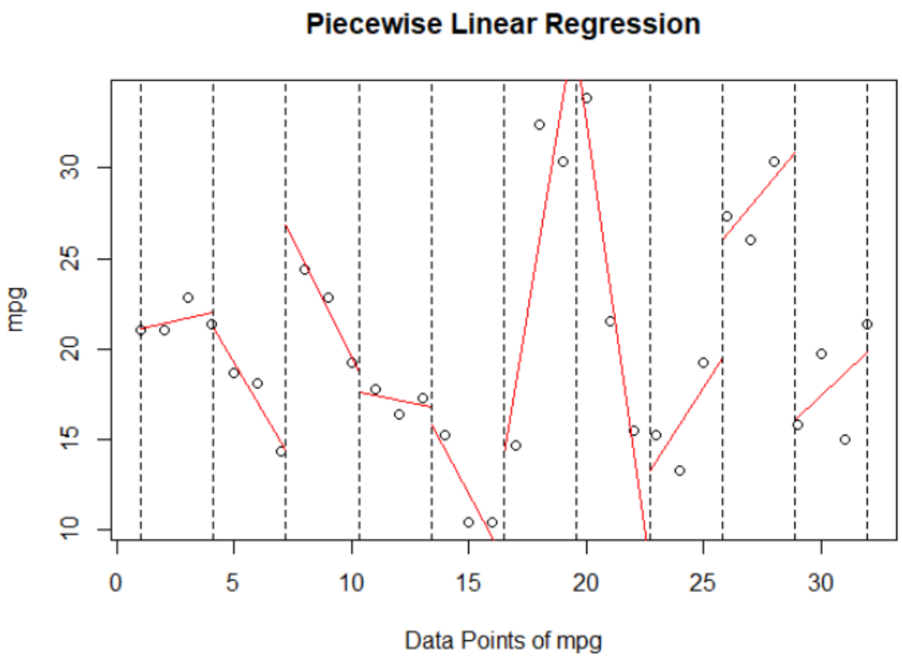
5. PIECEWISE CONSTANT REGRESSION

In einzelnen Intervallen werden jeweils konstante Geraden aus den Punkten berechnet und durch das Intervall gelegt.



6. BROKEN STICK REGRESSION mit lokalen funktionen (Piecewise Linear Regression)

Die Punktewolke wird in Intervalle eingeteilt und es wird pro Intervall eine Gerade durch die Punkte gelegt, sodass eine stückweise Struktur entsteht.



