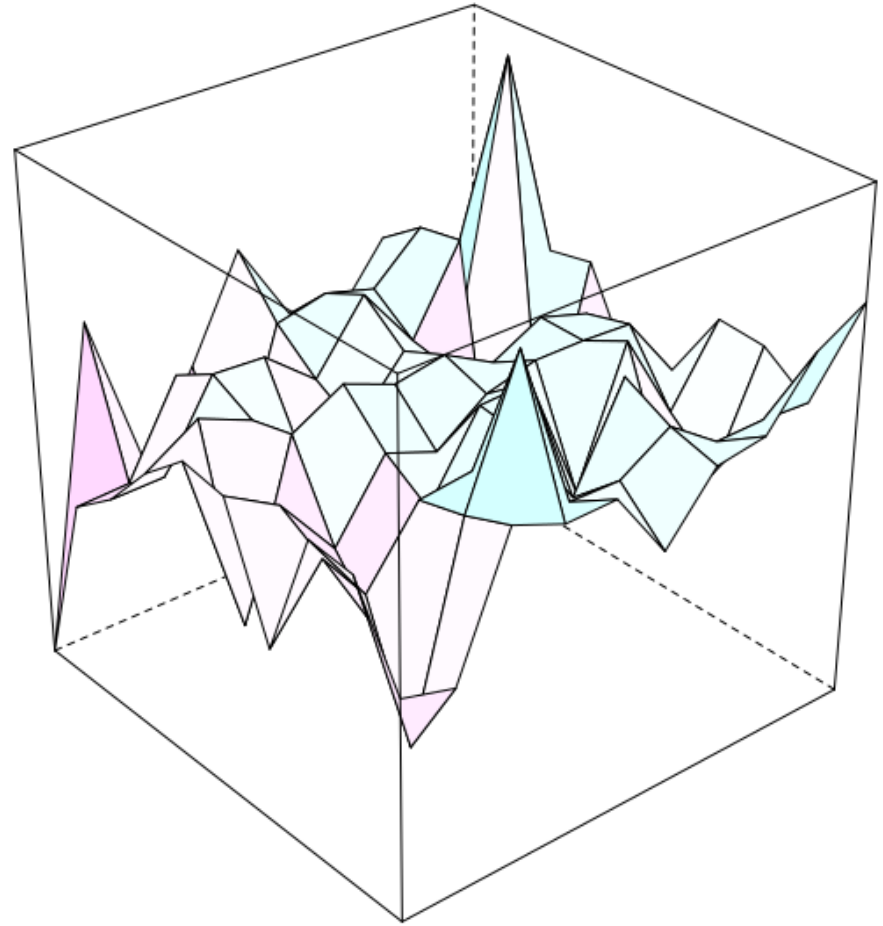


# Datenanalyse mit R

Prof. Dr. Dennis Klinkhammer



# (I) GRUNDLAGEN

## Wissenschaftliche Gütekriterien



# Wissenschaftliche Gütekriterien

- Grundlage für seriöse Forschung
- Beziehen sich auf mögliche Schwachstellen
  - des Datensatzes
  - der Erhebung des Datensatzes
  - der Forscherinnen und Forscher selbst

# Wissenschaftliche Gütekriterien

- Ermöglichen Berücksichtigung von Schwachstellen in der Ergebnisinterpretation
- Unterscheidung in drei Hauptarten
  - Objektivität
  - Reliabilität
  - Validität

# Wissenschaftliche Gütekriterien

- Objektivität bedeutet Unabhängigkeit
- Der Forschungsprozess wird nicht für eigene oder „Wunschergebnisse“ Dritter beeinflusst
- Insbesondere die Finanzierung von Forscherinnen und Forschern durch Dritte bietet Anlass zur Frage nach deren Objektivität

# Wissenschaftliche Gütekriterien

- Reliabilität bedeutet Reproduzierbarkeit unter Einsatz geeigneter Erhebungsinstrumente
- Zentrale Aspekte
  - Stabilität und Genauigkeit einer Messung
  - Berücksichtigung und Ausweisung der Rahmenbedingungen einer Messung

# Wissenschaftliche Gütekriterien

- Validität bezieht sich auf die Präzision des Erhebungsinstruments
- Drei Unterarten werden unterschieden
  - Konstruktvalidität (Womit wird gemessen?)
  - Kriteriumsvalidität (Was wird gemessen?)
  - prognostische Validität (Sind Schlüsse möglich?)

# Wissenschaftliche Gütekriterien

- Validität bezieht sich auch auf die Rahmenbedingungen einer Erhebung
- Ergebnisinterpretationen erfordern eine Ausweisung der zugrundeliegenden Validität
  - Interne Validität (kontrollierte Bedingungen)
  - Externe Validität (natürliche Bedingungen)



# Wissenschaftliche Gütekriterien

- Validität setzt Objektivität und Reliabilität voraus
- Forschung ohne entsprechende Ausweisung der wissenschaftlichen Gütekriterien ist keine seriöse Forschung

# Obligatorischer Exkurs

- Simpson-Paradoxon
  - Die Bewertung verschiedener Gruppen fällt unterschiedlich aus, je nachdem ob man die Ergebnisse der Gruppen kombiniert oder nicht
  - Zusatzaufgabe: Recherche eines Beispiels

Klausurrelevant (!)

# (I) GRUNDLAGEN

## R und RStudio



# R und RStudio

- R ist eine Programmiersprache für statistische Berechnungen und Grafiken
- RStudio ist eine grafische Benutzeroberfläche für die Programmiersprache R
- Die in der Vorlesung genannten Beispiele und Übungsaufgaben erfordern R und RStudio

# R und RStudio

- R ist eine objektbasierte Programmiersprache
- Alles was existiert ist ein Objekt
  - Datensätze
  - Variablen
  - Merkmalsausprägungen

# R und RStudio

- Alles was passiert ist eine Funktion
  - Funktionen bearbeiten Objekte
  - Funktionen führen zu neuen Objekten
  - Funktionen berücksichtigen Argumente
- Die Syntax bildet Objekte, Funktionen und Argumente ab und ermöglicht Dritten die Reproduktion

