Reto Berger

Applied Statistics for Data Science

Lineare Regression

Hochschule Luzern - Informatik

8. Mai 2023

Lineare Regression

Peter Büchel

HSLU I

ASTAT: Block 11

Lineare Regression

- Fortsetzung von Block 3: Jetzt mit Hypothesentest
- Lineare Regression ist einer der Startpunkte in Machine Learning

Einführung, Beispiel

- Auftrag als Statistiker einer Firma: Analyse, Strategie auszuarbeiten, wie Verkauf eines bestimmten Produktes gesteigert werden kann
- Firma stellt Daten von Werbebudget und Verkauf zur Verfügung
- Datensatz `Werbung` besteht aus:
    - Dem `Verkauf` dieses Produktes in 200 verschiedenen Märkten und den Werbebudgets für dieses Produkt in diesen Märkten
    - Werbebudget für die drei verschiedenen Medien `TV`, `Radio` und `Zeitung`
- Code:

```
Werbung <- read.csv("../Data/Werbung.csv")[, -1]
head(Werbung, 3)
```

```
##      TV Radio Zeitung Verkauf
## 1 230.1  37.8    69.2    22.1
## 2  44.5  39.3    45.1    10.4
## 3  17.2  45.9    69.3     9.3
```

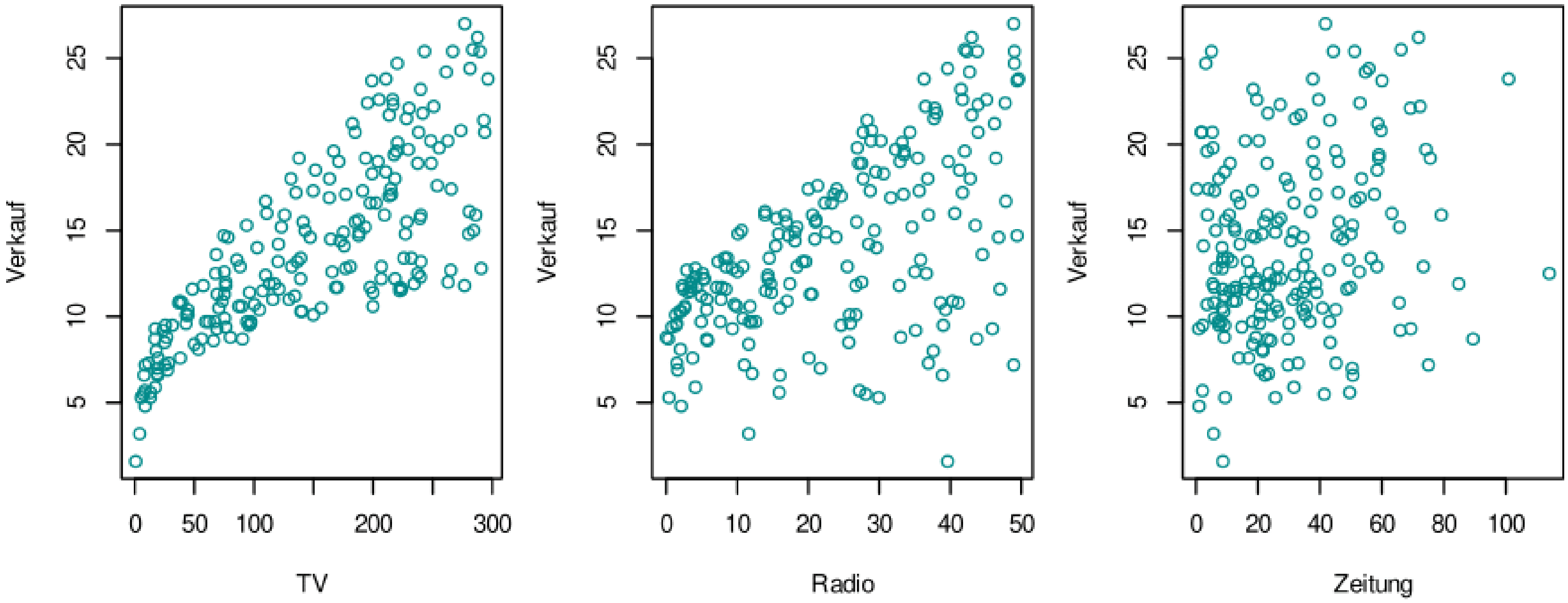
- Daten in Streudiagrammen in Abbildung dargestellt:

```r
TV <- Werbung[, 1]
Radio <- Werbung[, 2]
Zeitung <- Werbung[, 3]
Verkauf <- Werbung[, 4]

plot(Verkauf ~ TV, col = "darkcyan", xlab = "TV", ylab = "Verkauf")

plot(Verkauf ~ Radio, col = "darkcyan", xlab = "Radio", ylab = "Verkauf")

plot(Verkauf ~ Zeitung, col = "darkcyan", xlab = "Zeitung", ylab = "Verkauf")
```



- Für Firma nicht möglich, Verkauf des Produktes direkt zu erhöhen
- Aber sie kann Werbeausgaben in den drei Medien kontrollieren
- Ziel: Zusammenhang zwischen Werbung und Verkauf herstellen, damit Firma ihre Werbebudgets anpassen kann, damit sie den Verkauf indirekt erhöhen kann
- Ziel: Möglichst genaues *Modell* zu entwickeln, damit auf Basis der drei Medienbudgets der Verkauf des Produkts *vorhersagt* werden kann
- Abbildung oben links: Deutlicher Zusammenhang zwischen dem Werbebudget und dem Verkauf des Produktes
- Je mehr in Werbung investiert wird, desto grösser Verkaufszahlen
- Frage: Welche *Form* dieser Zusammenhang?

- Möglichkeit: Datenpunkte folgen einer Gerade siehe später
- Abbildung oben rechts: Überhaupt keinen Zusammenhang
- Folglich kann man die Zeitungswerbung hier sein lassen

- Mathematische Sichtweise: Gesucht Funktion f, die Werbebudgets X_1 (`TV`), X_2 (`Radio`) und X_3 (`Zeitung`) den Verkauf Y ermittelt:

$$Y \approx f(X_1, X_2, X_3)$$

- Beziehung oben: Kein Gleichheitszeichen, da Streudiagramme keine Graphen einer Funktion darstellen

- Funktion f kann Zusammenhang zwischen X_1, X_2, X_3 und Y nur *approximativ* darstellen

- Bezeichnung:
  - Variable Y: *Zielgrösse*, *Outputvariable*,
  - X_1, X_2 und X_3: *Prädiktoren,erklärende Variable*

- Allgemein: Quantitative Zielgrösse Y und p verschiedene Prädiktoren $X_1, X_2, \ldots, X_p$

- Annahme: Es besteht *irgendein* Zusammenhang zwischen Y und $X_1, X_2, \ldots, X_p$

- Allgemeine Form:

$$Y = f(X_1, X_2, \ldots, X_p) + \varepsilon$$

- f irgendeine feste, aber *unbekannte* Funktion von $X_1, X_2, \ldots, X_p$

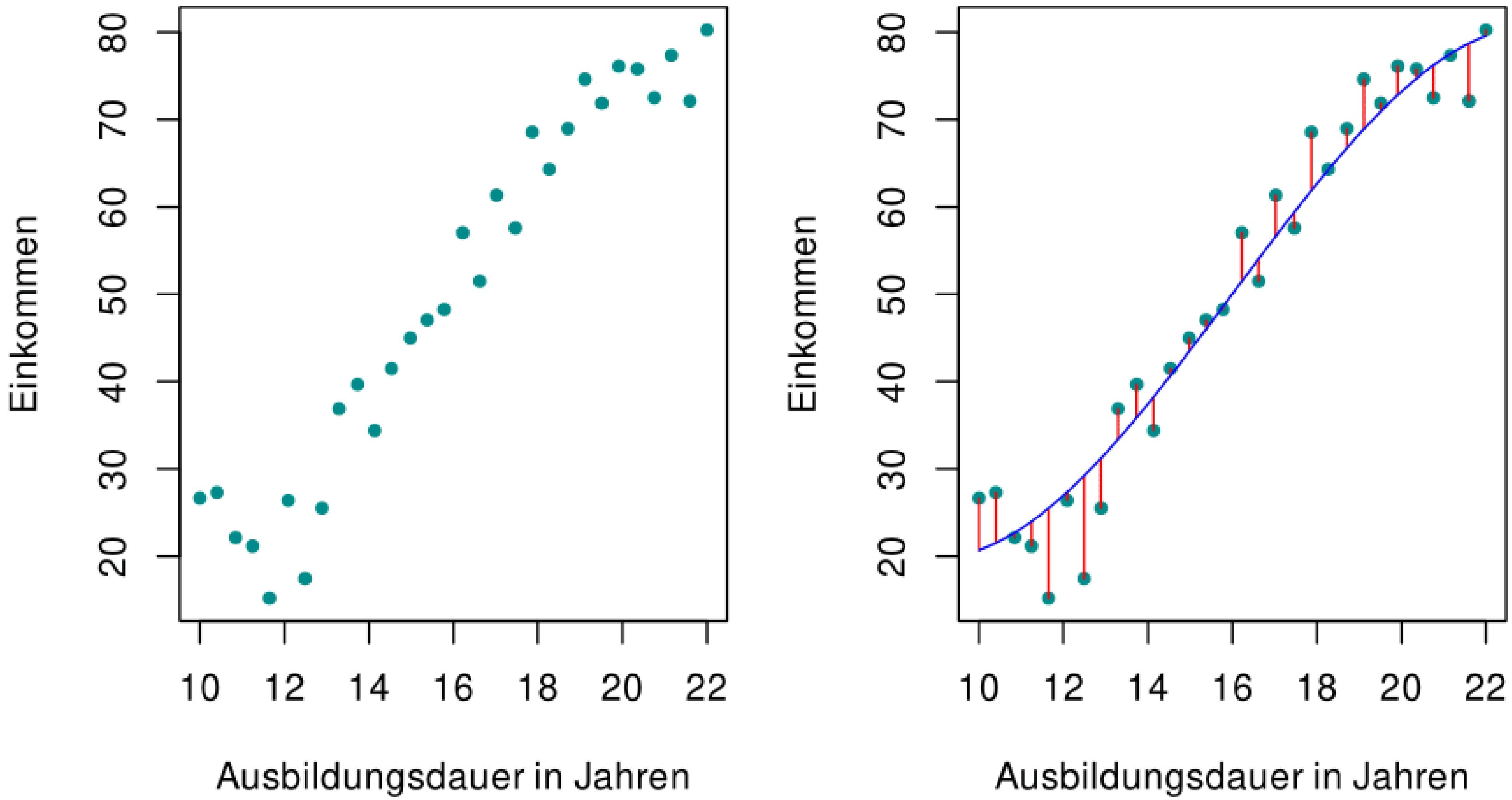
- Grösse ε: *Zufälliger Fehlerterm* unabhängig von $X_1, X_2, \ldots, X_p$ mit Mittelwert 0

- Bedeutung Fehlerterm $\varepsilon \quad \rightarrow \quad$ Folgendes Beispiel

Beispiel: Einkommen

- Abbildung links: `Einkommen` von 30 Individuen in Abhängigkeit der `Ausbildungsdauer` (in Jahren)

- Graphik deutet an: `Einkommen` kann aus `Ausbildungsdauer` berechnet werden



- Aber: Funktion f, die Prädiktoren und Zielgrösse miteinander in Verbindung bringt, in der Regel unbekannt
- In dieser Situation: f aus den Daten *schätzen*
- Datensatz simuliert: Funktion f bekannt (blaue Kurve) in Abb. rechts
- Einige Beobachtungen liegen überhalb, andere unterhalb der blauen Kurve
- Die roten vertikalen Linien repräsentieren den Fehlerterm ε
- Insgesamt haben Fehler einen empirischen Mittelwert annähernd 0
- Ziel der Regression: Funktion f zu *schätzen*

- Schätzen in der Stochastik: Berechnung
- Schätzung ist Annäherung (Approximation) an wahre Grösse
- Geschätzte Grösse wird mit Hut $\widehat{\ }$ gekennzeichnet
- $\widehat{Y}$: Schätzung der unbekannten Grösse Y
- $\widehat{f}$: Schätzung der unbekannten Funktion f

Warum soll f geschätzt werden?