R-Code zu Aufgabe 1:

```
# AUFGABENBLATT 1
# Cordula Eggerth (00750881)

rm(list=ls())

install.packages("car")
install.packages("np")
install.packages("UsingR")
install.packages("XLConnect")
install.packages("xlsx")
install.packages("MASS")

library(car)
library(np)
library(UsingR)
library(XLConnectJars)
library(XLConnect)
require(XLConnectJars)
require(XLConnect)
library(xlsxjars)
library(xlsx)
require(xlsxjars)
require(xlsx)
library(MASS)


path <- "C:/Users/Coala/Desktop/A1_ERWEIT"


#-------------------------------------------------------------------------------------
### AUFGABE 1 ### --------------------------------------------------------------------
#-------------------------------------------------------------------------------------
# 1. Führen Sie mit dem Datensatz mtcars verschiedene sinnvolle regressionsanalytische
#    Auswertungen und Visualisierungen durch.

data("mtcars")
mtcars


summary(mtcars) # deskriptive zusammenfassung der daten
n <- nrow(mtcars)
x.werte <- 1:n
scatterplotMatrix(mtcars) # diagonalelemente zeigen histogramm der jeweiligen
                          # variable
sapply(mtcars,mean) # mittelwerte der variablen
sapply(mtcars,sd) # standardabweichung der variablen

# 1.a. LINEAR REGRESSION (univariat)

# fall: erklaere mpg (miles per US gallon) durch wt (weight in 1000lbs)
ggplot(mtcars, aes(wt, mpg)) + geom_point() +
  geom_smooth(method = "lm", se = TRUE) +
  ylab("Miles per US Gallon") +
  xlab("Weight (in 1000lbs)") +
  ggtitle("Influence of Weight on Miles per Gallon")

# fall: erklaere mpg (miles per US gallon) durch qsec (1/4 mile time)
ggplot(mtcars, aes(qsec, mpg)) + geom_point() +
  geom_smooth(method = "lm", se = TRUE) +
  ylab("Miles per (US) Gallon") +
  xlab("Weight (in 1000lbs)") +
  ggtitle("Influence of Weight on Miles per Gallon")
```

```
# 1.b. LINEAR REGRESSION (multiple)
#       (hier: mpg durch restliche variablen erklaeren als additives modell)
multiple_lm <- lm(mtcars$mpg ~ mtcars$cyl + mtcars$disp + mtcars$hp +
                  mtcars$drat + mtcars$wt + mtcars$qsec + mtcars$vs +
                  mtcars$am + mtcars$gear + mtcars$carb)
summary(multiple_lm)
influencePlot(multiple_lm, id.method="identify", main="Influence Plot",
              sub="Circle size is proportial to Cook's Distance")

plot(multiple_lm$fitted.values) # plot fitted values vs. residuals

plot(multiple_lm$residuals) # qqplot


# 2.a. LOCAL REGRESSION
    # LINEAR LOESS FIT (polynome 1. grades)
alpha <- c(0.1, 0.35, 0.75)
colors <- c("mediumblue","cadetblue","red2")

plot(x.werte, mtcars$mpg, pch=16, col="black",
     xlab="Data points mpg", ylab="Miles per US Gallon",
     main = "Different Linear Loess Fits")


for(i in 1:length(alpha)){
  localregression.model <- loess(mtcars$mpg ~ x.werte, span=alpha[i], degree=1)
  lines(x.werte, localregression.model$fitted, lwd=2, col=colors[i])
}

legend(3,33,c(expression(alpha == 0.10), expression(alpha == 0.35),
             expression(alpha == 0.75)), lty=c(1,1,1), col=colors, lwd=c(2,2,2),
       cex=0.8)


   # QUADRATIC LOESS FIT (polynome 2. grades)
alpha <- c(0.1, 0.35, 0.75)
colors <- c("mediumblue","cadetblue","red2")

plot(x.werte, mtcars$mpg, pch=16, col="black",
     xlab="Data points mpg", ylab="Miles per US Gallon",
     main = "Different Linear Loess Fits")

for(i in 1:length(alpha)){
  localregression.model <- loess(mtcars$mpg ~ x.werte, span=alpha[i], degree=2)
  lines(x.werte, localregression.model$fitted, lwd=2, col=colors[i])
}

legend(3,33,c(expression(alpha == 0.10), expression(alpha == 0.35),
       expression(alpha == 0.75)), lty=c(1,1,1), col=colors, lwd=c(2,2,2),
       cex=0.8)

  # linearitaet ueberpruefen:
ggplot(data=mtcars, aes(x=wt, y=mpg)) +
  geom_point(size=2, shape=21, fill="blue") +
  stat_smooth(method=loess)

  # lineare regression vs. loess
ggplot(data=mtcars, aes(x=wt, y=mpg)) +
  geom_point(size=2, shape=21, fill="blue") +
  stat_smooth(method=loess, col="red",se=FALSE) +
  stat_smooth(method=lm)
```

```
# 2.b. LOESS bzw. LOCAL POLYNOMIAL REGRESSION ("smoothing", univariat)

# fall: erklaere mpg (miles per US gallon) durch wt (weight in 1000lbs)
#        span=0.9 (glattere kurve, weil groessere anzahl an punkten in
#        umgebung in berechnung miteinbezogen)
ggplot(mtcars, aes(wt, mpg)) +
  stat_smooth(span=0.9) + geom_point() +
  ylab("Miles per US Gallon") +
  xlab ("Weight (in 1000lbs)") +
  ggtitle("Influence of Weight on Miles per Gallon")

#        span=0.3 (weniger glatte kurve, weil kleine anzahl von punkten
#        in umgebung in berechnung miteinbezogen)
ggplot(mtcars, aes(wt, mpg)) +
  stat_smooth(span=0.3) + geom_point() +
  ylab("Miles per US Gallon") +
  xlab ("Weight (in 1000lbs)") +
  ggtitle("Influence of Weight on Miles per Gallon")

# fall: erklaere mpg (miles per US gallon) durch qsec (1/4 mile time)
#        span=0.9
ggplot(mtcars, aes(qsec, mpg)) + geom_point() +
  stat_smooth(span=0.9) + geom_point() +
  ylab("Miles per (US) Gallon") +
  xlab("Weight (in 1000lbs)") +
  ggtitle("Influence of Weight on Miles per Gallon")



#        span=0.7
ggplot(mtcars, aes(qsec, mpg)) + geom_point() +
  stat_smooth(span=0.7) + geom_point() +
  ylab("Miles per (US) Gallon") +
  xlab("Weight (in 1000lbs)") +
  ggtitle("Influence of Weight on Miles per Gallon")


# 3.a. KERNSCHAETZUNG (KERNEL REGRESSION - nicht-parametrisch)
plot(x.werte, mtcars$mpg, pch=16, col="gray24",
     xlab="Datenpunkte ", ylab="mpg",
     main = "Kernel Regression Estimate")

lines(ksmooth(x.werte,mtcars$mpg,"normal"),col="chocolate")
lines(ksmooth(x.werte,mtcars$mpg,"normal",bandwidth=3),
      col="orchid3", lwd=2) # bandwidth 3
lines(ksmooth(x.werte,mtcars$mpg,"normal",bandwidth=5),
      col="mediumseagreen", lwd=2) # bandwidth 5
lines(ksmooth(x.werte,mtcars$mpg,"normal",bandwidth=10),
      col="thistle", lwd=2) # bandwidth 10
legend("topleft",
       c("bandwidth=0.5","bandwidth=3",
         "bandwidth=5","bandwidth=10"),
       lty=1,
       col=c("chocolate","orchid3","mediumseagreen",
             "thistle"),
       bty="n")
```

```
# 3.b. KERNEL REGRESSION (univariat)
# using library np from:
# https://socialsciences.mcmaster.ca/racinej/Gallery/Regression.html
# local linear model
local_linear_model <- npreg(mpg~wt,regtype="ll")
# local constant model
local_constant_model <- npreg(mpg~wt)
# plot
plot(wt,mpg,cex=0.25,col="black",pch=3)
lines(wt,fitted(local_linear_model),col="chocolate",lty=2)
lines(wt,fitted(local_constant_model),col="cadetblue",lty=1)
legend("topright", c("local linear model","local constant model"),
       lty=c(2,1), col=c("chocolate","cadetblue"), bty="n")


# 4. NAIVE REGRESSION
plot(x.werte, mtcars$mpg, pch=20, col="gray24", cex=1.2,
     xlab="Data points of mpg", ylab="mpg", main = "Naive Regression")

x.breaks = cut(x.werte, breaks=20, labels=F)
x.naive <- by(x.werte, x.breaks, mean)
x.cut   <- by(x.werte, x.breaks, max)
abline(v=x.cut, col="lightgrey", lwd=0.7)
y.naive <- by(mtcars$mpg, x.breaks, mean)
lines(x.naive, y.naive , pch=19, cex=1.0, type="o", lwd=1, col=2)



# 5. PIECEWISE CONSTANT REGRESSION
const.reg <- function(x, y, interv=10, type=mean, ...){
  plot(x, y, pch=20, col="gray24", cex=1.2, ...)
  x.breaks = cut(x, breaks=interv, labels=F)
  x.naive <- by(x, x.breaks, type)
  x.cut   <- c(0, by(x, x.breaks, max))
  y.naive <- by(y, x.breaks, type)
  for  (i in 1:(length(x.breaks)-1))
    lines(c(x.cut[i], x.cut[i+1]), c(y.naive[i],y.naive[i]), col=2)
  abline(v=x.cut, col="grey", lwd=0.8)
}

const.reg(x.werte, mtcars$mpg, xlab="Data Points of mpg", ylab="mpg",
          main = "Piecewise Constant Regression")


# 6. BROKEN STICK REGRESSION mit lokalen funktionen
#     (piecewise linear)
piecewise <- function(x, y, wo=2, vertical=T, ...)
{
  if(length(wo) == 1)
    wo <- quantile(x, probs = seq(0, 1, 1/wo))
  bruch <- (cut(x, wo,labels=F))
  bruch[is.na(bruch)] <- 1
  res <- vector("list", max(bruch))
  plot(x, y, ...)
  for(i in 1:length(res)) {
    res[[i]] <- lm(y ~ x, subset = (bruch == i))
    xp <- wo[i:(i + 1)]
    yp <- xp * res[[i]]$coefficients[2] + res[[i]]$coefficients[1]
    lines(xp, yp, col=2)
  }
  if (vertical) abline(v=wo, lty=2)
  res
}

piecewise(x.werte, mtcars$mpg, 10, xlab="Data Points of mpg", ylab="mpg",
          main = "Piecewise Linear Regression")
```