# R und RStudio

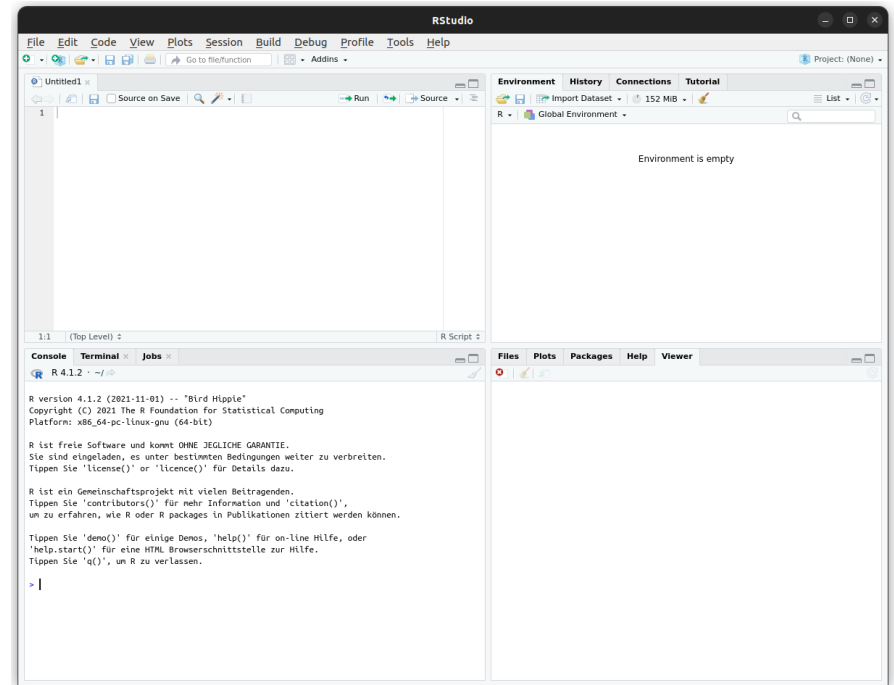
- Erläuterungen werden über einen # eingegeben und dadurch von R nicht interpretiert
- Der Zuweisungspfeil legt neue Objekte an:

*# Erläuterung mit Syntaxbeispiel*

*Kuchen <- backen(Milch, Mehl, Eier, Zucker)*

# R und RStudio

- RStudio: 4 Fenster
  - Syntax (links oben)
  - Konsole (links unten)
  - Historie (rechts oben)
  - Grafiken (rechts unten)





# R und RStudio

- Die Funktion plot(...) kann auf den Datensatz swiss direkt angewendet oder als neues Objekt zwischengespeichert werden:

```
# Erste Beispiele
```

```
plot(swiss)
```

```
neues_objekt <- plot(swiss)
```

# R und RStudio

- Packages erweitern den Funktionsumfang
- Eine Korrelation kann ohne erweiterten Funktionsumfang über die Funktion cor(...) aufgerufen werden:

```
# Ohne Package CORRPLOT  
cor(swiss)
```

# R und RStudio

- Die Funktionen install.packages(...) und library(...) installieren Packages und aktivieren diese in RStudio:

```
# Package CORRPLOT installieren und aktivieren  
install.packages(corrplot)  
library("corrplot")
```

# R und RStudio

- Das neu installierte und aktivierte Package bietet zusätzlich die Funktion corrplot(...) und Abwandlungen derselben:

```
# Mit Package CORRPLOT  
noch_ein_neues_objekt <- cor(swiss)  
corrplot.mixed(noch_ein_neues_objekt)
```

# R und RStudio

- Für viele Objekte und Funktionen stehen über die Funktion help(...) weiterführende Informationen bereit:

```
# Hilfe zum Package CORRPLOT  
help(corrplot)
```

# (I) GRUNDLAGEN

## TREES Datensatz



# TREES Datensatz

- Der TREES Datensatz ermöglicht einen ersten Einblick in die Datenanalyse mit R
- Ziele einer Datenanalyse
  - Beschreiben
  - Erklären
  - Vorhersagen

# TREES Datensatz

- Die verschiedenen Ziele der Datenanalyse werden mit unterschiedlichen Teilbereichen der Statistik umgesetzt
  - Univariate Statistik
  - Bivariate Statistik
  - Multivariate Statistik



# TREES Datensatz

- Ziel: Ein allgemeines Modell zur Vorhersage des Volumens von Bäumen aufstellen
- Variablen des TREES Datensatzes
  - $(X_1)$  Girth
  - $(x_2)$  Height
  - $(Y)$  Volume

# TREES Datensatz

- Die Funktionen summary(...) und boxplot(...) sind die gängigsten Funktionen der univariaten Statistik und beschreiben jeweils eine Variable:

```
# Univariate Statistik  
summary(trees)  
boxplot(trees)
```

# TREES Datensatz

- Die Korrelation mit der Funktion cor(...) gehört zum Teilbereich der bivariaten Statistik
- Hier werden die Zusammenhänge zwischen zwei Variablen erklärt:

```
# Bivariate Statistik  
cor(trees)
```

# TREES Datensatz

- Die Zusammenhänge zwischen zwei Variablen können zusätzlich über die Funktionen plot(...) und abline(...) visualisiert werden:

```
# Bivariate Statistik
```

```
plot(trees$Volume~trees$Girth)
```

```
abline(lm(trees$Volume~trees$Girth))
```

# TREES Datensatz

- In der multivariaten Statistik können mehrere unabhängige Variablen zur Vorhersage einer abhängigen Variable herangezogen werden
- Dabei kann zusätzlich die Stärke des Einflusses der unabhängigen Variablen auf die abhängige Variable analysiert werden

# TREES Datensatz

- Der lineare Zusammenhang ermöglicht die Funktion lm(...) in der multivariaten Statistik:

```
# Multivariate Statistik
```

```
regression_model <- lm(Volume~., data=trees)
```

```
regression_model
```

```
summary(regression_model)
```

# (I) GRUNDLAGEN

## 1. Übungsaufgabe



# 1. Übungsaufgabe

- Der IRIS Datensatz beinhaltet Variablen zu den Schwertlilienarten setosa, versicolor und virginica
- Ziel: Eine manuelle Identifikation der Schwertlilienarten über die unabhängigen Variablen und die Funktion subset(...)