- Hauptgründe, warum man unbekannte Funktion f schätzen will:
  - Datenpunkte *vorherzusagen* (*Prognose*)
  - *Rückschlüsse* auf Funktion selbst zu ziehen
- Prognose: Oft Prädiktoren $X_1, X_2, \ldots, X_p$ einfach verfügbar, aber die Zielgrösse nicht
- In so einem Fall: Y schätzen durch

$$\widehat{Y} = \widehat{f}(X_1, X_2, \ldots, X_p)$$

- Fehlerterm im Mittel 0

Beispiel

- Prädiktoren $X_1, X_2, \ldots, X_p$ seien die Werte von verschiedenen Charakteristiken einer Blutentnahme, die der Hausarzt des Patienten in seinem Labor bestimmen kann

- Zielgrösse Y: Mass für Risiko, dass der Patient starke Nebenwirkungen bei der Anwendung eines bestimmten Medikamentes erleidet

- Arzt möchte bei Verschreibung eines Medikamentes Y aufgrund von $X_1, X_2, \ldots, X_p$ vorhersagen können, damit er nicht ein Medikament Patienten verschreibt, die ein hohes Risiko für Nebenwirkungen bei diesem Medikament haben - d.h. bei denen Y gross ist

- Genauigkeit von $\widehat{Y}$ als Vorhersage von Y hängt von zwei Grössen ab:
  - *Reduzibler Fehler*
  - *Irreduzibler Fehler*
- Allgemein: $\widehat{f}$ keine perfekte Schätzung von f und diese Ungenauigkeit führt zu einem Fehler
- *Reduzibler Fehler*: Schätzung mit statistischen Methoden verbessern
- Aber auch für perfekte Schätzung von f: Outputvariable hat Form

$$\widehat{Y} = f(X_1, X_2, \ldots, X_p)$$

- Vorhersage Y enthält immer noch Fehler
- Liegt am Fehlerterm ε: Hängt nicht von $X_1, X_2, \ldots, X_p$ ab
- Variablilität von ε beeinflusst die Genauigkeit der Vorhersage

- *Irreduzibler Fehler*: Fehler kann nicht beeinflusst werden, wie gut auch die Schätzung von f ist
- Woher kommt nun dieser Fehler ε, der grösser als Null ist?
- Grösse kann Variablen enthalten, die nicht gemessen wurden, die aber für die Vorhersage von Y wichtig sind
- Da diese Variablen nicht gemessen wurden $\quad\rightarrow\quad$ Für die Vorhersage auch nicht verwendbar
- Grösse ε kann aber auch nicht messbare Grössen enthalten
- Bsp: Stärke der Nebenwirkungen eines Medikamentes abhängig sein von der Tageszeit der Einnahme des Medikamentes oder auch einfach vom allgemeinen Wohlbefinden des Patienten

Rückschlüsse auf f: Fragestellungen

- *Welche Inputvariablen werden mit dem Output assoziert?*
  - Natürlich alle, denkt man zuerst
  - Aber oft sind es einige wenige Variablen, die auf Y einen substantiellen Einfluss haben
  - Sehr viele Inputvariablen: *Wichtige* Inputvariablen identifizieren
  - Beispiel `Werbung`:
    - Ausgaben bei TV-Werbung grosser Einfluss auf die Verkaufszahlen
    - Zeitungswerbung aber nicht
    - Auf die TV-Werbung konzentrieren

- *Wie sieht der Zusammenhang zwischen Outputvariable und jeder Inputvariable aus?*
  - Einige Prädiktoren haben einen positiven Zusammenhang mit der Outputvariable
  - Vergrösserung der Inputvariable hat in diesem Fall Vergrösserung von Y zur Folge
  - Andere Inputvariablen haben einen negativen Zusammenhang mit Y
  - In Abhängigkeit von der Komplexität von f kann der Zusammenhang zwischen der Zielvariablen und einer erklärenden auch von den Werten der anderen erklärenden Variablen abhängen (Interaktion)

- *Kann der Zusammenhang zwischen der Outputvariable und jeder Inputvariable durch eine lineare Gleichung angemessen beschrieben werden oder ist der Zusammenhang komplizierter?*
  - Historisch sind die meisten Schätzungen von f linear
  - Dies hat damit zu tun, dass solche Schätzungen sehr einfach sind
  - In vielen Situationen: Annahme Linearität ausreichend oder gar wünschenswert
  - Aber oft ist der wahre Zusammenhang komplizierter und das lineare Modell liefert keinen angemessenen Zusammenhang zwischen Input- und Outputvariablen

Fragen für Beispiel der `Werbung`

- Welche Medien tragen zum Verkauf des Produktes bei?
- Welche Medien haben den grössten Einfluss auf den Verkauf?
- Welchen Zuwachs im Verkauf hat eine bestimmte Vergrösserung der TV-Werbung zur Folge?

Schätzung von f?

- Mehrere Verfahren um zu f schätzen

- Hier nur *parametrische Methode*

- Vorgehen:
  - *Annahme* über die funktionale Form von f
  - Einfachste Annahme: f linear in $X_1, X_2, \ldots, X_p$:

$$f(X_1, X_2, \ldots, X_p) = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_p X_p$$

  - Nach Wahl des Modells: Verfahren, das die Daten in das Modell *passt*
  - Lineares Modell: Parameter $\beta_0, \beta_1, \ldots \beta_p$ schätzen
  - Parameter so bestimmen, dass

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \ldots + \beta_p X_p$$

  - Häufigste Methode zur Bestimmung von $\beta_0, \beta_1, \ldots \beta_p$: *Methode der kleinsten Quadrate*

Beispiele

- Beispiel `Werbung`: Lineares Modell:

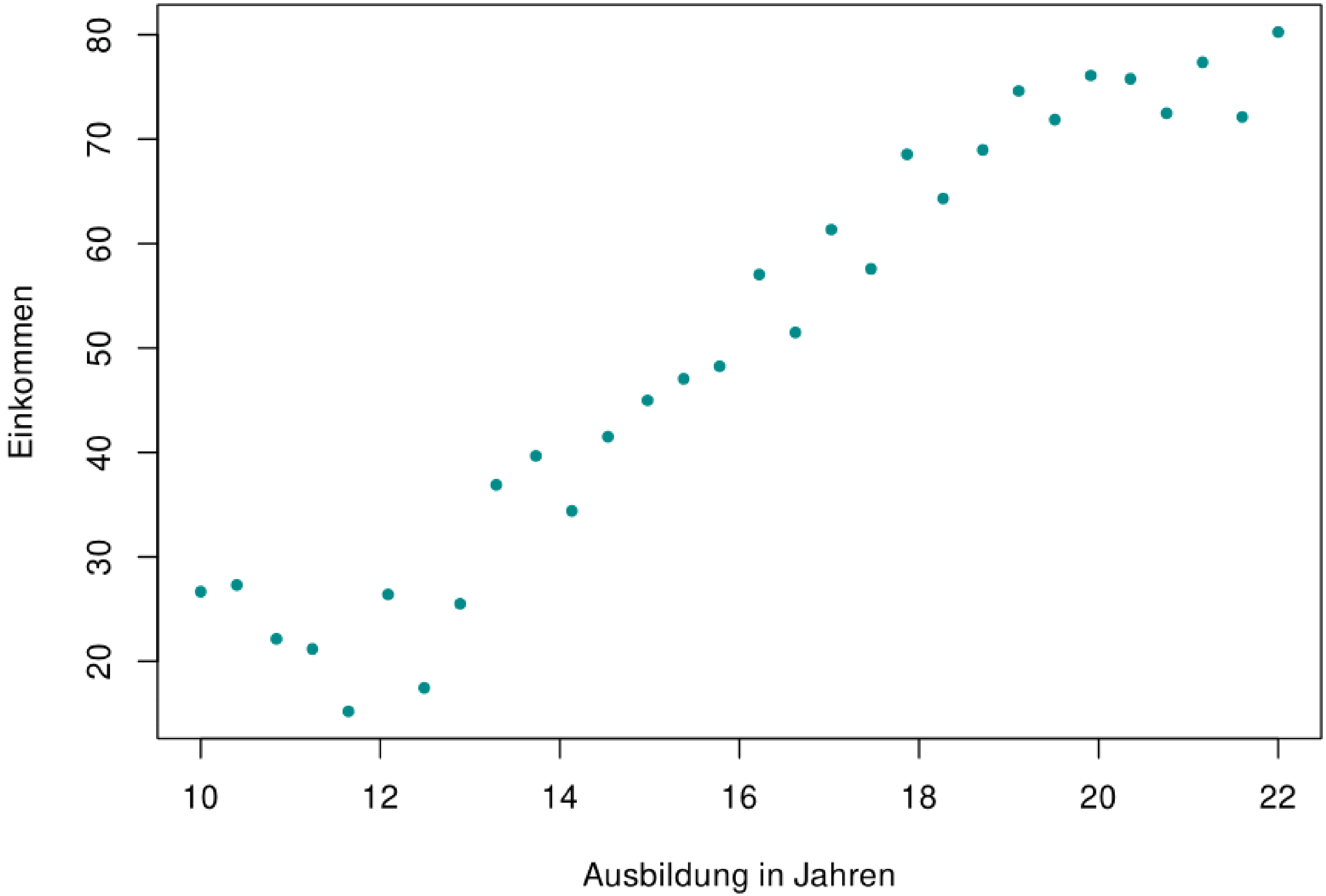
$$\texttt{Verkauf} \approx \beta_0 + \beta_1 \cdot \texttt{TV} + \beta_2 \cdot \texttt{Radio} + \beta_3 \cdot \texttt{Zeitung}$$

- Beispiel `Einkommen`: Lineares Modell:

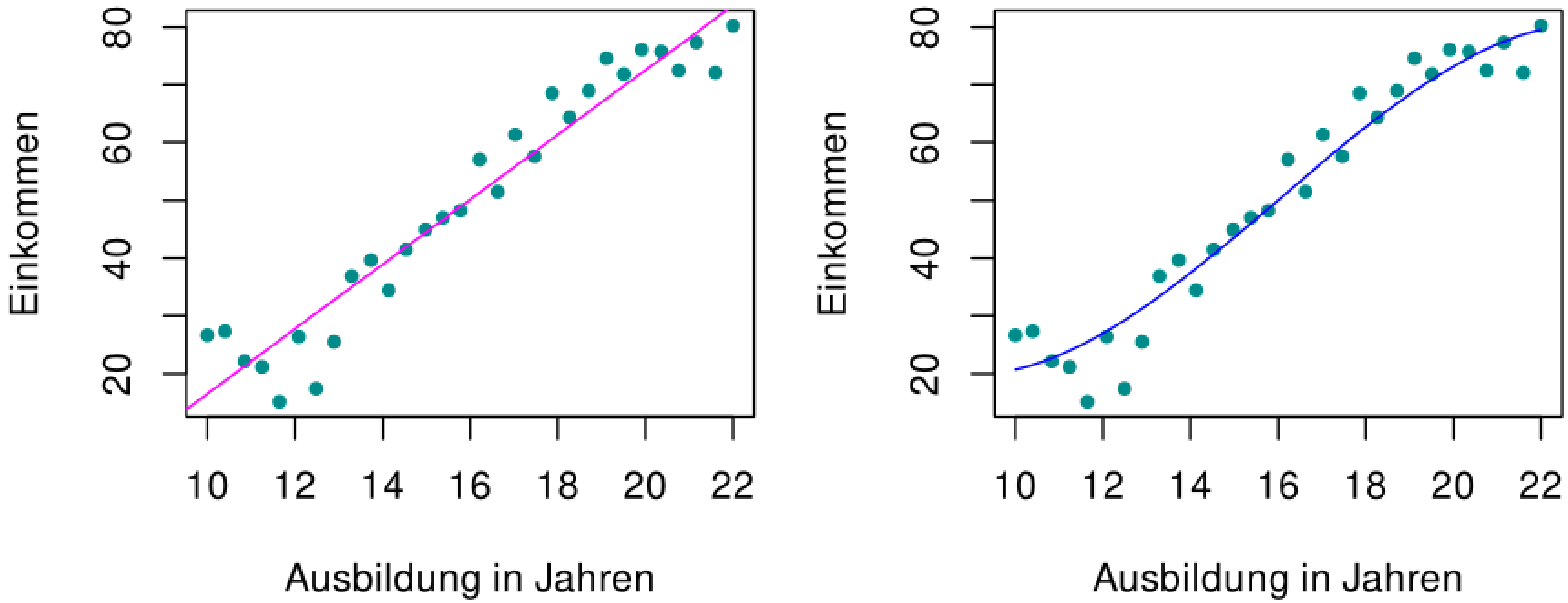
$$\texttt{Einkommen} \approx \beta_0 + \beta_1 \cdot \texttt{Ausbildung}$$

Beispiel

- Datensatz `Einkommen`:



- Frage: Welches *Modell* wählen, oder welche Form soll f haben



- Aus Daten: Lineares Modell (oben links):

$$f(X) = \beta_0 + \beta_1 X$$

- Auch kubisches Modell (Polynom 3. Grades) möglich (oben rechts):

$$f(X) = \beta_0 + \beta_1 X + \beta_2 X^2 + \beta_3 X^3$$

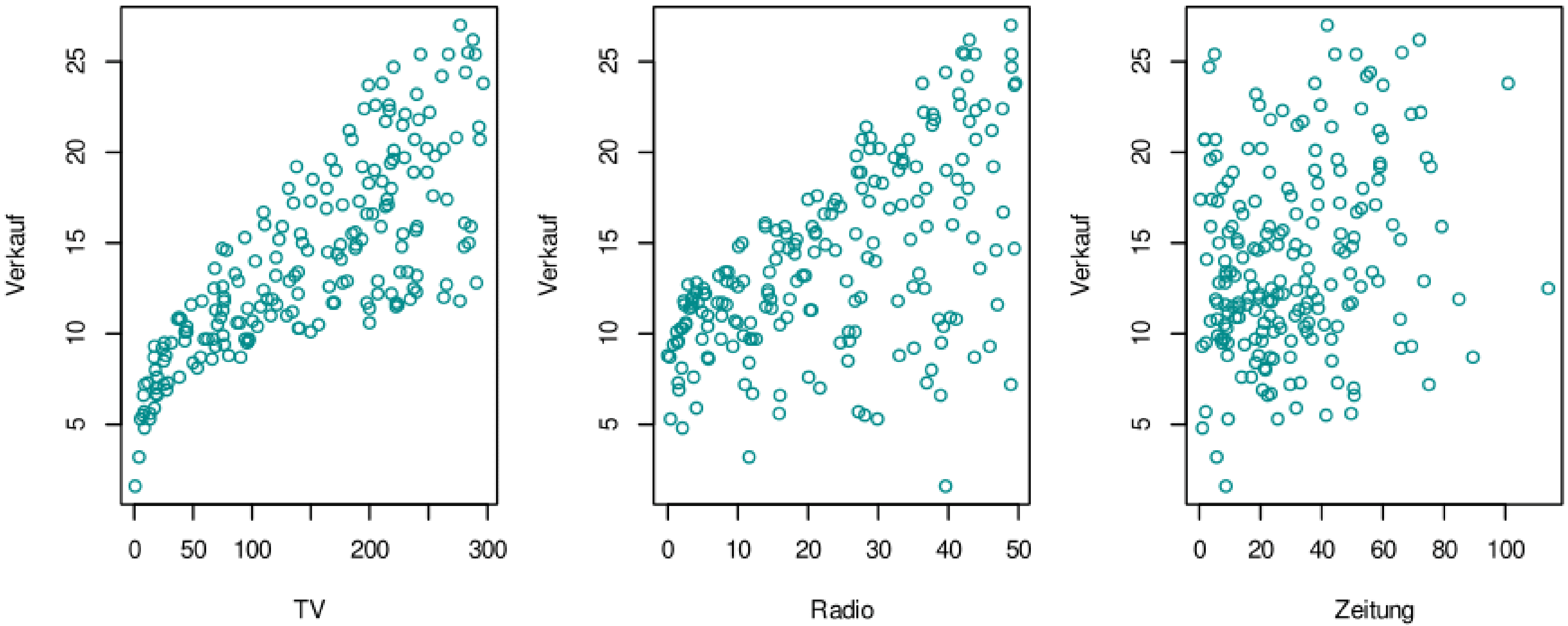
- Viele weitere Modelle denkbar
- Aber welches ist nun das „richtige"?
- Dies lässt sich in dieser Absolutheit nicht entscheiden
- Funktion f i. A. unbekannt: Liegt an uns „bestes" Modell zu wählen
- Statistik: Bei Entscheidungsfindung behilflich
- Welches Modell ist in unserem Beispiel das „bessere"?
- Kubisches Modell scheint besser zu passen, aber auch komplizierter
- Lineares Modell einfacher (etwas weniger genau) hat Vorteil: Die Parameter β_0 und β_1 lassen sich geometrisch interpretieren:
    - β_0 ist der y-Achsenabschnitt
    - β_1 die Steigung der Geraden

Bemerkungen

- Komplizierteres Modell muss *nicht* das bessere Modell sein
- Phänomen: *Overfitting*
- Fehler oder Ausreisser werden zu stark berücksichtigt
- In sehr vielen Fällen: Lineares Modell ausreichend

Lineare Regression

- Datensatz `Werbung`:



- `Verkauf` für ein bestimmtes Produkt (in Einheiten von tausend verkauften Produkten) als Funktion von Werbebudgets (in Einheiten von tausend CHF) für `TV`, `Radio` und `Zeitung`

- Aufgrund dieser Daten: Statistiker erstellen Marketingplan, der für nächstes Jahr zu höheren Verkäufen führen soll

- Welche Informationen sind nützlich, um solche Empfehlungen auszuarbeiten?

Einfaches Regressionsmodell

- *Einfache lineare Regression*: Sehr einfaches Verfahren, um einen quantitativen Output Y auf der Basis einer einzigen Inputvariable X
- Annahme: Annähernd lineare Beziehung zwischen X und Y
- Mathematisch: Lineare Beziehung:

$$Y \approx \beta_0 + \beta_1 X$$

- Dabei steht „$\approx$" für „ist annähernd modelliert durch"

Beispiel

- Beispiel `Werbung`: X Grösse `TV` und Y Grösse `Verkauf`
- Nach dem linearen Regressionsmodell gilt dann

$$\texttt{Verkauf} \approx \beta_0 + \beta_1 \cdot \texttt{TV}$$

- Grössen β_0 und β_1 sind unbekannte Konstanten, die den y-Achsenabschnitt und die Steigung des linearen Modells darstellen
- β_0 und β_1 die *Koeffizienten* oder *Parameter* des Modells

- Koeffizienten werden aus den gegebenen Daten geschätzt
- Schätzungen $\widehat{\beta}_0$ und $\widehat{\beta}_1$ für die Modellkoeffizienten
- Sind diese Koeffizienten bekannt, so können zukünftige Verkäufe auf der Basis eines bestimmten Werbebudgets für TV vorhersagen
- Berechnung mittels:

$$\widehat{y} = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x$$

  wobei $\widehat{y}$ die Vorhersage von Y auf Basis des Inputs $X = x$ bezeichnet.

Schätzung der Parameter

- Praxis: β_0 und β_1 unbekannt
- Bevor lineare Modell benützen $\quad \rightarrow \quad$ Koeffizienten schätzen
- Gehen von n Beobachtungspaaren aus:

$$(x_1, y_1), \quad (x_2, y_2), \quad \dots, \quad (x_n, y_n)$$

- Jedes Paar besteht aus je einer Messung von X und Y
- Beispiel `Werbung`: $n = 200$ verschiedene Beobachtungspaare (Märkte)
  - x-Koordinate: TV-Budget
  - y-Koordinate: entsprechenden Produktverkäufen

- Ziel: $\widehat{\beta}_0$ und $\widehat{\beta}_1$ so zu bestimmen, dass die Gerade $\widehat{y} = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x$ möglichst gut zu den Daten passt

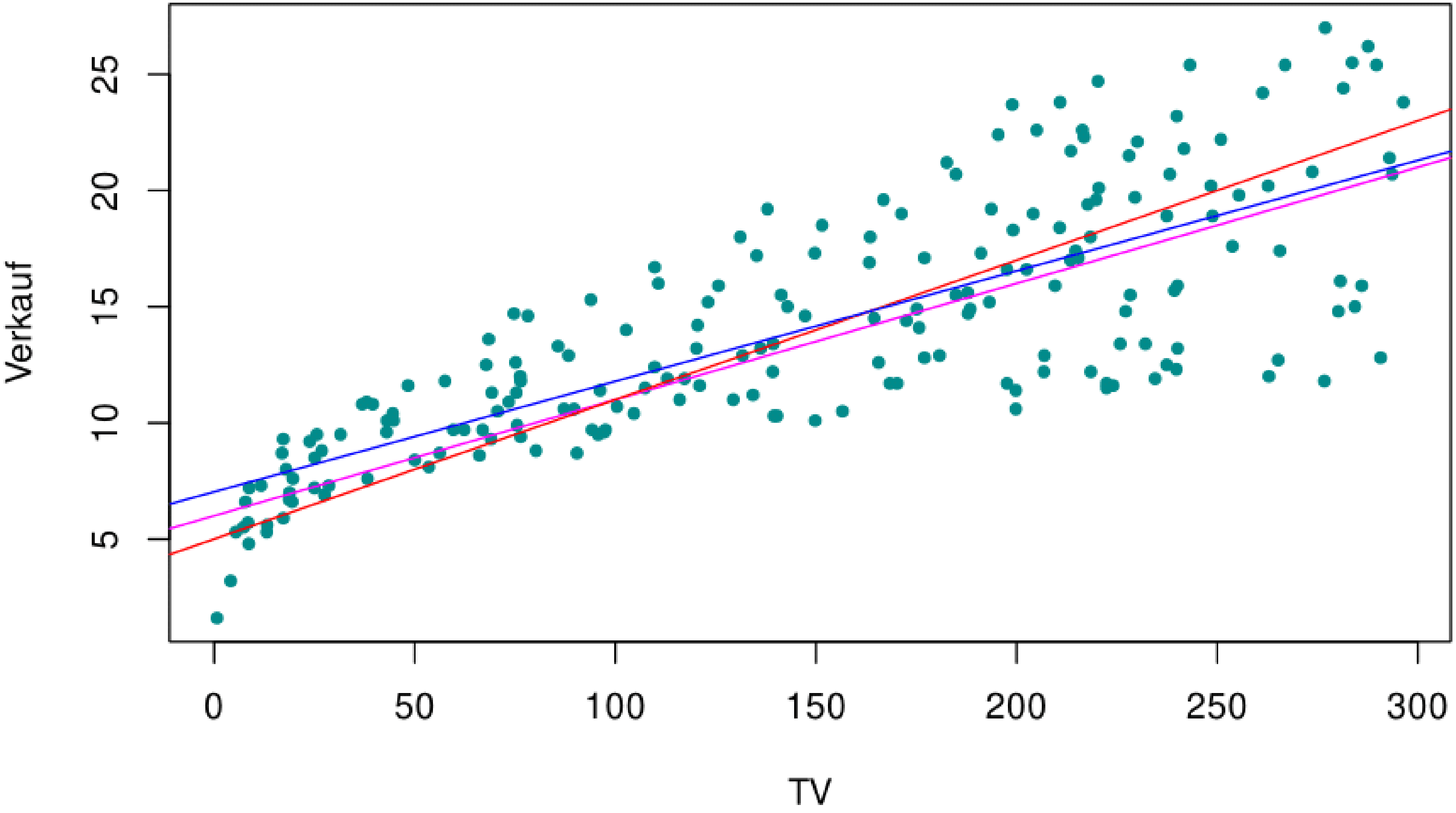
- Das heisst, dass
$$y_i \approx \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_i$$
für alle $i = 1, \ldots, n$

- Auf der linken Seite der obigen approximativen Beziehung steht der Messwert, auf der rechten der zugehörige y-Wert auf der Geraden

- Die Frage ist nun, was heisst „möglichst gut"?

Beispiel

- Abbildung: Einige Geraden eingezeichnet, die gut zu Datenpunkten passen



- Welche passt am besten?