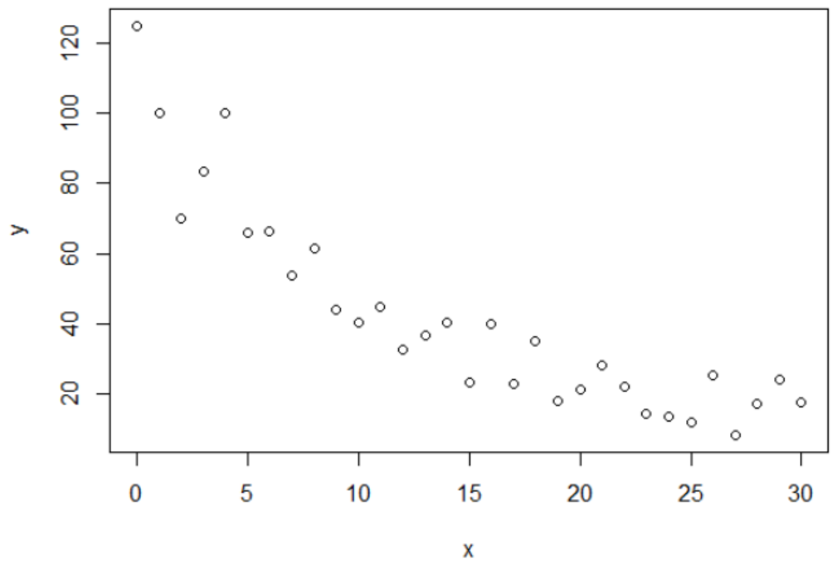
Aufgabe 2:

Führen Sie mit dem Datensatz *decay* verschiedene Modellierungen des offensichtlich nichtlinearen Zusammenhanges durch.

Der Datensatz *decay* besteht ausschließlich aus numerischen Werten:

```
> decay_data
    x          y
1   0 125.000000
2   1 100.248858
3   2  70.000000
4   3  83.470795
5   4 100.000000
6   5  65.907870
7   6  66.533715
8   7  53.588087
9   8  61.332351
10  9  43.927435
11 10  40.295448
12 11  44.713459
13 12  32.533143
14 13  36.640336
15 14  40.154711
16 15  23.080295
17 16  39.867928
18 17  22.849786
19 18  35.014645
20 19  17.977267
21 20  21.159180
22 21  27.998273
23 22  21.885735
24 23  14.273962
25 24  13.665969
26 25  11.816435
27 26  25.189016
28 27   8.195644
29 28  17.191337
30 29  24.283354
31 30  17.722776
```

Zwischen x und y besteht ein nicht-linearer Zusammenhang, wenn man nur den Plot der beiden Variablen ansieht:



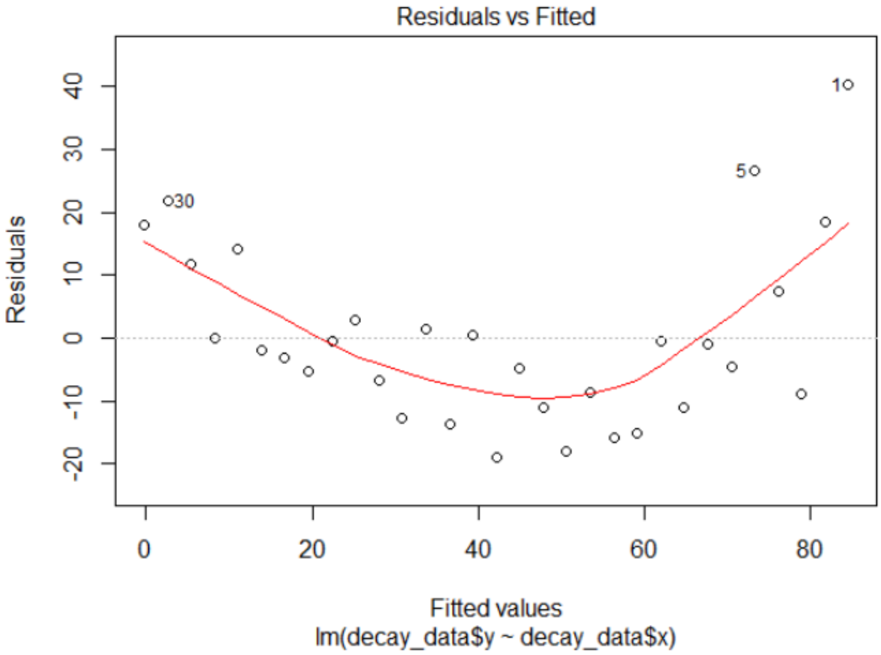
Die Korrelation zwischen x- und y-Variable ist stark negativ:

```
> cor(decay_data$x,decay_data$y)
[1] -0.8768214
```

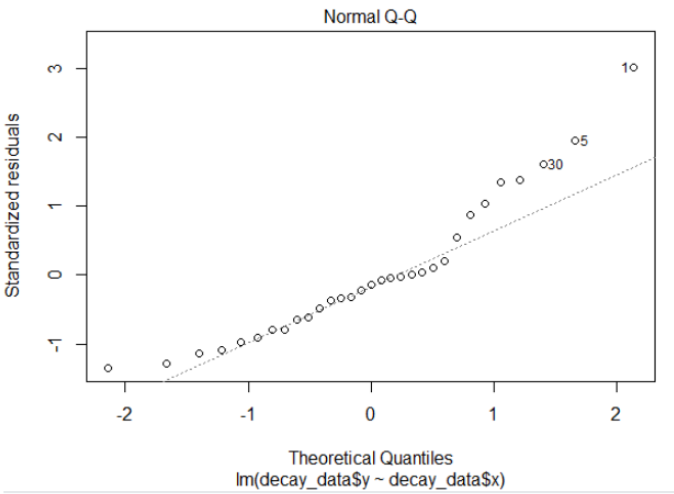
Die Anwendung des gewöhnlichen linearen Modells lm() ergibt für die Erklärung der y-Variable durch die x-Variable, dass das Intercept und die x-Variable auf dem 0.001 Level signifikant sind.

```
> summary(lm_decay)

Call:
lm(formula = decay_data$y ~ decay_data$x)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-19.065 -10.029  -2.058   5.107  40.447 

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)   84.5534     5.0277   16.82  < 2e-16 ***
decay_data$x  -2.8272     0.2879   -9.82 9.94e-11 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 14.34 on 29 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.7688,	Adjusted R-squared:  0.7608 
F-statistic: 96.44 on 1 and 29 DF,  p-value: 9.939e-11
```