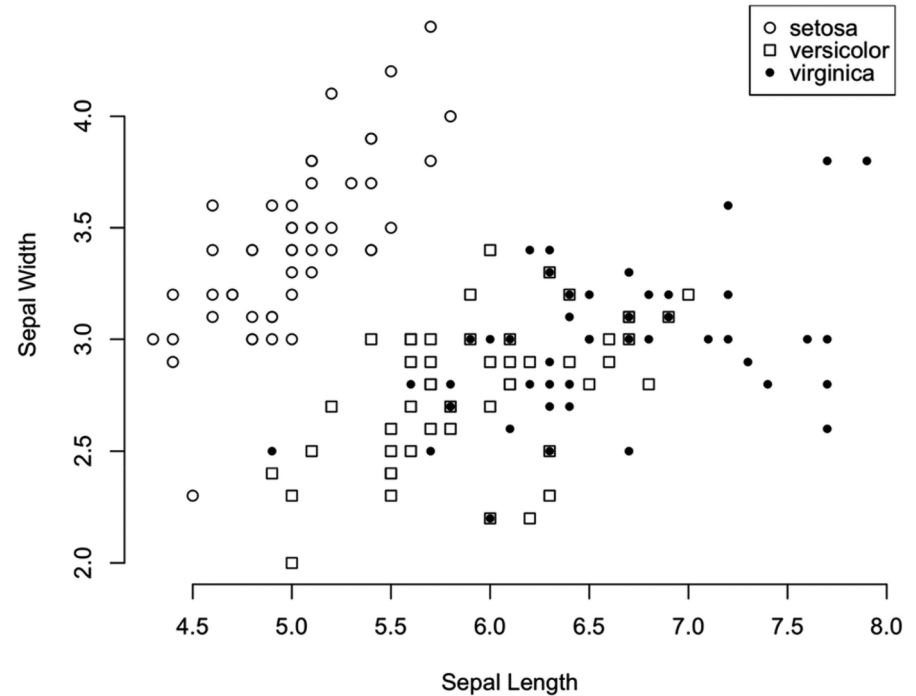


# 1. Übungsaufgabe

- Variablen im IRIS Datensatz
  - $(x_1)$  Sepal.Length
  - $(x_2)$  Sepal.Width
  - $(x_3)$  Petal.Length
  - $(x_4)$  Petal.Width
  - $(Y)$  Species

# 1. Übungsaufgabe

- Herausforderung:  
Schwertlilienarten  
können in Länge und  
Breite ihrer Blätter  
übereinstimmen



# 1. Übungsaufgabe

- Die Schwertlilienart *setosa* kann bspw. wie folgt identifiziert werden:

```
identification <- subset(iris, Petal.Length <= "2" &  
Petal.Width <= "1", select=c(Species))  
summary(identification)
```

# 1. Übungsaufgabe

- Alle erforderlichen Funktionen, Objekte und Argumente sind in der Übungsaufgabe hervorgehoben und können entsprechend in die eigene Syntax überführt werden
- Entsprechend sind noch versicolor und virginica zu identifizieren

# (I) GRUNDLAGEN

## Analysemodelle



# Analysemodelle

- Analysemodelle visualisieren die theoretisch fundierten Zusammenhänge zwischen allen unabhängigen und abhängigen Variablen
- Dadurch werden Haupt- und Nebenhypothesen abgebildet und mögliche Interdependenzen offengelegt

# Analysemodelle

- Mit dem Package DiagrammeR können Analysemodelle in R visualisiert werden
- Dazu muss DiagrammeR zunächst über install.packages(...) und library(...) installiert und aktiviert werden
- Diese Installation erfordert Dependencies

# Analysemodelle

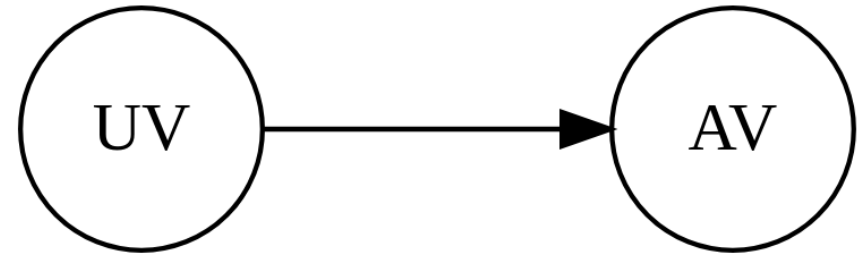
- Funktionen aus Packages lassen sich auch über `::` aufrufen
- Es können label vergeben und mit `->` verbunden werden

```
DiagrammeR::grViz("  
  digraph {graph [layout = circo]  
    node [shape = circle]  
    A [label = 'UV']  
    B [label = 'AV']  
    edge []  
    A -> B} ")
```



# Analysemodelle

- Hypothese: Je mehr (weniger) UV, desto mehr (weniger) AV
- Dies ist ein Beispiel für eine spezifische Hypothese



# Analysemodelle

- Rückblick: Der TREES Datensatz beinhaltet die Variablen Girth, Height und Volume
- In der vorherigen Analyse konnte festgestellt werden, dass alle drei Variablen voneinander abhängen

# Analysemodelle

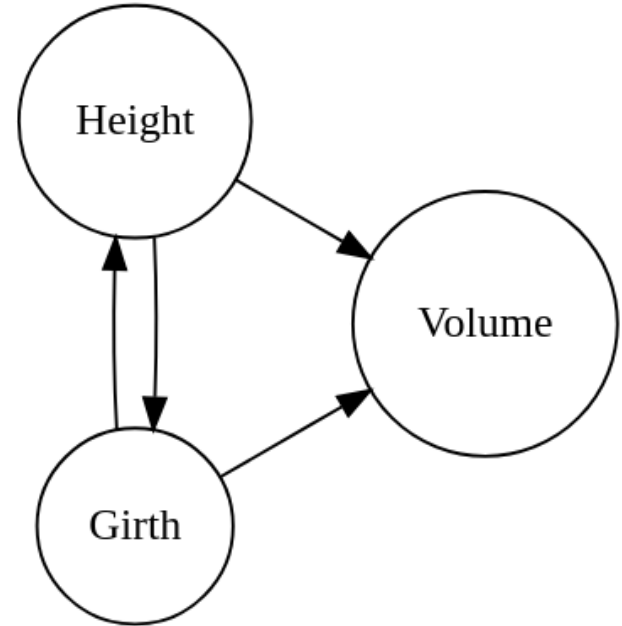
- Entsprechende Hypothesen könnten lauten
  - Je mehr Girth [Height], desto mehr Height [Girth]
  - Je mehr Height, desto mehr Volume
  - Je mehr Girth, desto mehr Volume
- Für Girth [Height] und Height [Girth] liegt eine unspezifische Hypothese vor

# Analysemodelle

- Demnach beeinflussen sich die unabhängigen Variablen gegenseitig; Dies nennt man Interdependenzen
- Über die multivariate Statistik konnte ermittelt werden, dass Girth einen stärkeren Einfluss auf Volume nimmt

# Analysemodelle

```
DiagrammeR::grViz("  
digraph {graph [layout = circo]  
node [shape = circle]  
A [label = 'Girth']  
B [label = 'Height']  
C [label = 'Volume']  
edge []  
A -> C  
A -> B  
B -> A  
B -> C} ")
```



# Analysemodelle

- Es empfiehlt sich, zu jedem neuen Datensatz zunächst ein Analysemodell zu skizzieren
- Analysemodelle vereinfachen die Interpretation der Befunde aus der bivariaten und multivariaten Statistik

# (I) GRUNDLAGEN

## SWISS Datensatz



# SWISS Datensatz

- Während der TREES Datensatz einen Einblick in die Teilbereiche der Statistik ermöglicht, bietet der SWISS Datensatz darüber hinaus einen Einblick in die Moderationseffekte der unabhängigen Variablen