Methode der kleinsten Quadrate

- Vorhergesagter Wert für Y abhängend vom i-ten Wert von X, also x_i:

$$\widehat{y}_i = \widehat{\beta}_0 + \widehat{\beta}_1 x_i$$

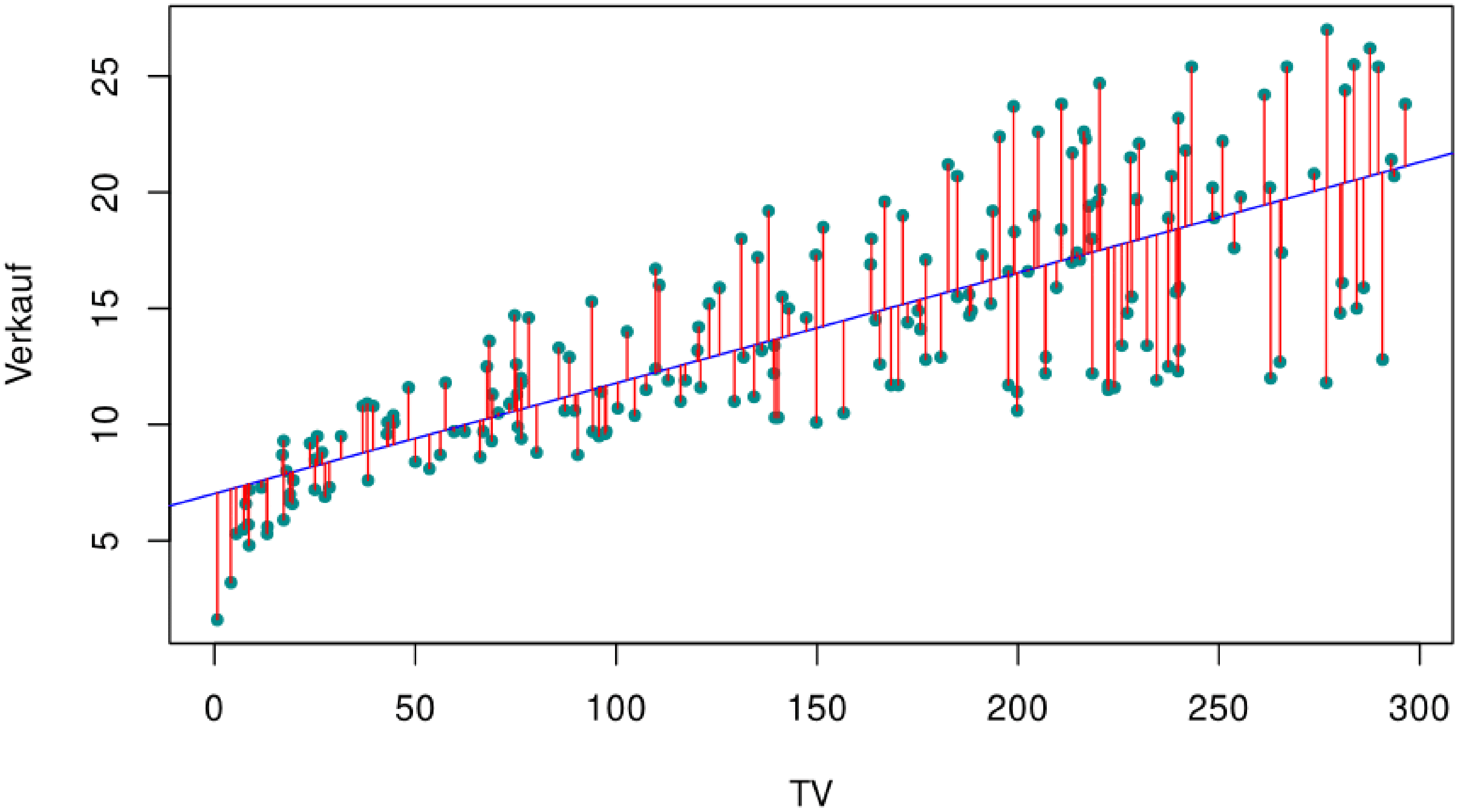
- i-tes *Residuum*:

$$r_i = y_i - \widehat{y}_i$$

- Differenz zwischen dem i-ten *beobachteten* Wert der Zielgrösse und dem i-ten von unserem linearen Modell *vorhergesagten* Wert der Zielgrösse

Beispiel

- Abbildung: Residuen als Strecken rot eingezeichnet



- Residuen oberhalb der Geraden positiv, unterhalb der Geraden negativ

- Summe der *Quadrate* der Residuen (RSS genannt)
- Es gilt dann
$$\mathrm{RSS} = r_1^2 + r_2^2 + \ldots + r_n^2$$
- Oder äquivalent:
$$\mathrm{RSS} = (y_1 - \widehat{\beta}_0 - \widehat{\beta}_1 x_1)^2 + (y_2 - \widehat{\beta}_0 - \widehat{\beta}_1 x_2)^2 + \ldots + (y_n - \widehat{\beta}_0 - \widehat{\beta}_1 x_n)^2$$
- Methode der kleinsten Quadrate: $\widehat{\beta}_0$ und $\widehat{\beta}_1$ so gewählt, dass RSS *minimal* wird

Für die, die es interessiert

- Mit Differentialrechnung: Für $\widehat{\beta}_0$ und $\widehat{\beta}_1$ gilt:

$$\widehat{\beta}_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2}$$

$$\widehat{\beta}_0 = \overline{y} - \widehat{\beta}_1 \overline{x}$$

mit

$$\overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i \quad \text{und} \quad \overline{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$$

- Mit Hilfe der Methode der kleinsten Quadrate geschätzte Koeffizienten für die einfache lineare Regression

Beispiel

- Beispiel `Werbung`: $\widehat{\beta}_0$ und $\widehat{\beta}_1$ und die Regressionsgerade bestimmen:

```
lm(Verkauf ~ TV)

##
## Call:
## lm(formula = Verkauf ~ TV)
##
## Coefficients:
## (Intercept)           TV
##     7.03259      0.04754
```

- Wert unter `Intercept`: $\widehat{\beta}_0 \quad \rightarrow \quad y$-Achsenabschnitt
- Wert unter `TV`: $\widehat{\beta}_1 \quad \rightarrow \quad$ Steigung der Geraden
- Lineares Modell:

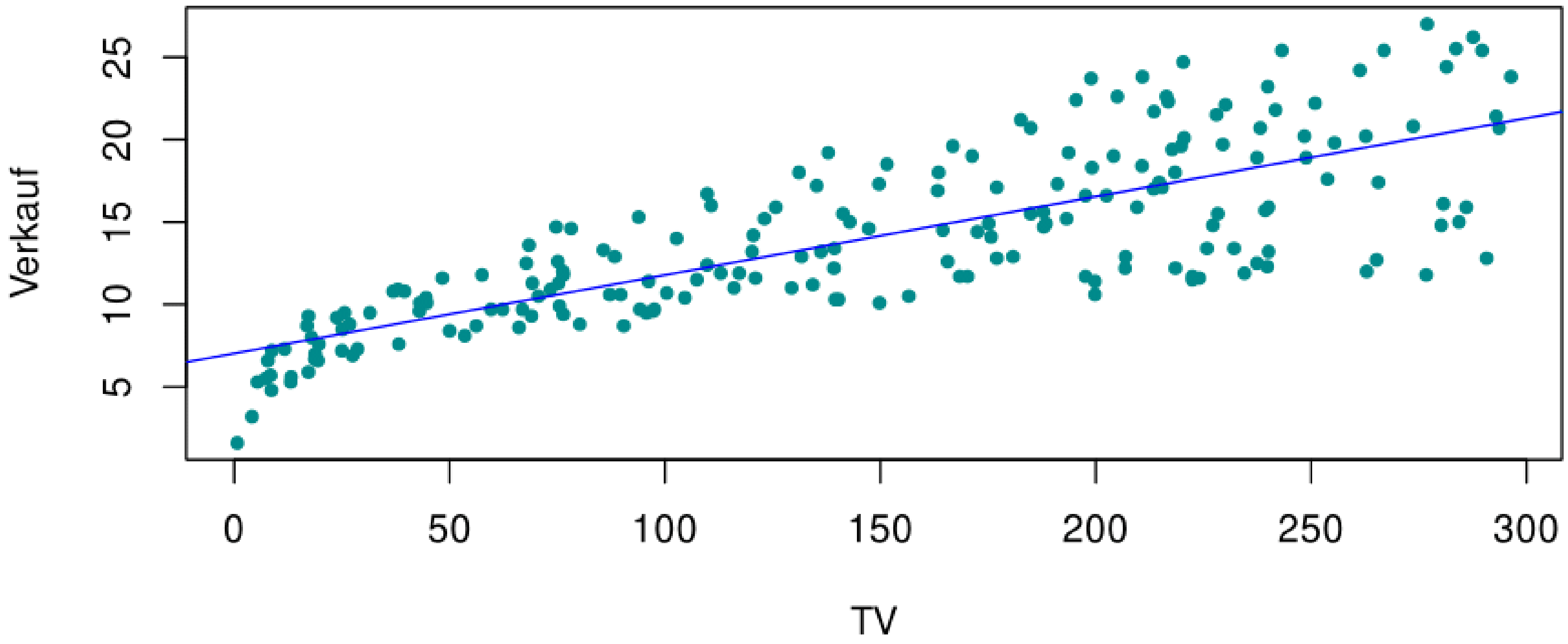
$$Y \approx 7.03 + 0.0475X$$

- Gemäss Näherung: Für zusätzliche CHF 1000 Werbeausgaben werden 47.5 zusätzliche Einheiten des Produktes verkauft

- Abbildung mit Regressionsgerade

```r
plot(TV, Verkauf, col = "darkcyan", xlab = "TV", ylab = "Verkauf",
    pch = 20)

abline(lm(Verkauf ~ TV), col = "blue")
```



Vertrauensintervall: Beispiel

- Vertrauensintervall Beispiel `Werbung` mit R:

```
confint(lm(Verkauf ~ TV), level = 0.95)
##                  2.5 %     97.5 %
## (Intercept) 6.12971927 7.93546783
## TV          0.04223072 0.05284256
```

- 95 %-Vertrauensintervall von β_0:

$$[6.130, 7.935]$$

- Für β_1:

$$[0.042, 0.053]$$

- Ohne Werbung: Verkauf zwischen 6130 und 7935 Einheiten

- Für zusätzliche CHF 1000 für TV-Werbung durchschnittlich zwischen 42 und 53 Einheiten mehr verkaufen

Hypothesentest: Statistische Signifikanz von β_1

- Standardfehler: Hypothesentest für die Regressionsparameter durchführen

- Häufigste Hypothesentest: Testen der *Nullhypothese*

$$H_0: \quad \text{Es gibt } \textit{keinen} \text{ Zusammenhang zwischen } X \text{ und } Y$$

- *Alternativhypothese*

$$H_A: \quad \text{Es gibt } \textit{einen} \text{ Zusammenhang zwischen } X \text{ und } Y$$

- Mathematisch:

$$H_0: \quad \beta_1 = 0$$

- Gegen:

$$H_A: \quad \beta_1 \neq 0$$

- $\beta_1 = 0$, dann:
$$Y = \beta_0 + \varepsilon$$
- Y hängt *nicht* von X ab
- Nullhypothese testen: $\widehat{\beta}_1$ genügend weit von 0 weg, damit β_1 nicht 0
- Mit t-Statistik

Beispiel

- p-Wert von β_1 im Beispiel `Werbung` berechnen:

```
summary(lm(Verkauf ~ TV))
```

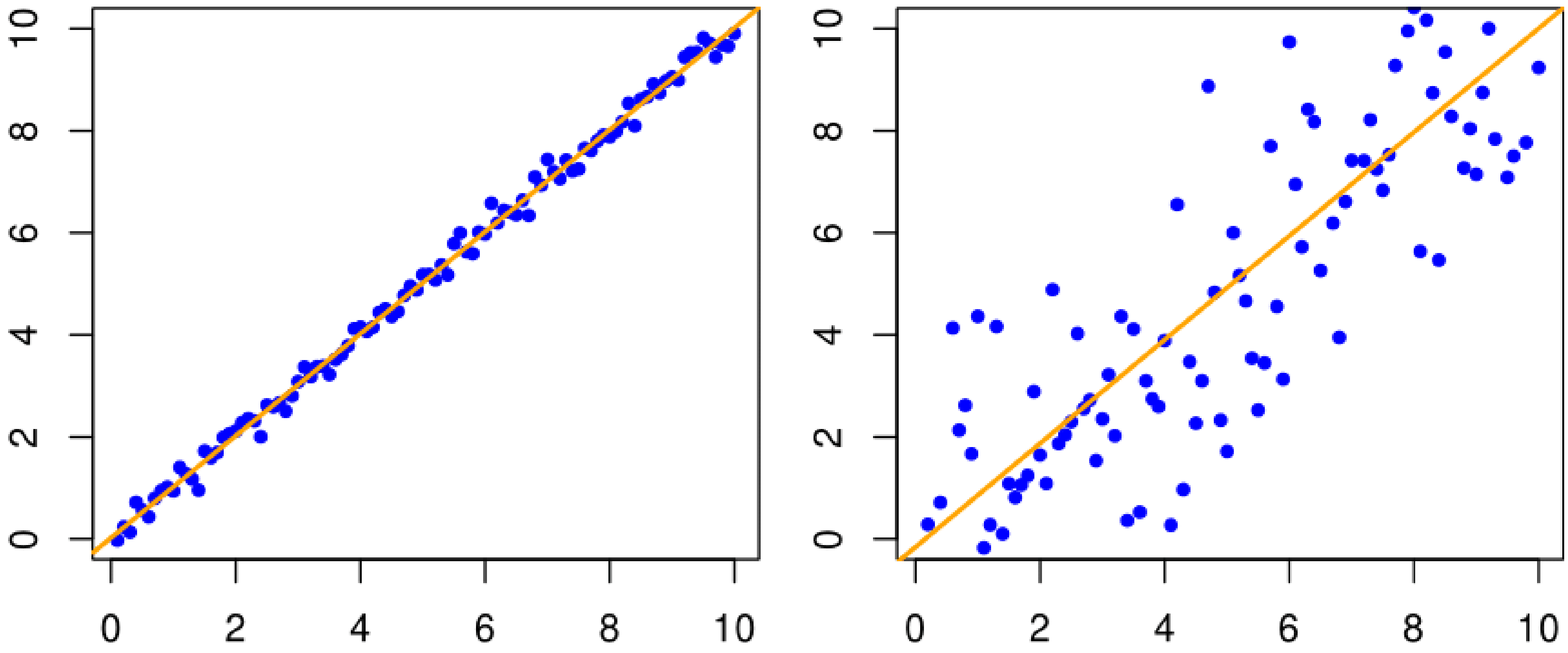
```
##
## Call:
## lm(formula = Verkauf ~ TV)
##
## Residuals:
##     Min      1Q  Median      3Q     Max
## -8.3860 -1.9545 -0.1913  2.0671  7.2124
##
## Coefficients:
##             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) 7.032594   0.457843   15.36   <2e-16 ***
## TV          0.047537   0.002691   17.67   <2e-16 ***
## ---
## Signif. codes:
## 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 3.259 on 198 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.6119,Adjusted R-squared:  0.6099
## F-statistic: 312.1 on 1 and 198 DF,  p-value: < 2.2e-16
```