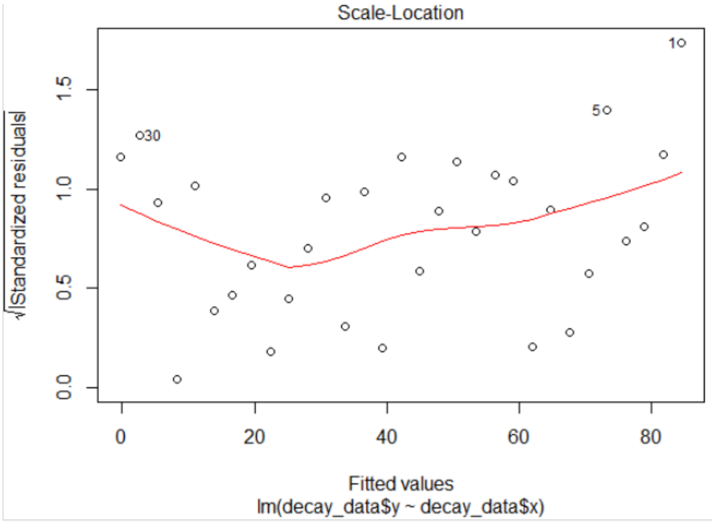
Residuals vs. Fitted Values für das gewöhnliche lineare Modell ergeben ein Bild, dass auf einen nicht-linearen Zusammenhang schließen lässt, da die Verteilung der Residuenpunkte sehr nach unten hin gekrümmt ist:

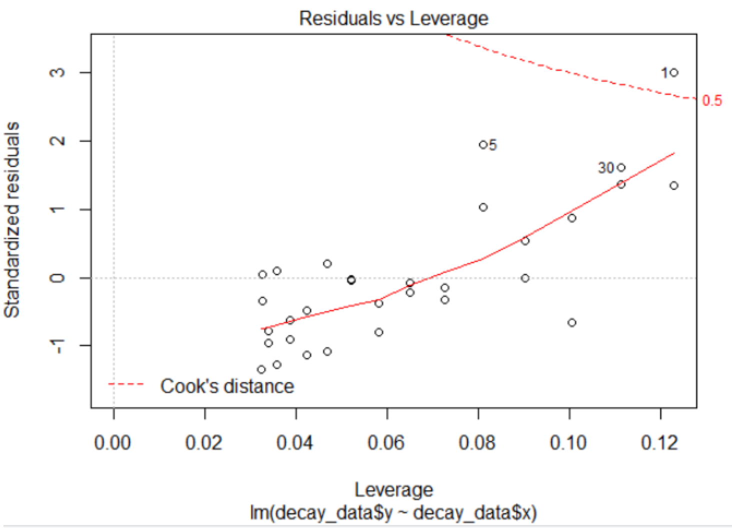


Bei der Ansicht des Q-Q-Plots fällt auf, dass die Residuen nicht normalverteilt sind, da sie von der theoretischen Quantillinie relativ stark abweichen:

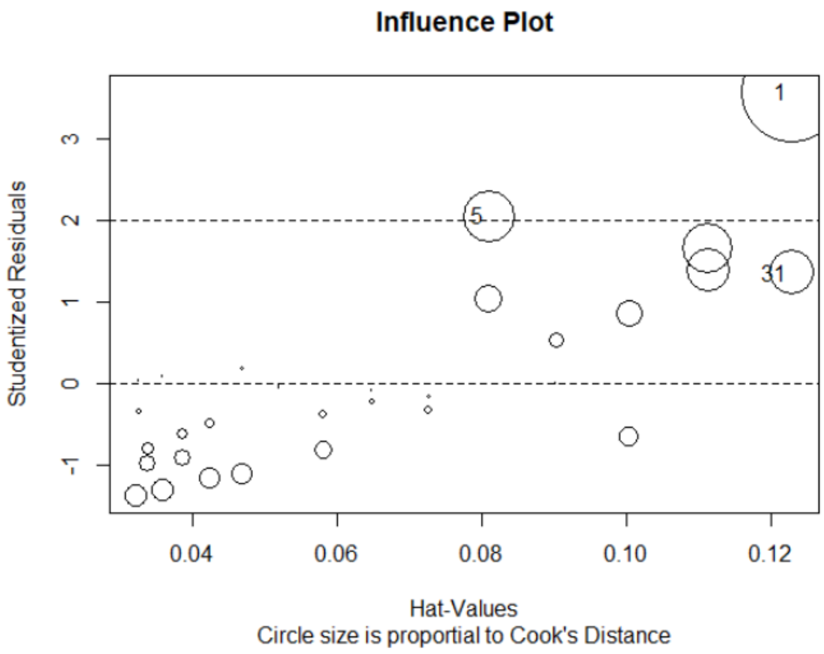


Scale-Location- und Residuals vs. Leverage Plots (Punkt 1 liegt außerhalb der Cook's Distance):