# SWISS Datensatz

- Die Funktionen head(...) und help(...) zeigen erste Details zum SWISS Datensatz:

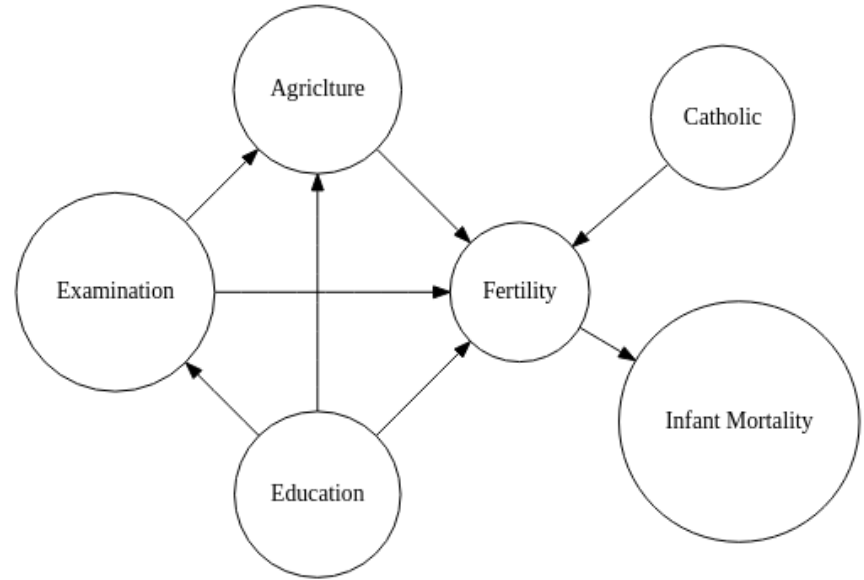
```
# Datensatz einsehen  
head(swiss)  
help(swiss)
```

# SWISS Datensatz

- Unabhängige Variablen
  - $(X_1)$  Agriculture
  - $(X_2)$  Examination
  - $(X_3)$  Education
  - $(X_4)$  Catholic
  - $(X_5)$  Infant.Mortality
- Abhängige Variable
  - $(Y)$  Fertility
- Die Variablen ergeben ein komplexes Analysemodell

# SWISS Datensatz

- Variablenmoderation
  - Agriculture
  - Examination
  - Education
- Auswirkungen auf die multivariate Statistik



# SWISS Datensatz

- Für die univariate Statistik stehen erneut die Funktionen summary(...) und boxplot(...) zur Verfügung:

```
# Univariate Statistik  
summary(swiss)  
boxplot(swiss)
```

# SWISS Datensatz

- Moderationseffekte lassen sich über einen Vergleich zwischen bivariater und multivariater Statistik erkennen

```
# Bivariate Statistik  
cor(swiss)
```

```
# Multivariate Statistik  
lm(Fertility~., data=swiss)
```

# SWISS Datensatz

- Mögliche Folgen der Moderationseffekte
  - Veränderung bei den Effektstärken
  - Veränderung bei den Vorzeichen
- Die korrekte Interpretation von Moderationseffekten erfordert eine theoretische Fundierung

# (I) GRUNDLAGEN

## 2. Übungsaufgabe



## 2. Übungsaufgabe

- Für die 2. Übungsaufgabe steht der MTCARS Datensatz zur Verfügung
- Dieser beinhaltet Variablen zu den technischen Eigenschaften von 32 verschiedenen Automobilen aus dem Jahr 1974



## 2. Übungsaufgabe

- Unabhängige Variablen

- (X<sub>1</sub>) cyl
- (X<sub>2</sub>) disp
- (X<sub>3</sub>) hp
- (X<sub>4</sub>) drat
- (X<sub>5</sub>) wt
- (X<sub>6</sub>) qsec
- (x<sub>7</sub>) vs
- (x<sub>8</sub>) am
- (x<sub>9</sub>) gear
- (x<sub>10</sub>) carb

- Abhängige Variablen

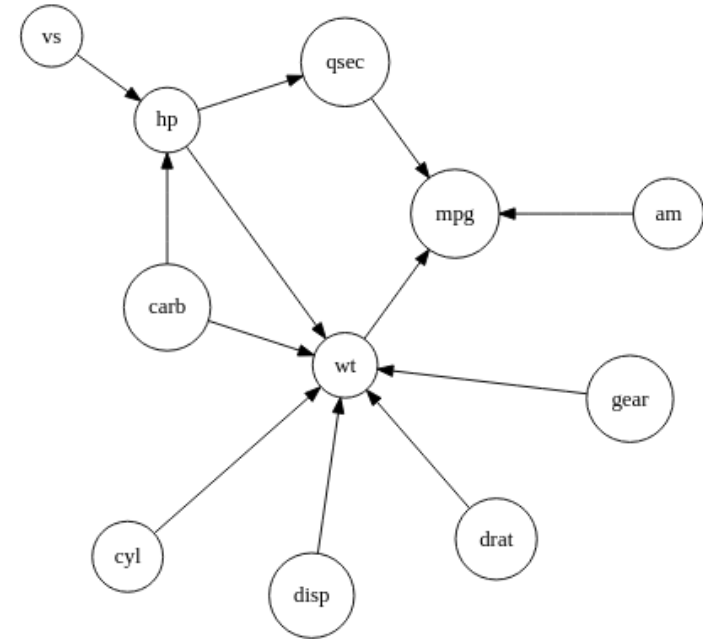
- (Y<sub>1</sub>) mpg
- (X<sub>6</sub>) → (Y<sub>2</sub>) qsec

- Auch im MTCARS Datensatz ergeben die Variablen ein komplexes Analysemodell

## 2. Übungsaufgabe

- Variablenmoderation

- vs
- hp
- carb
- wt
- qsec
- cyl
- disp
- drat
- gear



## 2. Übungsaufgabe

- Zur Analyse von naturwissenschaftlichen Datensätzen kann im Rahmen der multivariaten Statistik auf die Funktion step(...) zurückgegriffen werden:

```
# Multivariate Statistik
```

```
step(lm(data=mtcars, mpg~.), trace=0, steps=11)
```

## 2. Übungsaufgabe

- Alle erforderlichen Funktionen, Objekte und Argumente sind wieder in der Übungsaufgabe hervorgehoben und können entsprechend in die eigene Syntax überführt werden
- Anstatt alle unabhängigen Variablen manuell einzugeben, kann auch ein `_` gesetzt werden

# (I) GRUNDLAGEN

## Datengewinnung



# Datengewinnung

- Häufig stellen Befragungen die Grundlage für zu analysierende Datensätze dar
- Tools zur Erstellung von Onlinebefragungen und zur Berechnung der Stichprobengröße
  - <https://www.soscisurvey.de/>
  - <https://www.surveymonkey.de/mp/sample-size-calculator/>