- Eintrag `Coefficients` unter `Pr(>|t|)`: p-Wert $2 \cdot 10^{-16}$
- Bei weitem kleiner als 0.05
- Nullhypothesen $\beta_1 = 0$ verwerfen: $\beta_1 \neq 0$
- Klarer Hinweise für Zusammenhang zwischen `TV` und `Verkauf`

Abschätzung der Genauigkeit des Modells: R^2

- Nullhypothese verworfen: *In welchem Ausmass passt das Modell zu den Daten?*

- Abbildung:



  - Links: Steigende Gerade passt sehr gut zu Punkten
  - Rechts: Steigende Gerade passt *nicht* gut zu Punkten

- Qualität einer linearen Regression abgeschätzt durch den *residual standard error* (RSE) und die R^2-Statistik

- R^2 wichtiger

- R^2-Statistik: Wert zwischen 0 und 1

- Sie gibt an, welcher Anteil der Variabilität in Y mit Hilfe des Modells durch X erklärt werden

- Wert nahe bei 1: ein grosser Anteil der Variabiliät wird durch die Regression erklärt. Das Modell beschreibt also die Daten sehr gut.

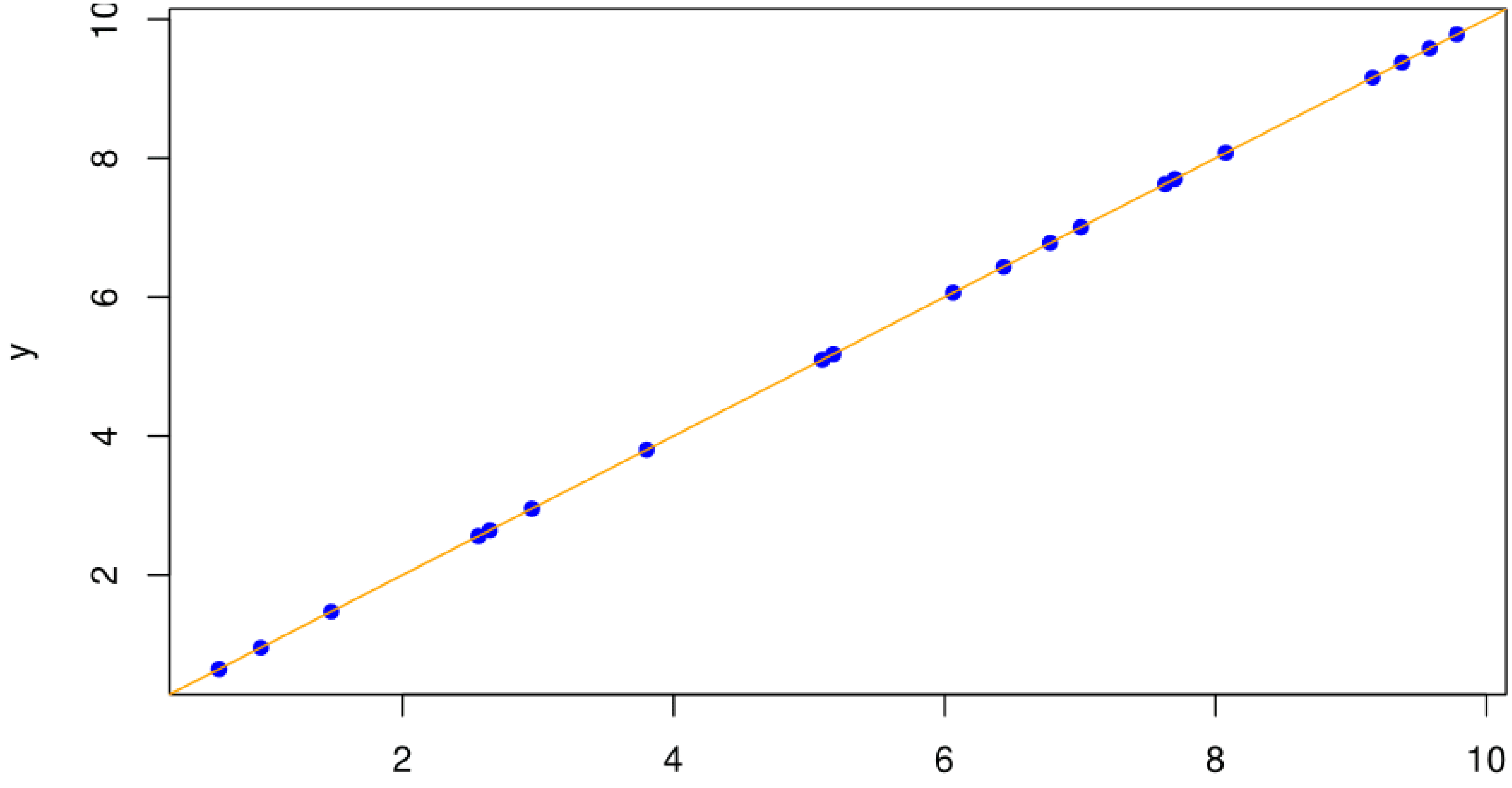
- Wert nahe bei 0: Regression erklärt die Variabilität der Zielvariablen nicht

- Graphische „Herleitung"

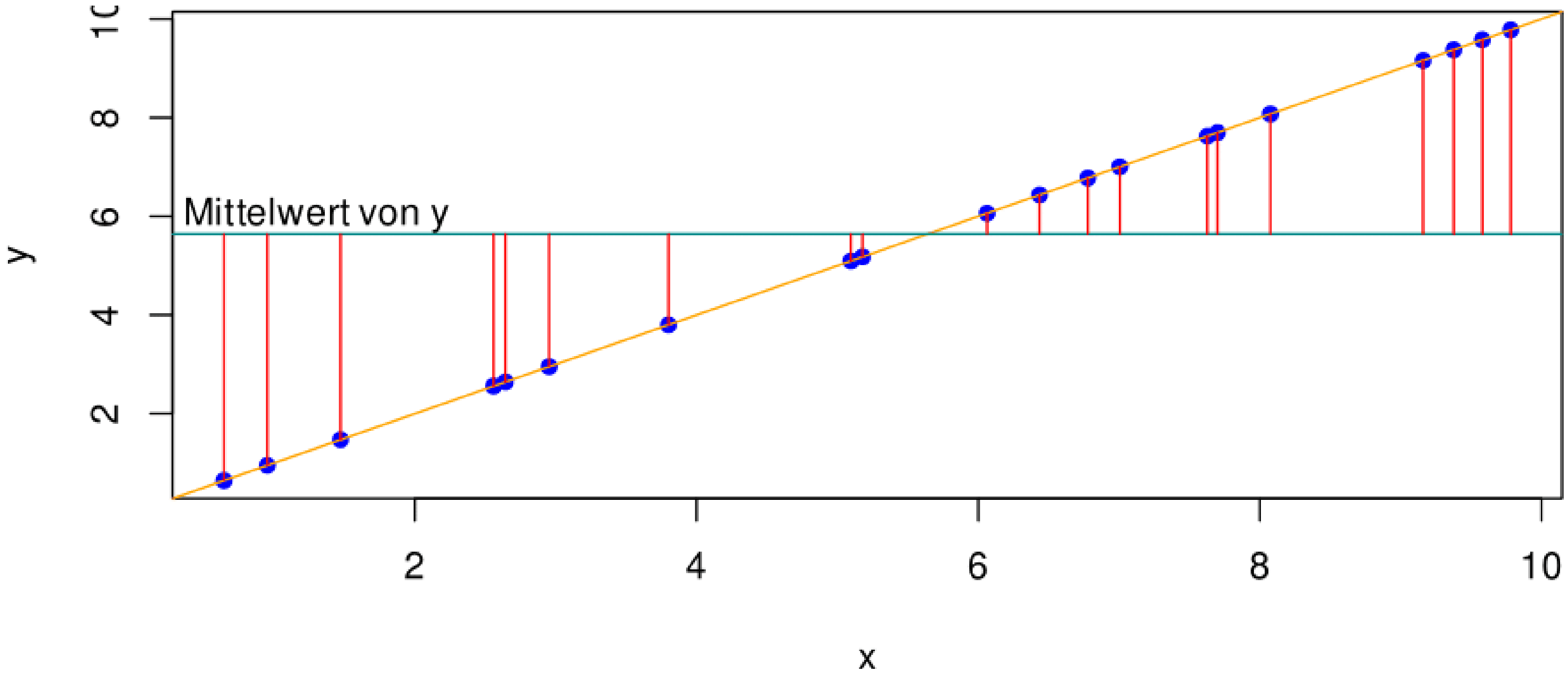
Punkte folgen linearem Modell

- Abbildung:

```r
x <- runif(min = 0, max = 10, n = 20)
y <- x
plot(x, y, col = "blue", pch = 16)
abline(lm(y ~ x), col = "orange")
```



- Abbildung Varianz:



- Varianz: „Mittelwert" der quadrierten Unterschiede der y-Werte der Datenpunkte zu $\overline{y}$

- Varianz:

```
var(y)
## [1] 8.998626
```

- Output:
  - Korrelation:

```r
cor(x, y)
## [1] 1
```

  - R^2:

```r
summary(lm(y ~ x))$r.squared
## [1] 1
```

  - Varianz:

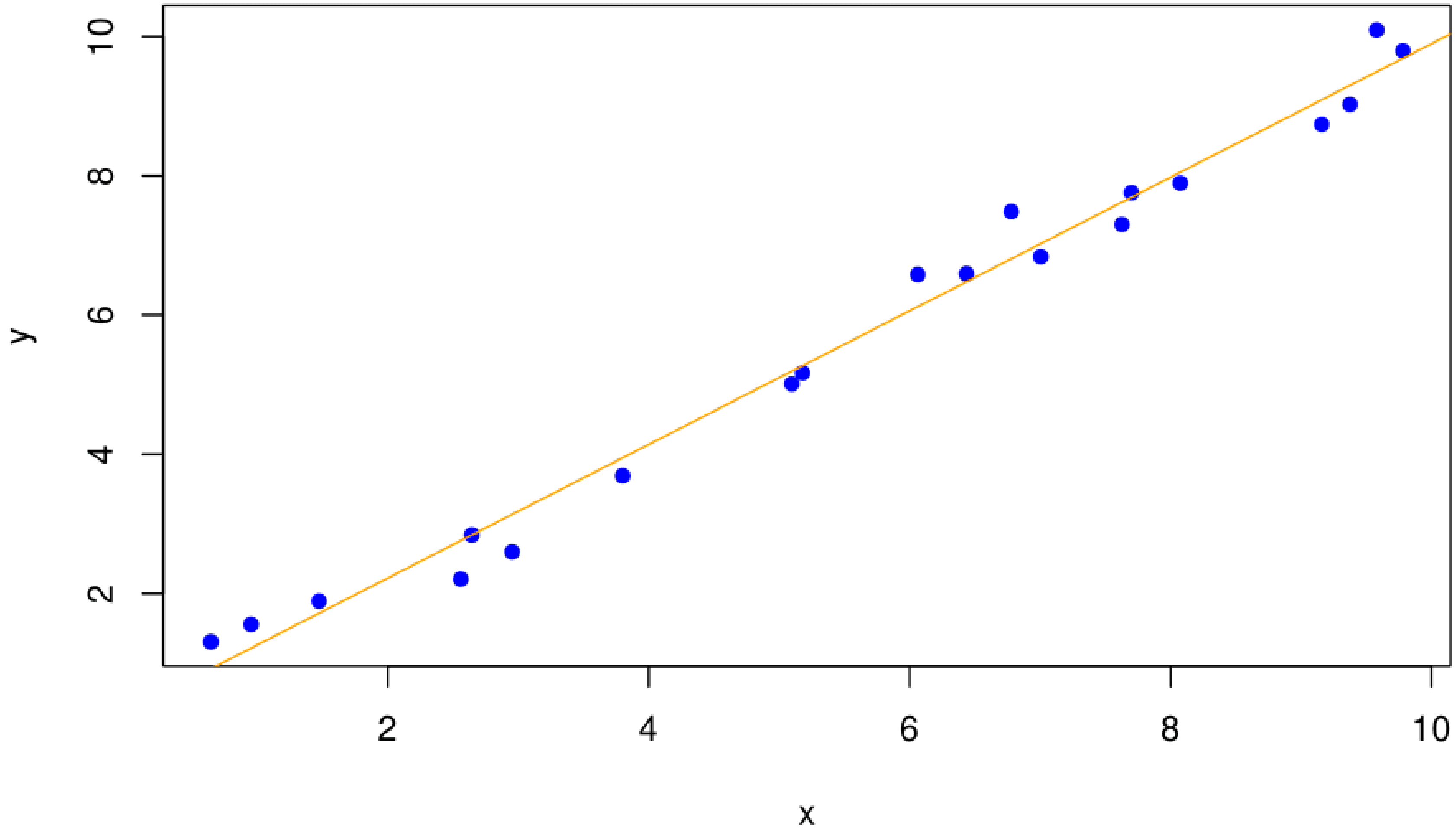
```r
var(y)
## [1] 8.998626
```

  - 100% der Varianz von 9 wird durch das Modell erklärt

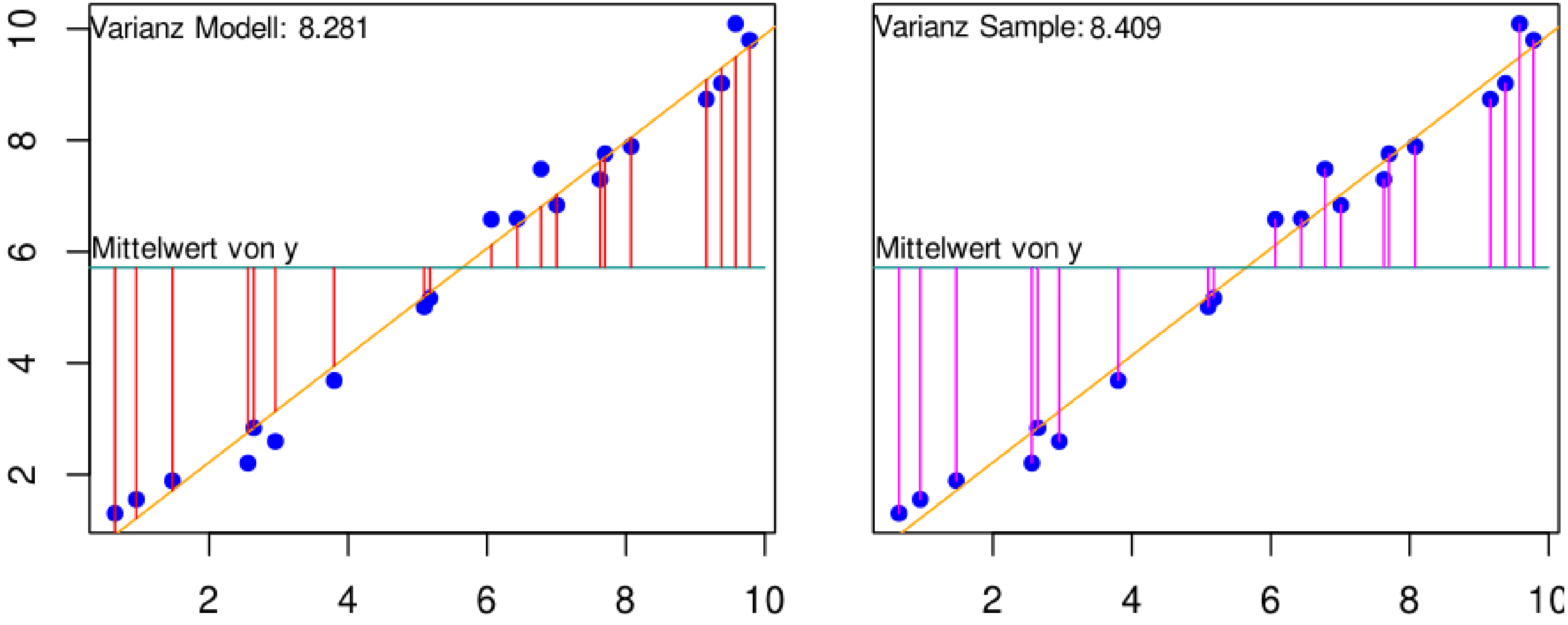
Punkte folgen mehr oder weniger linearem Modell

- Abbildung:

```
y <- x + rnorm(n = 20, mean = 0, sd = 0.3)
```



- Abbildung:



- „Durchschnitt" der Quadrate der roten Linien: Varianz des Modelles
- „Durchschnitt" der Quadrate der pinken Linien: Varianz der Daten

- Definition R^2:

$$R^2 = \frac{\text{Varianz Modell}}{\text{Varianz Sample}}$$

- Beispiel:

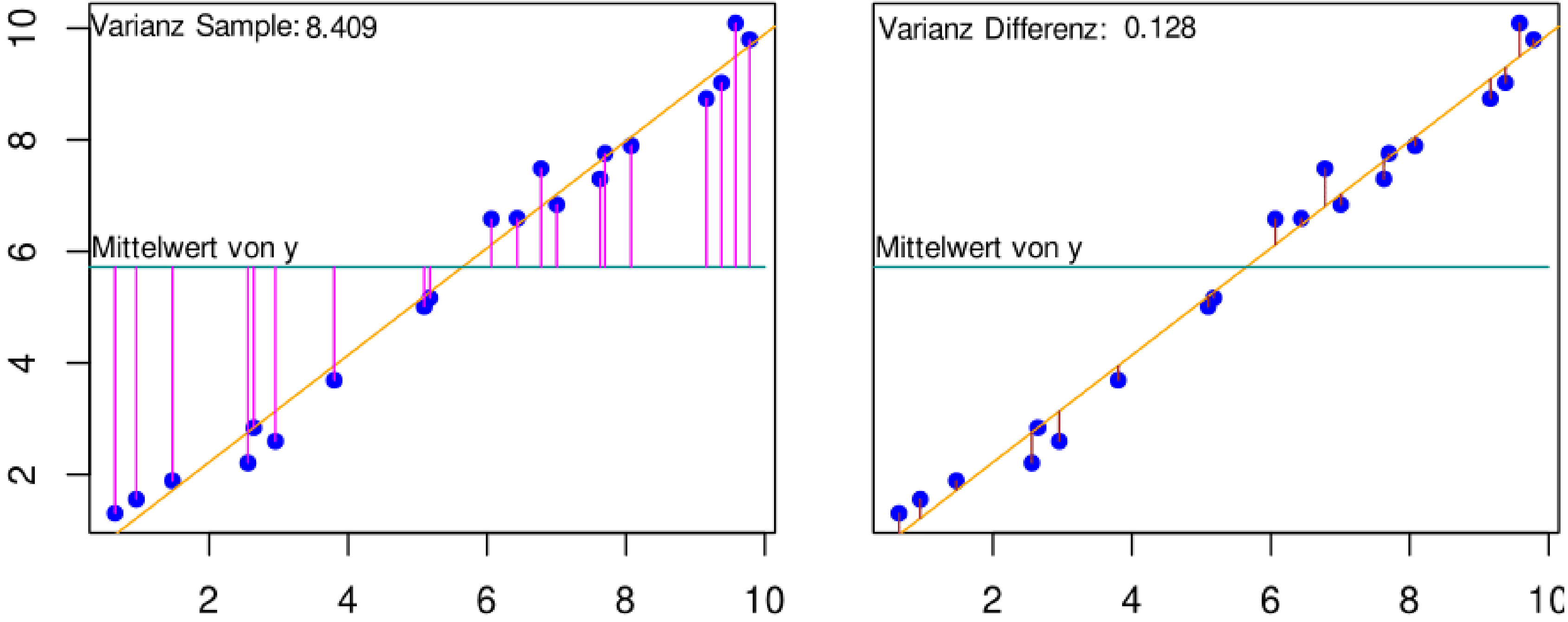
$$R^2 = \frac{8.281}{8.409} = 0.985$$

- Code:

```
summary(lm(y ~ x))$r.squared
## [1] 0.9848312
```

Andere Betrachtungsweise für Interpretation von R^2

- Abbildung:



- „Durchschnitt" der Quadrate der pinken Linien: Varianz der Daten
- „Durchschnitt" der Quadrate der brauen Linien (rechts): Varianz Unterschied zum Modell

- Alternative Definition von R^2:

$$R^2 = 1 - \frac{\text{Varianz Differenz}}{\text{Varianz Sample}}$$

- Bedeutung:
  - Varianz Differenz:
    Varianz des Samples, dass *nicht* durch das Modell erklärt wird
  - $\frac{\text{Varianz Differenz}}{\text{Varianz Sample}}$:
    Anteil der Varianz vom Sample, der *nicht* vom Modell erklärt wird
  - $1 - \frac{\text{Varianz Differenz}}{\text{Varianz Sample}}$:
    Anteil der Varianz vom Sample, der vom Modell erklärt wird
  - R^2: Anteil der Varianz vom Sample, der vom Modell erklärt wird

- Output:
  - R^2:

```
summary(lm(y ~ x))$r.squared
## [1] 0.9848312
```

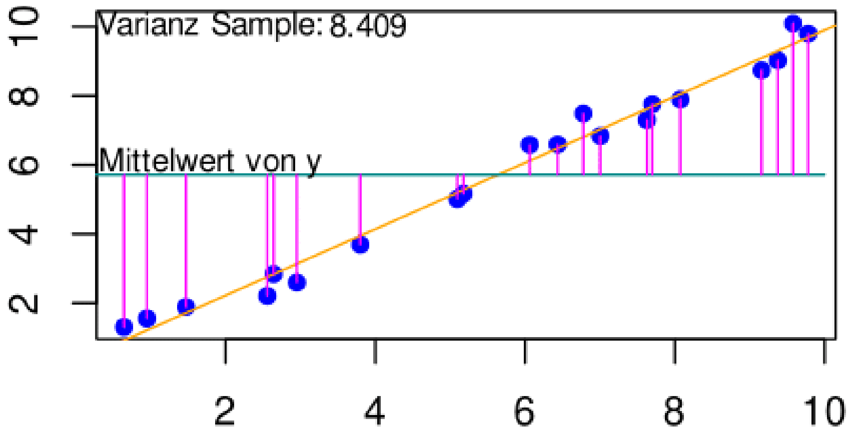
  - Varianz:

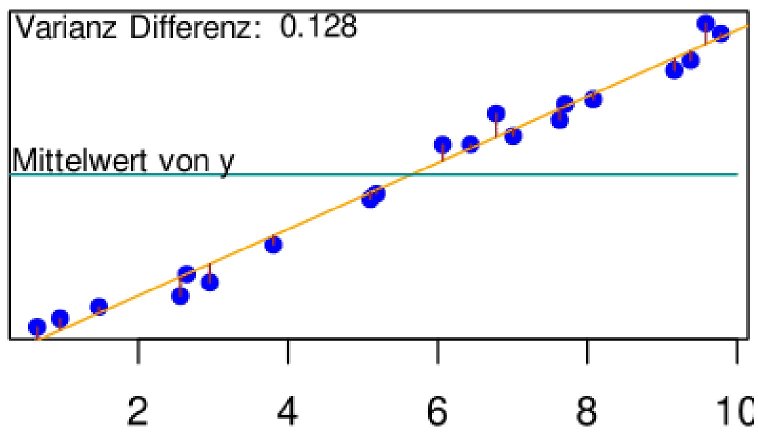
```
var(y)
## [1] 8.40886
```

  - 98.48% der Varianz von 8.41 wird durch das Modell erklärt

Interpretation: Beispiel

- Nochmals Abbildung:



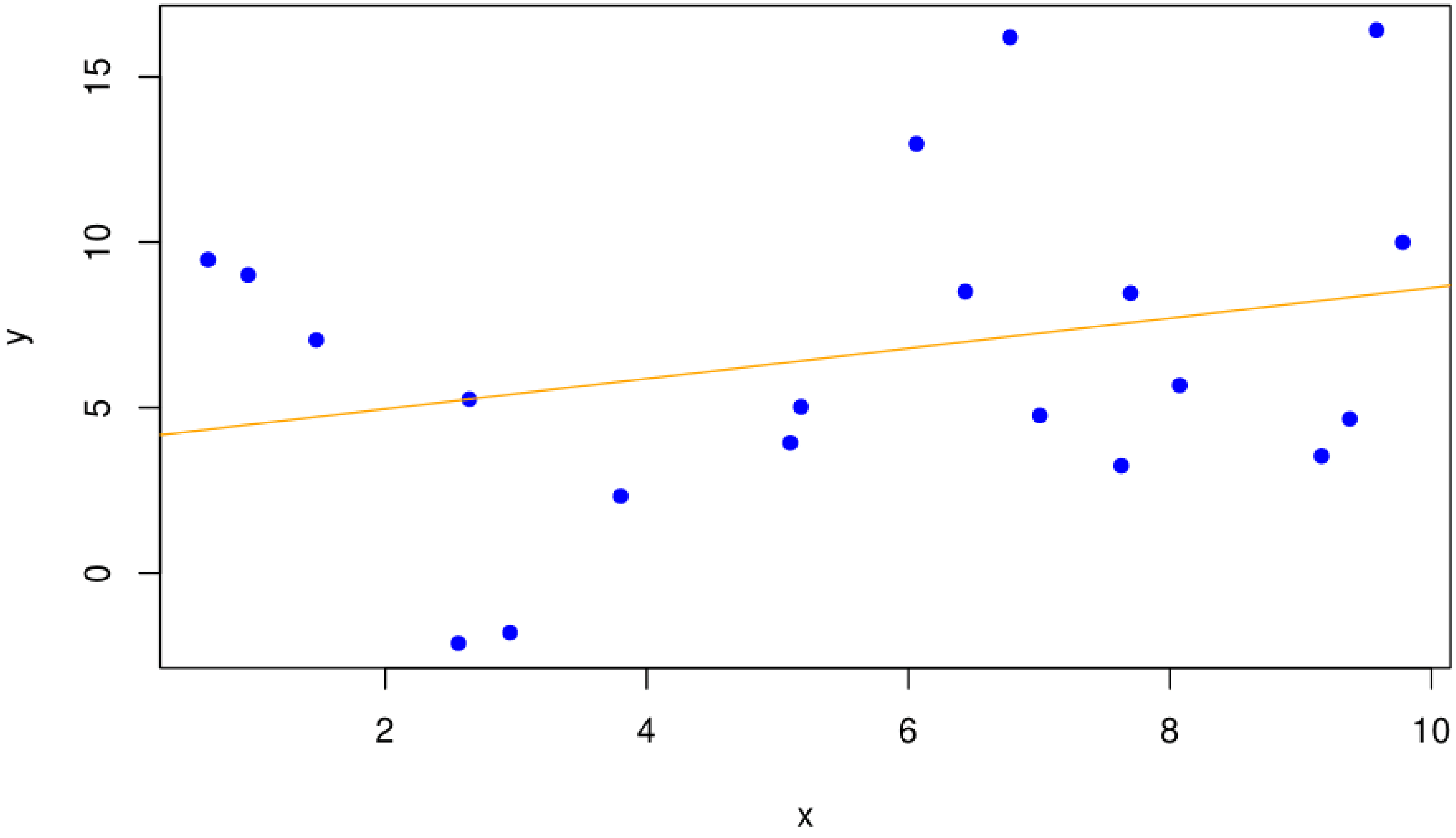


- Bedeutung:
  - Varianz Differenz: Hier nahe bei 0
  - $\frac{\text{Varianz Differenz}}{\text{Varianz Sample}}$: Nahe bei 0
  - $1 - \frac{\text{Varianz Differenz}}{\text{Varianz Sample}}$: Nahe bei 1
  - R^2: Passen die Punkte gut zum Modell, dann ist R^2 angenähert 1

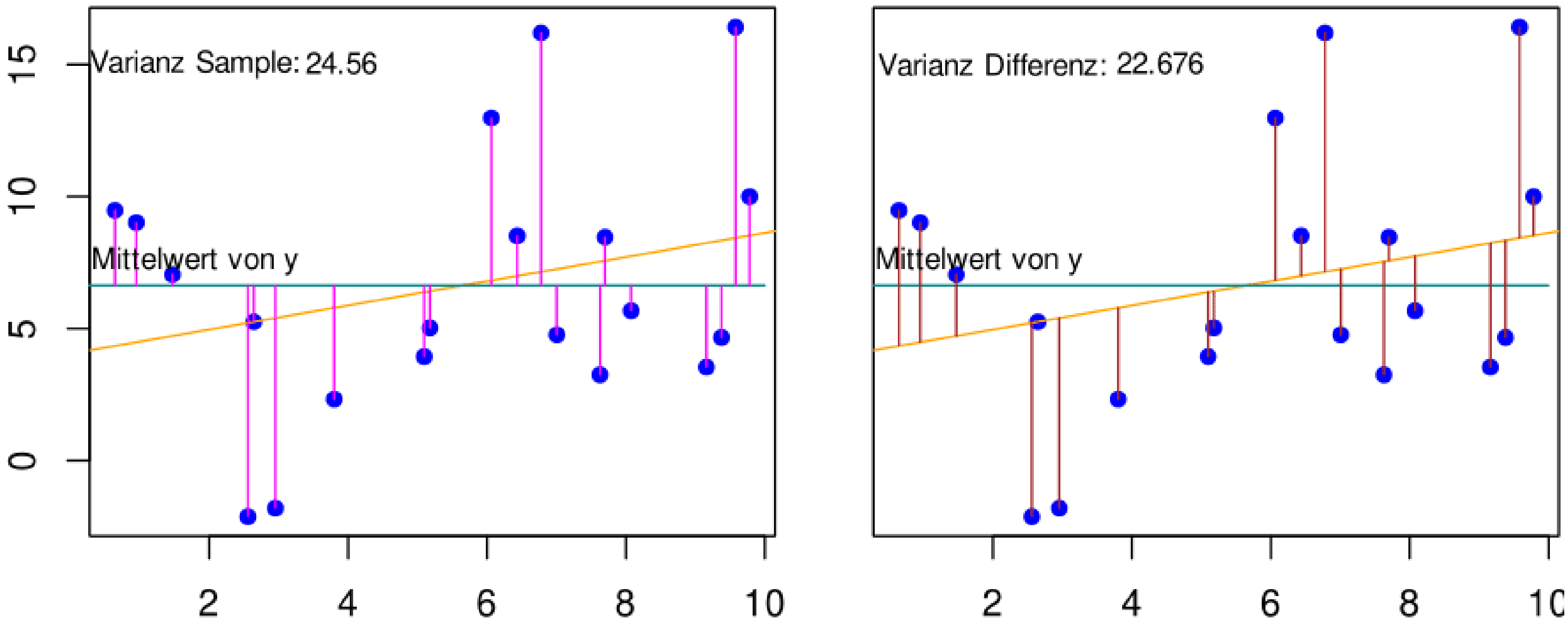
Punkte folgen dem linearen Modell nicht

- Abbildung:

```
y <- x + rnorm(n = 20, mean = 0, sd = 4)
```



- Varianzen:



- Berechnung R^2:

$$R^2 = 1 - \frac{22.676}{24.56} = 0.07671$$

- Output:

```
summary(lm(y ~ x))$r.squared
## [1] 0.07670148
```

- Bedeutung:
  - Varianz Differenz: Ähnlich Varianz Sample
  - $\frac{\text{Varianz Differenz}}{\text{Varianz Sample}}$: Nahe bei 1
  - $1 - \frac{\text{Varianz Differenz}}{\text{Varianz Sample}}$: Nahe bei 0
  - R^2: Passen die Punkte nicht gut zum Modell, dann ist R^2 angenähert 0
- Varianz Sample:

```
var(y)
## [1] 24.55976
```

- Interpretation: Nur 7.67% der Varianz von 24.56 wird durch das Modell erklärt
- Punkte passen nicht gut zum Modell

- Output:
  - Korrelation:

```
cor(x, y)
## [1] 0.2769503
```

  - R^2:

```
summary(lm(y ~ x))$r.squared
## [1] 0.07670148
```

  - Varianz:

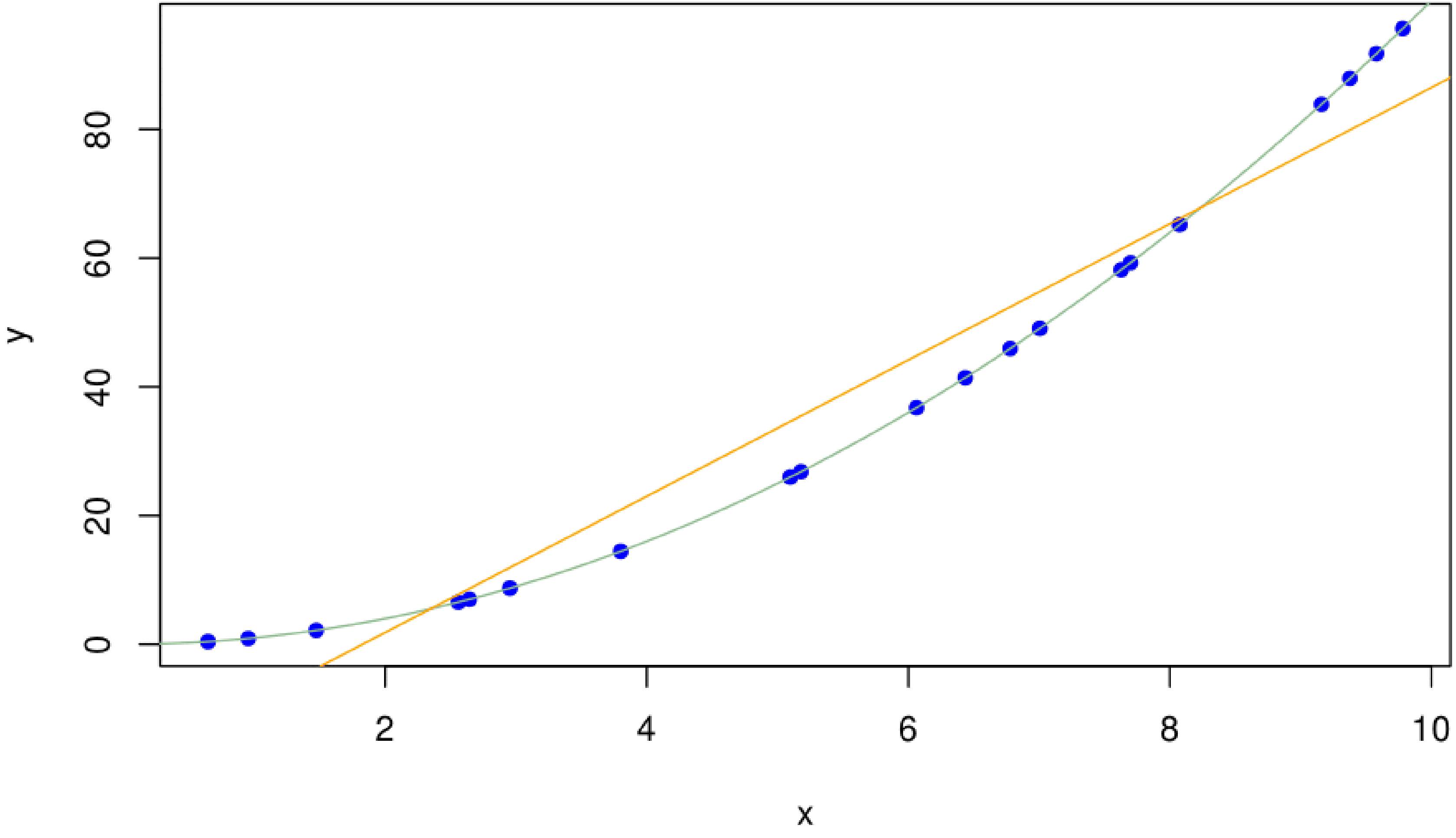
```
var(y)
## [1] 24.55976
```

  - 7.67% der Varianz von 24.56 wird durch das Modell erklärt

Punkte folgen quadratischem Modell

- Abbildung:

```
y <- x^2
```



- Output:
  - Korrelation:

```
cor(x, y)
## [1] 0.9735588
```

  - R^2:

```
summary(lm(y ~ I(x^2)))$r.squared
## [1] 1
```

  - Varianz:

```
var(y)
## [1] 1063.22
```

  - 100% der Varianz von 1063.22 wird durch das Modell erklärt

- Output:
  - Korrelation:

```r
cor(x, y)
## [1] 1
```

  - R^2:

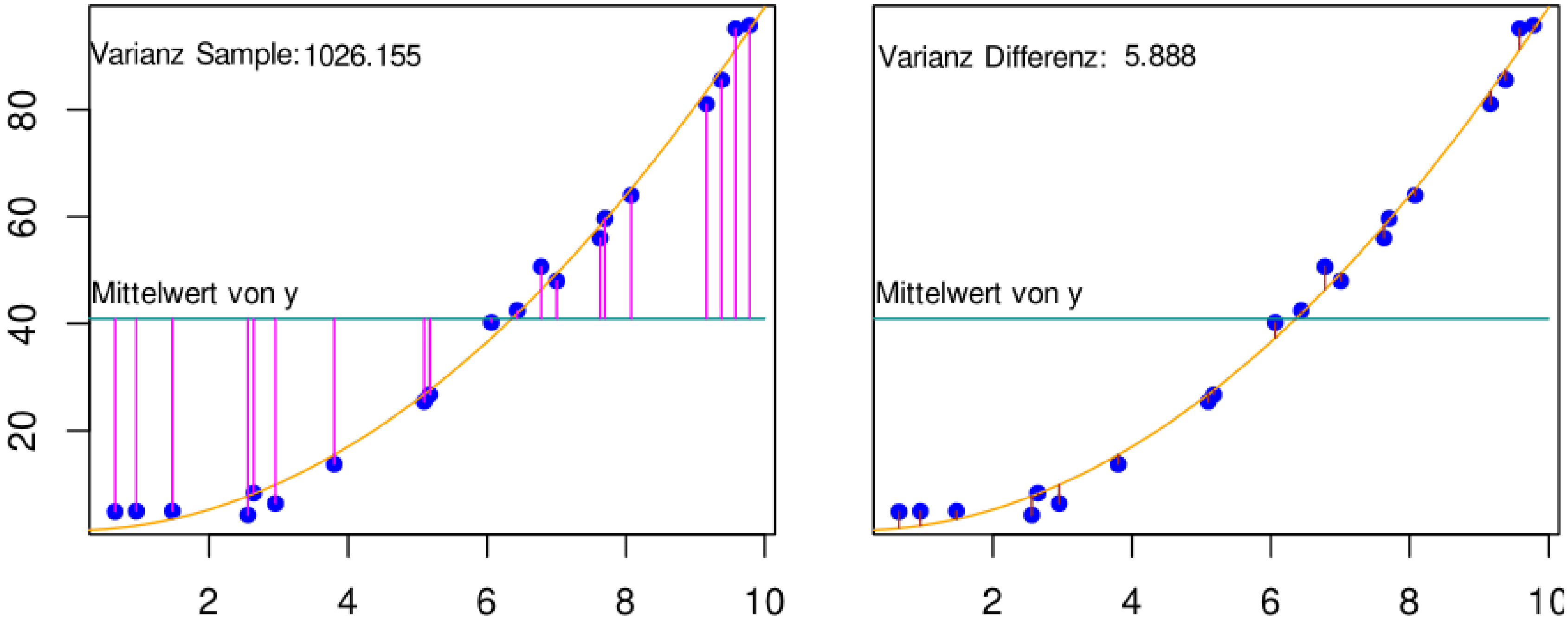
```r
summary(lm(y ~ x))$r.squared
## [1] 1
```

  - Varianz:

```r
var(y)
## [1] 8.998626
```

  - 100% der Varianz von 9 wird durch das Modell erklärt

- Varianzen:



- Berechnung R^2:

$$R^2 = 1 - \frac{5.888}{1026.155} = 0.994262$$

- Output:
  - R^2:

```r
summary(lm(y ~ I(x^2)))$r.squared
## [1] 0.9942619
```

  - Varianz:

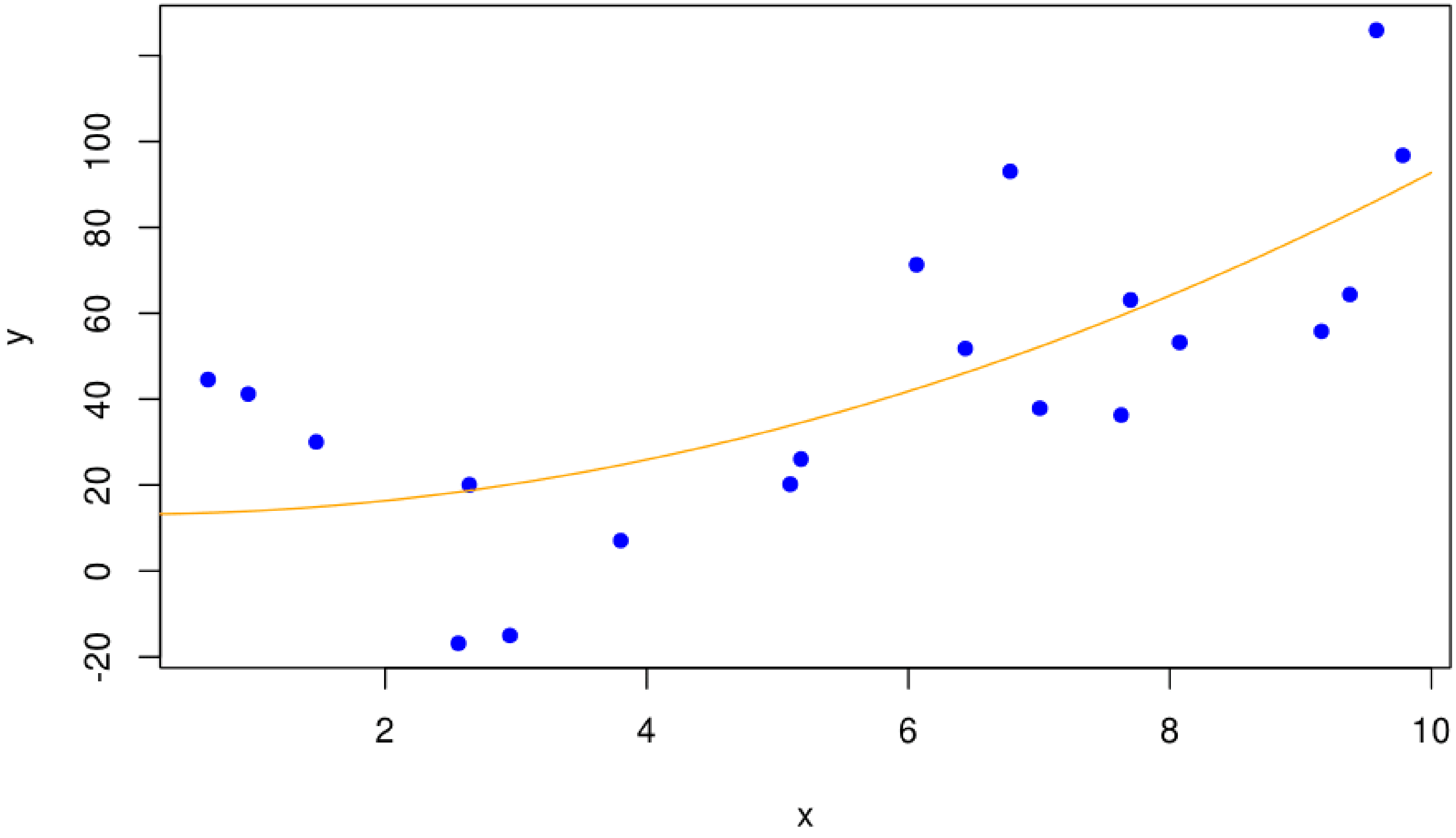
```r
var(y)
## [1] 1026.155
```

  - 99.43% der Varianz von 1026.15 wird durch das Modell erklärt
  - R^2-Wert nahe bei 1 und somit passen die Daten gut zum Modell

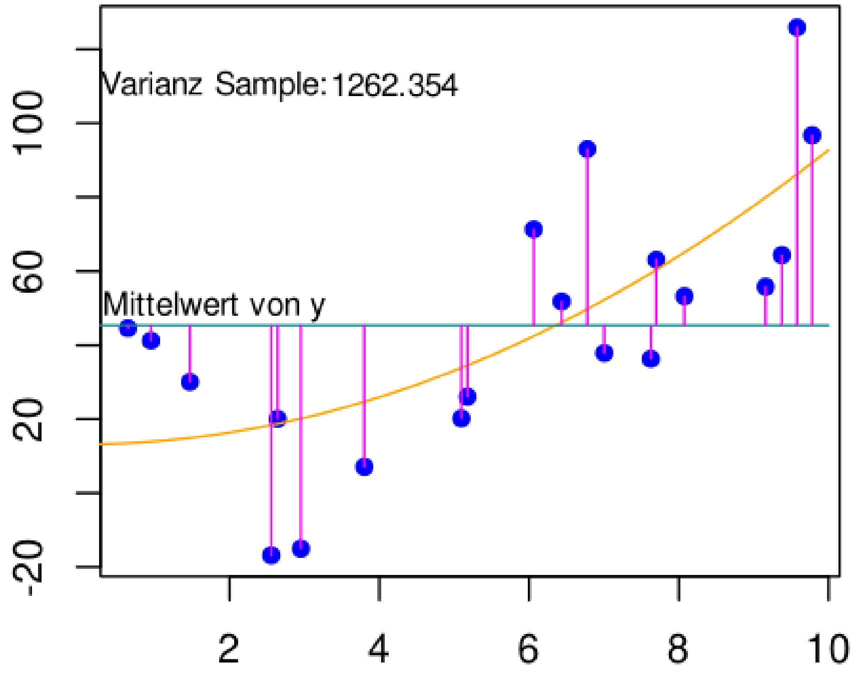
Quadratisches Modell

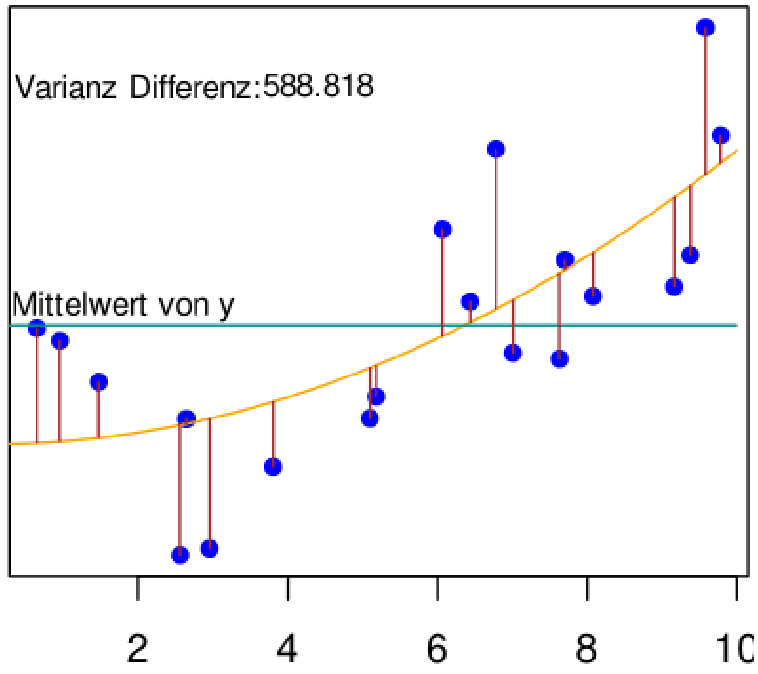
- Punkte folgen dem Modell nicht gut:

```
y <- x^2 + rnorm(n = 20, mean = 0, sd = 20)
```



- Varianzen:





- Berechnung R^2:

$$R^2 = 1 - \frac{588.818}{1262.354} = 0.533556$$

- Output:
  - R^2:

```
summary(lm(y ~ I(x^2)))$r.squared
## [1] 0.5335559
```

  - Varianz:

```
var(y)
## [1] 1262.354
```

  - 53.36% der Varianz von 1262.35 wird durch das Modell erklärt
  - R^2-Wert nicht so nahe bei 1 und somit passen die Daten nicht so gut zum Modell

Beispiel

- Im Beispiel der TV-Werbung war der R^2-Wert 0.61

```
summary(lm(Verkauf ~ TV))$r.squared

## [1] 0.6118751
```

- Somit werden knapp zwei Drittel der Variabilität in `Verkauf` durch `TV` mit linearer Regression erklärt.

Bemerkungen:

- Empirische Korrelation gibt nur die Güte einer *linearen* Regression an
- R^2 kann für jede Regression angewendet werden