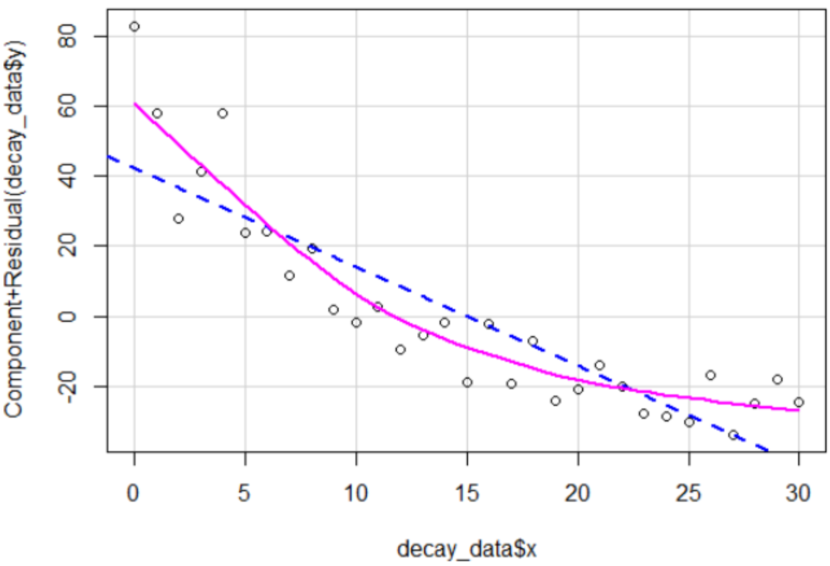




Der Influence Plot zeigt, dass es einige Punkte, wie z.B. 1, 5, oder 31 gibt, die die Residuen beeinflussen.



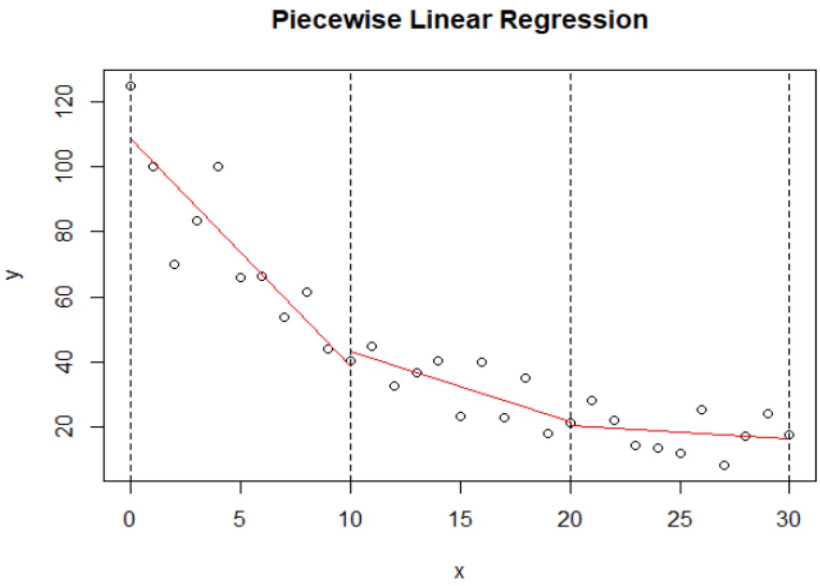
Des Weiteren wurde ein Component+Residual Plot (= C-R-Plot) angefertigt, wodurch man erkennen kann, of die Prediktoren in einer lineare Beziehung zur abhängigen Variable stehen.[4] Der partielle Residuenplot zeigt die Residuen des einen Prediktors vs. die abhängige Variable.[5] Im C-R-Plot wird eine Linie eingezeichnet, wo der beste Fit liegt.[6] Ein großer Unterschied zwischen den beiden Linien legt nahe, dass der Prediktor und die abhängige Variable keine lineare Beziehung haben, was in der untenstehenden Grafik der Fall ist:[7]



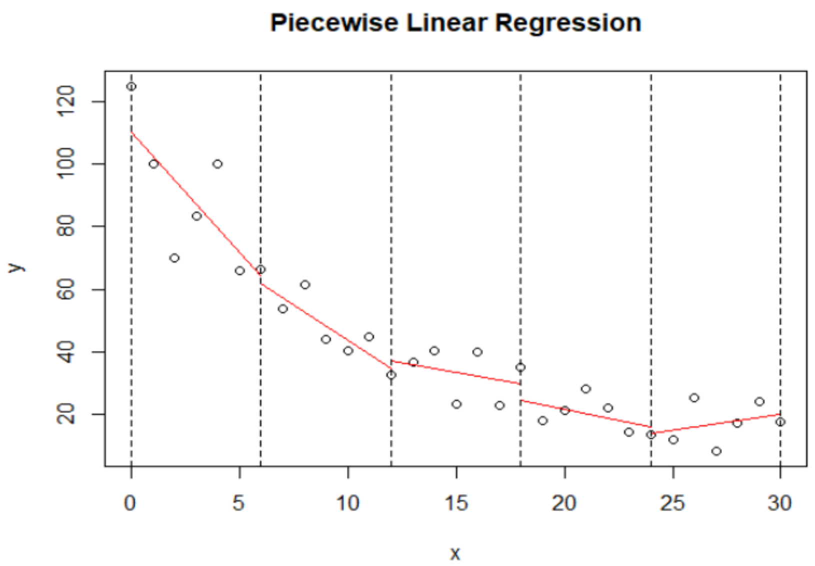
[4] http://www.vikparuchuri.com/blog/r-regression-diagnostics-part-1/.
[5] http://www.vikparuchuri.com/blog/r-regression-diagnostics-part-1/.
[6] http://www.vikparuchuri.com/blog/r-regression-diagnostics-part-1/.
[7] http://www.vikparuchuri.com/blog/r-regression-diagnostics-part-1/.

Außerdem werden nun einige andere Regressionsverfahren angewandt, aus denen ebenfalls hervorgeht, dass es sich hier um einen nicht-linearen Zusammenhang handelt:
Aus der Anwendung der Piecewise Linear Regression sieht man, dass die Steigung der jeweiligen Regressionsgeraden mit 3 bzw. 5 Intervallen sehr verschieden sind, und dann insgesamt kein linearer Zusammenhang zwischen x und y vorliegt.