# Datengewinnung

- Wenn Daten mittels einer Befragung und / oder Onlinebefragung gewonnen werden sollen, so sind insgesamt acht Herausforderungen in der Interpretation dieser Daten zu berücksichtigen

# Datengewinnung

- Reaktivität
  - Wenn Teilnehmerinnen und Teilnehmer den Forschungsgegenstand kennen, dann kann sich daraufhin ihr (Antwort-)verhalten verändern
  - Beispiel: Gesundheitsbezogenes Verhalten



# Datengewinnung

- Soziale Erwünschtheit
  - Eine mögliche Verzerrung des Antwortverhaltens aufgrund der Annahme der Teilnehmerinnen und Teilnehmer über mit der Antwort in Verbindung stehende Normen und / oder Erwartungen
  - Beispiel: Deviantes Verhalten

# Datengewinnung

- Schweigeverzerrung
  - Teilnehmerinnen und Teilnehmer können ein anderes Antwortverhalten aufweisen als nicht-Teilnehmerinnen und nicht-Teilnehmer
  - Beispiel: Produktbewertungen im Internet

# Datengewinnung

- Selektive Aufmerksamkeit
  - Menschliche Wahrnehmung ist ein selektiver Prozess, orientiert an vertrauten Mustern und Strukturen und somit hinsichtlich der zu verarbeitenden Informationsmenge begrenzt
  - Beispiel: Eltern sehen mehr Gefahrenquellen

# Datengewinnung

- Tendenz zur Mitte
  - Bei mehrstufigen Antwortskalen bewirkt die Tendenz zur Mitte ein Antwortverhalten in der Mitte
  - Beispiel: Unreflektierte Befragungsteilnahme

# Datengewinnung

- Tendenz zur Milde / Härte
  - Bei mehrstufigen Antwortskalen erfolgt an Stelle eines objektiven Antwortverhaltens eine subjektive Unter- / Überbewertung eines realen Phänomens
  - Beispiel: Sympathie bei Lehrevaluationen

# Datengewinnung

- Retrospektionseffekt
  - Erlebnisse und Ereignisse können im Rückblick, bspw. am nächsten Tag, positiver oder negativer bewertet werden, als in der Situation selbst
  - Beispiel: Verkehrsunfall

# Datengewinnung

- Rückschaufehler
  - Unzutreffende Erinnerungen, wenn Menschen, nachdem Sie den tatsächlichen Ausgang eines Ereignisses erfahren haben, sich falsch an ihre frühere Vorhersage des Ausgangs erinnern
  - Beispiel: Ausgang von politischen Wahlen

## (II) FORMELSAMMLUNG

# Formeln und Verteilungstabellen





# Formeln und Verteilungstabellen

- Zusammenfassung der grundlegenden Formeln und Verteilungstabellen für die gängigsten statistischen Analyseverfahren
- Dabei bauen die Formeln der univariaten, bivariaten und multivariaten Statistik aufeinander auf

# Formeln und Verteilungstabellen

- Die korrigierte Stichprobenvarianz wird bspw. für die Standardabweichung benötigt
- Tipp: Die Standardabweichung lässt sich mit einer Taste auf dem Taschenrechner aufrufen

# Formeln und Verteilungstabellen

- Gleichmaßen erfordert der Korrelationskoeffizient die Standardabweichung
- Tipp: Vorherige Ergebnisse können einfach in die nächste Formel überführt werden

# Formeln und Verteilungstabellen

- Schließlich führen die Standardabweichung und der Korrelationskoeffizient zu den linearen Regressionsgewichten
- Tipp: Dabei können auch die Ergebnisse aus mehreren Formeln kombiniert werden

# Formeln und Verteilungstabellen

- Für manche Formeln sind darüber hinaus Verteilungstabellen mit statistischen Referenzwerten erforderlich
  - Chi-Quadrat-Test
  - t-Test

# (III) DATENANALYSE

Skalenniveaus



# Skalenniveaus

- Skalenniveaus werden häufig auch als Messniveaus bezeichnet
- Sie beziehen sich auf den Detailgrad der Merkmalsausprägungen einer Variable

# Skalenniveaus

- Geeignete Skalenniveaus sind in der Lage, die unterschiedlichen Facetten eines realen Phänomens ausreichend abzubilden
- Für eine zielführende Datenanalyse mit R ist die Differenzierung von vier unterschiedlichen Skalenniveaus erforderlich



# Skalenniveaus

- Von der Nominalskala zur Verhältnisskala  
nimmt der Detailgrad der Merkmalsausprägungen zu
  - Nominalskala
  - Ordinalskala
  - Intervallskala
  - Verhältnisskala

# Skalenniveaus

- Die Nominalskala differenziert zwischen Merkmals-ausprägungen ohne vorgegebene Rangfolge
  - Geschlecht (männlich, weiblich, divers)  $\rightarrow 1 \neq 2 \neq 3$
  - Postleitzahl (50939, 53225)  $\rightarrow 1 \neq 2$
- Ein Spezialfall sind die dichotomen Variablen
  - Postleitzahl (50939 für Köln, 53225 für Bonn)  $\rightarrow 0 \neq 1$

# Skalenniveaus

- Mit der Ordinalskala kann eine Rangfolge unter den Merkmalsausprägungen abgebildet werden, ohne diese Rangfolge im Detail interpretieren zu können
  - Einkommen (niedrig, hoch) → niedrig < hoch
  - Schulnoten (sehr gut, gut) → sehr gut > gut

# Skalenniveaus

- Bei der Intervallskala lassen sich die unterschiedlichen Merkmalsausprägungen mittels Zahlen abbilden und interpretieren
  - Intelligenz (110, 100)  $\rightarrow 110 - 10 = 100$
  - Temperatur (30°C, 35°C)  $\rightarrow 30^\circ\text{C} + 5^\circ\text{C} = 35^\circ\text{C}$
- Bei der Intervallskala gibt es keinen Nullpunkt

# Skalenniveaus

- Die Verhältnisskala erlaubt die Berechnung der exakten Beziehung zwischen den Merkmalsausprägungen
  - Einkommen (3000, 1500)  $\rightarrow 3000 : 2 = 1500$
  - Temperatur (20 K, 40 K)  $\rightarrow 20 \text{ K} * 2 = 40 \text{ K}$
- Die Verhältnisskala besitzt einen Nullpunkt

# Skalenniveaus

- Höhere Skalenniveaus können in niedrigere Skaleniveaus überführt werden
- Umgekehrt ist dies jedoch nicht möglich
  - Rauchverhalten (ja, nein) → Anzahl an Zigaretten?
  - Einkommen (hoch) → Betrag in Euro?