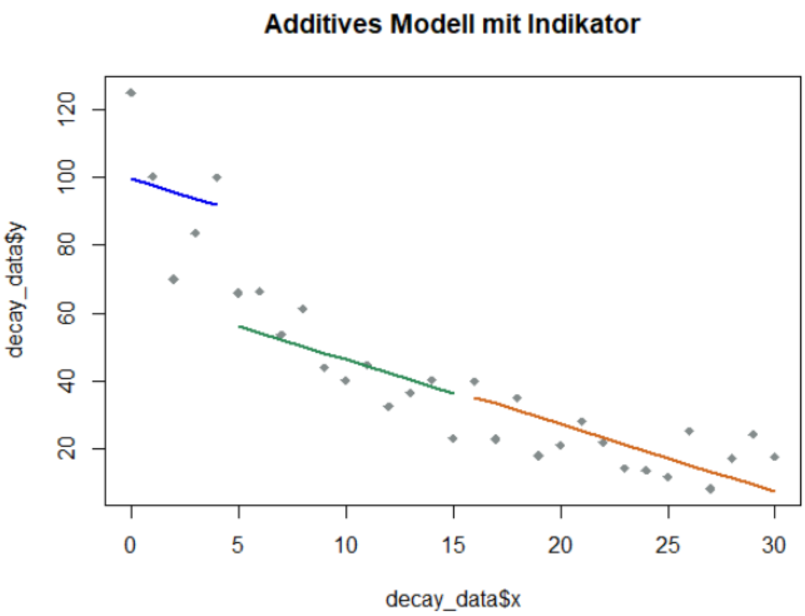
Piecewise Linear Regression mit 3 Intervallen:



Piecewise Linear Regression mit 5 Intervallen:



Danach wird ein additives Modell mit zwei Indikatoren untersucht, wobei sich zeigt, dass die Regressionsgeraden in den einzelnen von den Indikatoren abgedeckten Bereichen sehr verschieden sind und nicht ineinander übergehen. In diesem Modell ist der *indikator_5* signifikant auf dem 0.001 Level. Der Zusammenhang ist also nicht linear:



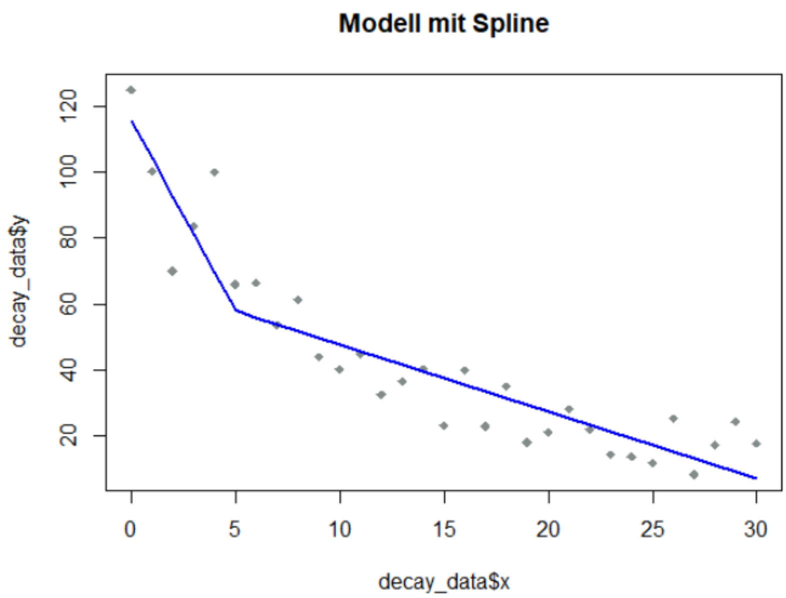

```
Call:
lm(formula = decay_data$y ~ decay_data$x + indikator_15 + indikator_5)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max 
-25.7439  -6.0217   0.4605   7.0632  25.2699 

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)   66.1771     6.2665  10.560 4.35e-11 ***
decay_data$x  -1.9931     0.5366  -3.714 0.000938 ***
indikator_15   0.9370     8.1743   0.115 0.909593    
indikator_5   33.5531     7.2070   4.656 7.68e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 10.73 on 27 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8794,	Adjusted R-squared:  0.866 
F-statistic: 65.61 on 3 and 27 DF,  p-value: 1.596e-12
```

Ein Modell mit Interaktion zwischen den jeweiligen Indikatoren und der x-Variable zeigt, dass indikator_15 mit der x-Variable interagiert. Das R^2 erhöht sich im Modell im Vergleich zum additiven Modell von ca. 88% auf 91%.

```
Call:
lm(formula = decay_data$y ~ decay_data$x * indikator_15 + decay_data$x * 
    indikator_5)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max 
-25.7439  -5.9471  -0.4697   5.9567  17.6117 

Coefficients:
                          Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)                85.0924     9.5185   8.940 2.93e-09 ***
decay_data$x               -3.8846     0.9075  -4.280 0.000241 ***
indikator_15              -38.9179    16.3650  -2.378 0.025359 *  
indikator_5                24.0071    12.0400   1.994 0.057174 .  
decay_data$x:indikator_15   2.8019     1.0711   2.616 0.014872 *  
decay_data$x:indikator_5   -2.7932     3.1438  -0.888 0.382763    
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
```

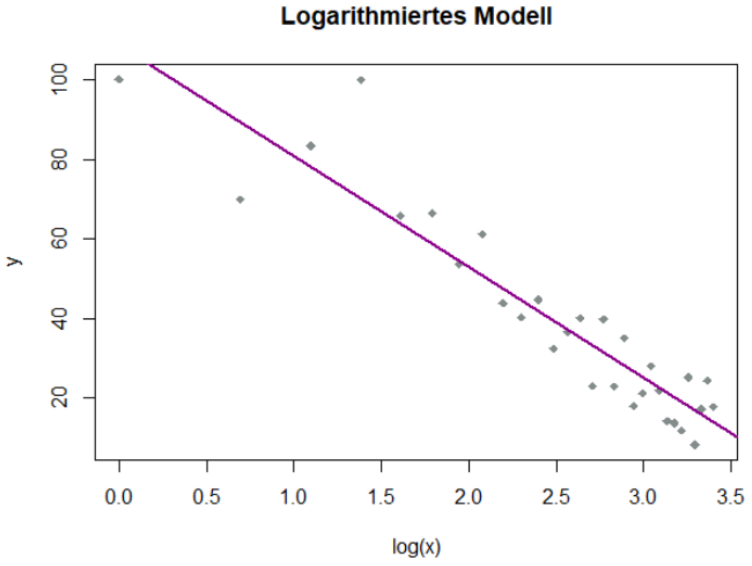
```
Residual standard error: 9.518 on 25 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9122,    Adjusted R-squared:  0.8946
F-statistic: 51.92 on 5 and 25 DF,  p-value: 2.114e-12
```

Um nahtlose Übergänge zwischen den Bereichen mit unterschiedlicher Steigung zu erhalten, wird nun ein Modell mit Spline angewandt. Daraus ist ersichtlich, dass der Zusammenhang nicht-linear ist, da sich die Steigung ab x-Wert 5 sehr stark ändert. Der *spline_def*, also der definierte Spline, ist signifikant auf dem 0.001 Level.