# (III) DATENANALYSE

## Univariate Statistik



# Univariate Statistik

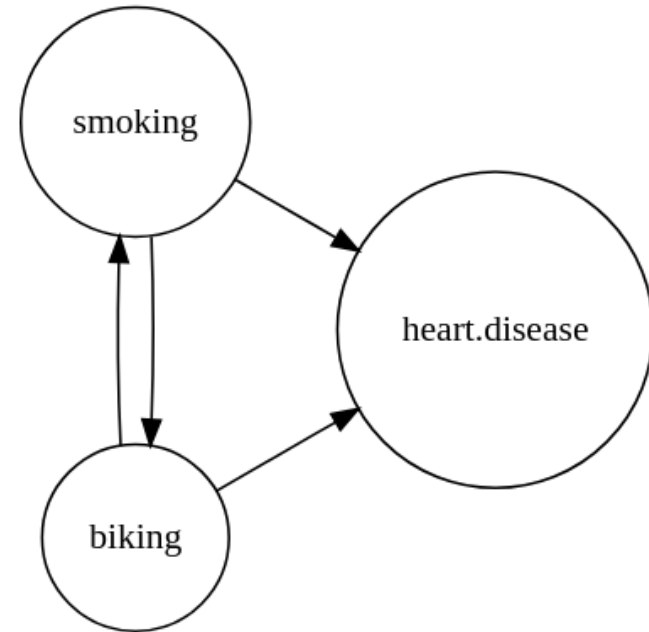
- Für die univariate Statistik wird auf den externen HEART Datensatz zurückgegriffen, der über die Funktion read.csv(...) eingelesen werden kann:

```
# Datensatz einlesen  
heart.data <-  
read.csv("https://raw.githubusercontent.com/statistical-  
thinking/free-datasets/main/heart.data.csv")
```



# Univariate Statistik

- Dieser beinhaltet zwei unabhängige und eine abhängige Variable
  - ( $X_1$ ) biking
  - ( $X_2$ ) smoking
  - ( $Y$ ) heart.disease



# Univariate Statistik

- Wie bisher geben die Funktionen dim(...), summary(...) und boxplot(...) einen ersten Überblick über die Variablen:

```
# Univariate Statistik  
dim(heart.data)  
summary(heart.data)  
boxplot(heart.data)
```

# Univariate Statistik

- Neben dem Minimum und Maximum der Merkmalsausprägungen werden zusätzlich Quartile und Lagemaße (hier: der Median und das arithmetische Mittel) ausgewiesen

# Univariate Statistik

- Quartile geben über Schwellenwerte (1. Quartil, Median, 3. Quartil) Auskunft zu vier Gruppen
  - $\leq 25\%$  der Fälle
  - $\leq 50\%$  der Fälle
  - $\leq 75\%$  der Fälle
  - $\leq 100\%$  der Fälle

# Univariate Statistik

- Lagemaße sollen die zentrale Tendenz eines Datensatzes zum Ausdruck bringen
  - Arithmetisches Mittel
  - Median
  - Modus

# Univariate Statistik

- Arithmetisches Mittel
  - Auch als Durchschnittswert oder Mean bekannt
  - Summe der Merkmalsausprägungen dividiert durch die Anzahl der Fälle

$$\bar{x} = \frac{1}{n} (x_1 + x_2 + x_3 + \cdots + x_n)$$

# Univariate Statistik

- Median
  - Auch als Zentralwert bekannt
  - Die Merkmalsausprägung in der Mitte einer aufsteigend sortierten Liste aller Merkmalsausprägungen

$$\tilde{x}_{ungerade} = x_{\frac{n+1}{2}} \quad \text{bzw.} \quad \tilde{x}_{gerade} = \frac{1}{2} \left( x_{\frac{n}{2}} + x_{\frac{n}{2}+1} \right)$$

# Univariate Statistik

- Modus
  - Auch als Modalwert bekannt
  - Bezeichnet die häufigste Merkmalsausprägung innerhalb einer Variable

$\bar{x}_d$  = *Häufigster Beobachtungswert*



# Univariate Statistik

- Sowohl die Quartile als auch die Lagemaße geben Auskunft über die Verteilung der Merkmalsausprägungen einer Variable
- Allerdings lässt sich aus diesen Funktionen nicht ableiten, wie häufig einzelne Merkmalsaus-prägungen in einer Variable vertreten sind

# Univariate Statistik

- Auskunft über die Häufigkeit einzelner Merkmalsausprägungen einer Variable liefert ein Histogramm in Verbindung mit der dazugehörigen Dichtefunktion

# Univariate Statistik

- Ein Histogramm kann zunächst über die Funktionen hist(...) aufgerufen werden:

*# Verteilungsfunktion und Lagemaße*

```
hist(heart.data$heart.disease, freq=FALSE, breaks=40,  
ylim=c(0,0.10), xlim=c(-5,26))
```

# Univariate Statistik

- Die dazugehörige Dichtefunktion ergibt sich daraufhin aus der Funktion curve(...):

```
curve(dnorm(x,mean=mean(heart.data$heart.disease),  
sd=sd(heart.data$heart.disease)), add=TRUE, lwd=5)
```

# Univariate Statistik

- Anschließend lassen sich über die Funktion abline(...) die Lagemaße ergänzen:

```
abline(v=10.17, col="red") # Mean  
abline(v=10.38, col="green") # Median  
abline(v=6.75, col="blue") # Modus
```

# Univariate Statistik

- Für eine passende Legende wird auf die Funktion legend(...) zurückgegriffen:

```
legend(19, 0.1, legend=c("Mean", "Median", "Modus"),  
col=c("red", "green", "blue"), lty=1)
```

# Univariate Statistik

- Die Dichtefunktion der Variable heart.disease entspricht der sogenannten Normalverteilung
  - glockenförmig
  - asymptotisch
  - symmetrisch
  - unimodal

# Univariate Statistik

- Dabei gilt: Das Integral der Dichtefunktion  $f(x)$  ist die sogenannte Verteilungsfunktion  $F(x)$
- Die Verteilungsfunktion gibt an, wie groß die Wahrscheinlichkeit ist, dass die Merkmalsausprägung  $\leq x$  ist



# Univariate Statistik

- Neben den Lagemaßen lassen sich auch die Streuungsmaße in den Plot überführen
- Zunächst die Funktionen var(...) und sd(...):

```
# Varianz und Standardabweichung (Teil 1)  
var(heart.data$heart.disease)  
sd(heart.data$heart.disease)
```

# Univariate Statistik

- Streuungsmaße beziehen sich auf die Streubreite einzelner Merkmalsausprägungen um ausgewiesene Lagemaße (häufig das arithmetische Mittel)
  - Korrigierte Stichprobenvarianz
  - Standardabweichung