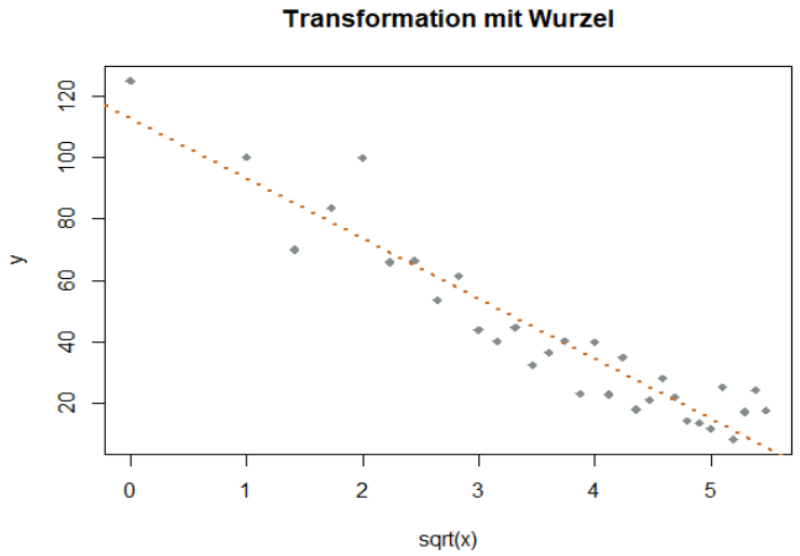

```
Call:
lm(formula = decay_data$y ~ decay_data$x + spline_def)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-22.529  -6.050  -1.040   7.047  30.473 

Coefficients:
             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)   115.530      7.349  15.720 2.01e-15 ***
decay_data$x  -11.501      1.782  -6.453 5.46e-07 ***
spline_def      9.455      1.929   4.902 3.62e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 10.7 on 28 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8756,    Adjusted R-squared:  0.8667
F-statistic: 98.54 on 2 and 28 DF,  p-value: 2.127e-13
```

Durch eine logarithmische Transformation der x-Variable ergibt sich folgendes Modell:



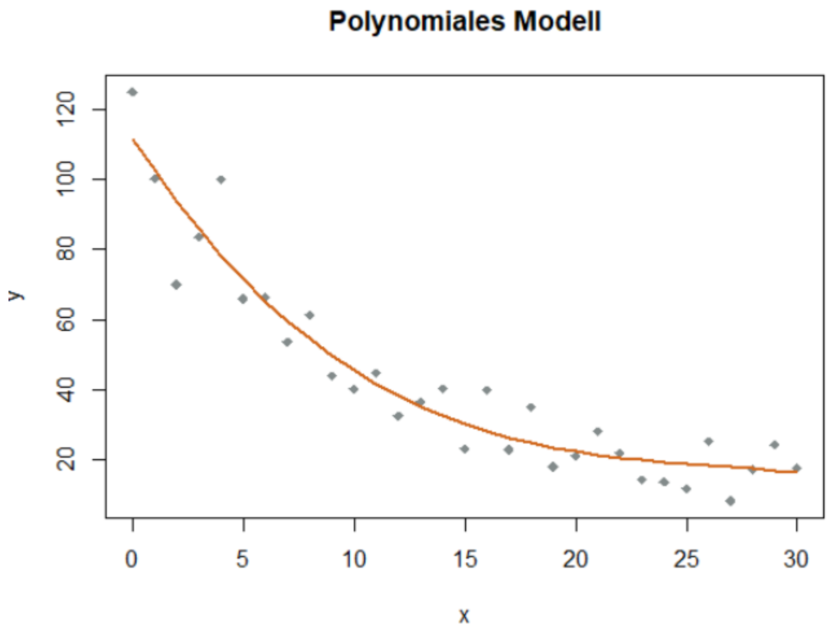

```
Call:
lm(formula = data_y ~ log_x)

Residuals:
     Min       1Q   Median       3Q      Max 
-19.3970  -6.9492  -0.6671   5.2665  29.9108 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)  108.705      5.324   20.42  < 2e-16 ***
log_x        -27.855      2.028  -13.73 5.78e-14 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 9.288 on 28 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8708,	Adjusted R-squared:  0.8661 
F-statistic: 188.7 on 1 and 28 DF,  p-value: 5.778e-14
```

Transformation von x mit Wurzel:



```
Call:
lm(formula = decay_data$y ~ sqrt_x)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-15.319  -6.640  -2.952   5.214  26.169 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)  113.055      4.922   22.97  < 2e-16 ***
sqrt_x       -19.612      1.271  -15.43 1.61e-15 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 9.824 on 29 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8914,	Adjusted R-squared:  0.8877 
F-statistic: 238.1 on 1 and 29 DF,  p-value: 1.612e-15
```

Ein polynomiales Modell (mit Komponenten bis zum Grad 3) bildet gemäß R^2 die Datensituation besser ab als die Transformation mit Logarithmus oder Wurzel:




```
Call:
lm(formula = decay_data$y ~ x_zentriert + x_zentriert2 + x_zentriert3)

Residuals:
    Min      1Q  Median      3Q     Max 
-23.716  -5.628  -1.134   6.767  21.664 

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept)  30.098610   2.429549  12.389 1.19e-12 ***
x_zentriert  -2.206154   0.453987  -4.860 4.44e-05 ***
x_zentriert2  0.150589   0.022652   6.648 3.91e-07 ***
x_zentriert3 -0.004319   0.002896  -1.491    0.147    
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 9.01 on 27 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.915,	Adjusted R-squared:  0.9055 
F-statistic: 96.86 on 3 and 27 DF,  p-value: 1.445e-14
```

R-Code zu Aufgabe 2:

```
#-----------------------------------------------------------------------------
### AUFGABE 2 ### ------------------------------------------------------------
#-----------------------------------------------------------------------------
# 2. Führen Sie mit dem Datensatz decay verschiedene Modellierungen des
#    offensichtlichnichtlinearen Zusammenhanges durch.

decay_data <- read.table(file=paste0(path,"/decay.txt"), header=TRUE)

plot(decay_data) # nicht-linearer zusammenhang zwischen x und y

cor(decay_data$x,decay_data$y)

# lineares modell lm() anschauen
lm_decay <- lm(decay_data$y ~ decay_data$x)
summary(lm_decay)
plot(lm_decay)
outlierTest(lm_decay)
influencePlot(lm_decay, id.method="identify", main="Influence Plot",
              sub="Circle size is proportial to Cook's Distance" )
# component residual plots um nicht-linearitaet von komponenten und
# residual plot zu analysieren
crPlots(lm_decay)


# piecewise regression, um besser die sprungstellen zu sehen:
piecewise <- function(x, y, wo=2, vertical=T, ...){
  if(length(wo) == 1)
    wo <- quantile(x, probs = seq(0, 1, 1/wo))
  bruch <- (cut(x, wo,labels=F))
  bruch[is.na(bruch)] <- 1
  res <- vector("list", max(bruch))
  plot(x, y, ...)
  for(i in 1:length(res)) {
    res[[i]] <- lm(y ~ x, subset = (bruch == i))
    xp <- wo[i:(i + 1)]
    yp <- xp * res[[i]]$coefficients[2] + res[[i]]$coefficients[1]
    lines(xp, yp, col=2)
  }
  if (vertical) abline(v=wo, lty=2)
  res
}

# 3 intervalle:
piecewise(decay_data$x, decay_data$y, 3, xlab="x", ylab="y",
          main = "Piecewise Linear Regression")
# 5 intervalle:
piecewise(decay_data$x, decay_data$y, 5, xlab="x", ylab="y",
          main = "Piecewise Linear Regression")
```

```
# ADDITIVES MODELL MIT 2 INDIKATOREN:
indikator_15 <- ifelse(decay_data$x>15, 1, 0)
indikator_5 <- ifelse(decay_data$x<5, 1, 0)
lm_decay_indikatoren <- lm(decay_data$y ~ decay_data$x + indikator_15 +
                              indikator_5)
summary(lm_decay_indikatoren)
plot(decay_data$y ~ decay_data$x, main="Additives Modell mit Indikator",
     pch=18, col="azure4")
lines(decay_data$x[decay_data$x > 15],
      predict(lm_decay_indikatoren)[decay_data$x > 15],
      col="chocolate", lwd=2)
lines(decay_data$x[decay_data$x < 5],
      predict(lm_decay_indikatoren)[decay_data$x < 5],
      col="blue2", lwd=2)
lines(decay_data$x[decay_data$x <= 15 & decay_data$x >= 5],
      predict(lm_decay_indikatoren)[decay_data$x <= 15 & decay_data$x >= 5],
      col="seagreen", lwd=2)


# MODELL MIT INTERAKTION:
lm_decay_interaktion <- lm(decay_data$y ~ decay_data$x*indikator_15 +
                                          decay_data$x*indikator_5)
summary(lm_decay_interaktion)
plot(decay_data$y ~ decay_data$x, main="Modell mit Interaktion",
     pch=18, col="azure4")
lines(decay_data$x[decay_data$x > 15],
      predict(lm_decay_interaktion)[decay_data$x > 15],
      col="chocolate", lwd=2)
lines(decay_data$x[decay_data$x < 5],
      predict(lm_decay_interaktion)[decay_data$x < 5],
      col="blue2", lwd=2)
lines(decay_data$x[decay_data$x <= 15 & decay_data$x >= 5],
      predict(lm_decay_interaktion)[decay_data$x <= 15 & decay_data$x >= 5],
      col="seagreen", lwd=2)


# MODELL MIT SPLINES interpolation:
spline_def <- ifelse(decay_data$x > 5, decay_data$x-5, 0)
model_spline <- lm(decay_data$y ~ decay_data$x + spline_def)
summary(model_spline)
plot(decay_data$y ~ decay_data$x, main="Modell mit Spline",
     pch=18, col="azure4")
lines(decay_data$x, fitted(model_spline),
      col="blue2", lwd=2)


# LOGARITHMIERTES MODELL:
log_x <- log(decay_data$x)
log_x <- log_x[2:length(log_x)] # weil log_x[1] ist -Inf
data_y <- decay_data$y[2:length(decay_data$y)]
intervalldaten <- data.frame(x = seq(from = min(log_x),
                       to = max(log_x), by = 0.10))
model_log <- lm(data_y ~ log_x)
summary(model_log)
model_log2 <- lm(data_y ~ log_x)
summary(model_log2)
plot(x=log_x, y=data_y, main="Logarithmiertes Modell",
     pch=18, col="azure4", xlab="log(x)", ylab="y")
abline(model_log, col="darkmagenta", lwd=2)
```

```
# TRANSFORMATION DURCH WURZEL:
sqrt_x <- sqrt(decay_data$x)
model_sqrt <- lsfit(sqrt_x,decay_data$y)
ls.print(model_sqrt)
model_sqrt2 <- lm(decay_data$y ~ sqrt_x)
summary(model_sqrt2)
plot(sqrt_x,decay_data$y,main="Transformation mit Wurzel",
     xlab="sqrt(x)", ylab="y", pch=18, col="azure4")
abline(model_sqrt, lty=3, col="chocolate", lwd=2)


# POLYNOMIALES MODELL
x_zentriert  <- decay_data$x-mean(decay_data$x)
x_zentriert2 <- x_zentriert^2
x_zentriert3 <- x_zentriert^3
model_poly <- lm(decay_data$y ~ x_zentriert + x_zentriert2 +
                 x_zentriert3)
summary(model_poly)

plot(decay_data$x, decay_data$y, pch=18,
     main="Polynomiales Modell",
     xlab="x",ylab="y", col="azure4")
lines(decay_data$x, fitted(model_poly), lty=1,
      col="chocolate", lwd=2)
```

Literaturquellen:

- Folien und R-Codes zu den bisher vorgetragenen Kapiteln aus UK Erweiterungen des linearen Modells (Prof. Marcus Hudec).
- Kernel Regression Examples Using np (Jeffrey Racine, McMaster University Ontario (Canada), https://socialsciences.mcmaster.ca/racinej/Gallery/Regression.html).
- R Regression Diagnostics (Vik Paruchuri, DataQuest), http://www.vikparuchuri.com/blog/r-regression-diagnostics-part-1/).