# Univariate Statistik

- Korrigierte Stichprobenvarianz
  - In vielen Fällen einfach Varianz genannt
  - Mittlere quadratische Abweichung vom arithmetischen Mittel

$$s_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2$$

# Univariate Statistik

- Standardabweichung
  - Wurzel aus der korrigierten Stichprobenvarianz
  - Durchschnittliche Entfernung aller Merkmalsausprägungen vom arithmetischen Mittel

$$s_x = \sqrt{s_x^2}$$

# Univariate Statistik

- Mittels der Standardabweichung kann auf die 68-95-Regel zurückgegriffen werden
  - 68% der Fälle sind  $\pm$  eine Standardabweichung vom arithmetischen Mittel entfernt
  - 95% der Fälle sind  $\pm$  zwei Standardabweichungen vom arithmetischen Mittel entfernt

# Univariate Statistik

- Zunächst wird für den Plot erneut auf die Funktion hist(...) zurückgegriffen:

```
# Varianz und Standardabweichung (Teil 2)
```

```
hist(heart.data$heart.disease, freq=FALSE, breaks=40,  
ylim=c(0,0.10), xlim=c(-5,26))
```

# Univariate Statistik

- Zur besseren Veranschaulichung wird auch die Dichtefunktion über die Funktion curve(...) wieder ergänzt:

```
curve(dnorm(x, mean=mean(heart.data$heart.disease),  
sd=sd(heart.data$heart.disease)), add=TRUE, lwd=5)
```

# Univariate Statistik

- Die Funktion abline(...) ermöglicht daraufhin die Anwendung der 68-95-Regel:

*abline(v=5.6, col="red") # Untere Grenze (68 %)*

*abline(v=14.74, col="red") # Obere Grenze (68 %)*

*abline(v=1.03, col="green") # Untere Grenze (95 %)*

*abline(v=19.31, col="green") # Obere Grenze (95 %)*



# Univariate Statistik

- Schließlich verdeutlicht die Funktion legend(...) die Bereiche, in dem sich 68% bzw. 95% der Merkmalsausprägungen befinden:

```
legend(20, 0.1, legend=c("68 %", "95 %"), col=c("red",  
"green"), lty=1)
```

# (III) DATENANALYSE

z-Werte



# z-Werte

- Der z-Wert ist die Differenz eines Rohwertes vom arithmetischen Mittel dividiert durch die Standardabweichung:

$$z = \frac{x - \bar{x}}{s_x}$$

# z-Werte

- Mit der zugrundeliegenden z-Transformation werden Rohwerte in Normwerte überführt
- Normwerte ermöglichen gegenüber Rohwerten einen standardisierten Vergleich

# z-Werte

- Zwei Schüler haben in unterschiedlichen Fächern an der PISA-Studie teilgenommen
  - Moritz in Mathematik
  - Fritz in Deutsch
- Beide haben 620 Punkte erzielt
  - Wer hat besser abgeschnitten?

# z-Werte

- Für die z-Transformation benötigte Angaben
  - Durchschnittliche Punktezahl in Mathematik (490)
  - Standardabweichung in Mathematik (99,4)

---

  - Durchschnittliche Punktezahl in Deutsch (484)
  - Standardabweichung in Deutsch (110,9)

# z-Werte

- Moritz in Mathematik
  - $z_M = (620 - 490)/99,4$
  - $z_M = 1,31$
- Fritz in Deutsch
  - $z_F = (620 - 484)/110,9$
  - $z_F = 1,22$

# z-Werte

- Fritz hat in der Differenz zur durchschnittlichen Punktezahl in Deutsch mehr Punkte als Moritz in seiner Vergleichsgruppe erzielt
- Die unterschiedlichen Standardabweichungen in den beiden Vergleichsgruppen bedingen aber einen höheren z-Wert zugunsten von Moritz



# z-Werte

- Demnach hat Moritz ( $z_M = 1,31$ ) besser abgeschnitten als Fritz ( $z_F = 1,22$ )

# z-Werte

- Die z-Transformation einer Variable führt zur Standardisierung derselben, so dass aus einer Normalverteilung eine Standardnormalverteilung mit  $\mu = 0$  und  $\sigma = 1$  wird
- Tipp: Die Funktion scale(...) führt zu Normwerten

# (III) DATENANALYSE

## Bivariate Statistik



# Bivariate Statistik

- Die bivariate Statistik ermöglicht das Erklären der Zusammenhänge zwischen zwei Variablen
- Gängige Verfahren der bivariaten Statistik
  - Korrelation (und Kovarianz)
  - Chi-Quadrat-Test
  - t-Test

# Bivariate Statistik

- Die Korrelation misst die Stärke des (linearen) Zusammenhangs von zwei Variablen
- Der Korrelationskoeffizient ist ungerichtet, d.h. die Richtung der Stärke des Zusammenhangs muss theoretisch begründet werden
- Korrelationen sind kein Beweis für Kausalität

# Bivariate Statistik

- Formal setzt sich der Korrelationskoeffizient aus der Kovarianz und den dazugehörigen Standardabweichungen zusammen

$$r_{xy} = \frac{\hat{\sigma}_{xy}}{s_x * s_y} = \frac{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} * \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}$$

# Bivariate Statistik

- Die zugrundeliegende Kovarianz ist eine Erweiterung der empirischen Stichprobenvarianz um eine zweite Variable

$$\hat{\sigma}_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})$$

# Bivariate Statistik

- Demnach ist die Kovarianz primär dazu geeignet, einen positiven oder negativen Zusammenhang zu identifizieren
- Eine standardisierte Interpretation dieses Zusammenhangs ist allerdings nur mit der Korrelation möglich



# Bivariate Statistik

- Die Standardisierung bedingt die Ausprägungen des Korrelationskoeffizienten
  - perfekt negativer Zusammenhang ( $- 1,00$ )
  - perfekt positiver Zusammenhang ( $+ 1,00$ )
  - kein Zusammenhang ( $\pm 0,00$ )

# Bivariate Statistik

- Der Blick für die Stärke des Zusammenhangs einer Korrelation zwischen zwei Variablen lässt sich natürlich auch ganz anschaulich trainieren
  - <http://www.guessthecorrelation.com/>

# Bivariate Statistik

- Für die Umsetzung in R kann wieder auf den externen HEART Datensatz über die Funktion read.csv(...) zurückgegriffen werden:

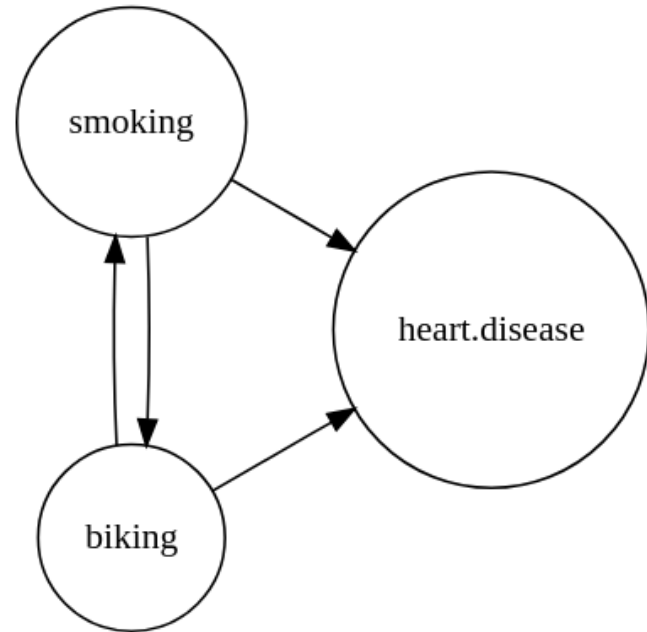
```
# Datensatz einlesen
```

```
heart.data <-
```

```
read.csv("https://raw.githubusercontent.com/statistical-  
thinking/free-datasets/main/heart.data.csv")
```

# Bivariate Statistik

- Diesmal geht es um den Zusammenhang der Variablen
  - $(X_1)$  biking
  - $(X_2)$  smoking
  - $(Y)$  heart.disease



# Bivariate Statistik

- Bei überschaubaren Datensätzen lassen sich die Korrelationskoeffizienten in der Korrelations-matrix über die Funktion cor(...) aufrufen:

```
# Korrelation (Teil 1)  
cor(heart.data)
```

# Bivariate Statistik

- Der Zusammenhang zwischen zwei Variablen lässt sich darüber hinaus mit den Funktionen plot(...) und abline(...) visualisieren:

```
# Korrelation (Teil 2)
```

```
plot(heart.data$heart.disease~heart.data$biking)
```

```
abline(lm(heart.data$heart.disease~heart.data$biking),  
col="green")
```

# Bivariate Statistik

- Demnach setzt die (lineare) Korrelation mindestens intervall- oder verhältnisskalierte Variablen voraus
- Liegen hingegen zwei nominalskalierte Variablen vor, kann auf den Chi-Quadrat-Test zurückgegriffen werden

# Bivariate Statistik

- Weil der HEART Datensatz keine nominal-skalierten Variablen beinhaltet, werden diese zunächst über die Funktion ifelse(...) generiert:

```
# Chi-Quadrat-Test
```

```
nominal_y <- ifelse(heart.data$heart.disease > 10.17, 1, 0)
```

```
nominal_x <- ifelse(heart.data$smoking > 15.43, 1, 0)
```



# Bivariate Statistik

- Nominalskalierte Variablen lassen sich über den table(...) Befehl als Tabelle aufrufen:

```
table(nominal_y,  
nominal_x)
```

- Schließlich wird der Chi-Quadrat-Test mittels der Funktion chisq.test(...) durchgeführt:

```
chisq.test(nominal_y,  
nominal_x)
```

# Bivariate Statistik

- Die zugrundeliegende Formel des Chi-Quadrat-Tests vergleicht beobachtete Werte ( $n_j$ ) mit erwarteten Werten ( $n_{j0}$ )

$$\chi^2 = \sum_{j=1}^m \frac{(n_j - n_{j0})^2}{n_{j0}}$$

# Bivariate Statistik

- Die beobachteten Werte ( $n_j$ ) befinden sich in der zuvor generierten Tabelle mit den nominal-skalierten Variablen
- Ausgehend von den beobachteten Werten ( $n_j$ ) soll die Hypothese ( $H$ ) untersucht werden, dass ein Zusammenhang zwischen  $x$  und  $y$  vorliegt

# Bivariate Statistik

- Beim Chi-Quadrat-Test wird die Hypothese (H) allerdings nicht direkt überprüft, sondern indirekt über die Nullhypothese ( $H_0$ )
- Die Nullhypothese ( $H_0$ ) geht von keinem Zusammenhang aus und bedingt dadurch die erwarteten Werte ( $n_{j0}$ )

# Bivariate Statistik

- Beobachtete Werte ( $n_{ij}$ )

	<u><math>x_0</math></u>	<u><math>x_1</math></u>
<u><math>y_0</math></u>	140	101
<u><math>y_1</math></u>	105	152

- $H$ : Rauchen ( $x$ ) führt zu Herzerkrankungen ( $y$ )

- Erwartete Werte ( $n_{j0}$ )

?

- $H_0$ : Rauchen ( $x$ ) führt nicht zu Herzerkrankungen ( $y$ )

# Bivariate Statistik

- Wahrscheinlichkeit für eine Herzerkrankung
  - $P(y_1) = (105 + 152) / 498$
  - $P(y_1) = 51,6\%$
- Wahrscheinlichkeit für keine Herzerkrankung
  - $P(y_0) = 100\% - 51,6\%$
  - $P(y_0) = 48,4\%$

# Bivariate Statistik

- Wenn die Nullhypothese ( $H_0$ ) gilt, dann müssten diese Wahrscheinlichkeiten unabhängig vom Rauchverhalten ( $x_0$  und  $x_1$ ) sein
  - 51,6% mit und 48,4% ohne Herzerkrankung bei  $x_0$
  - 51,6% mit und 48,4% ohne Herzerkrankung bei  $x_1$

# Bivariate Statistik

- Die Wahrscheinlichkeiten sind also gleich verteilt und ergeben die erwarteten Werte ( $n_{j0}$ )
  - Für  $x_0$ :  $245 * 51,6\% = 126$
  - Für  $x_0$ :  $245 * 48,4\% = 119$
  - Für  $x_1$ :  $253 * 51,6\% = 131$
  - Für  $x_1$ :  $253 * 48,4\% = 122$



# Bivariate Statistik

- Beobachtete Werte ( $n_{ij}$ )

	<u><math>x_0</math></u>	<u><math>x_1</math></u>
<u><math>y_0</math></u>	140	101
<u><math>y_1</math></u>	105	152

- $H$ : Rauchen ( $x$ ) führt zu Herzerkrankungen ( $y$ )

- Erwartete Werte ( $n_{j0}$ )

	<u><math>x_0</math></u>	<u><math>x_1</math></u>
<u><math>y_0</math></u>	119	122
<u><math>y_1</math></u>	126	131

- $H_0$ : Rauchen ( $x$ ) führt nicht zu Herzerkrankungen ( $y$ )

# Bivariate Statistik

- Der berechnete Chi-Quadrat-Wert beträgt
  - $\chi^2 \approx (140 - 119)^2 / 119 + (101 - 122)^2 / 122$   
 $+ (105 - 126)^2 / 126 + (152 - 131)^2 / 131$
  - $\chi^2 \approx 15$
- Der Chi-Quadrat-Wert wird mit den Referenz-  
werten der Chi-Quadrat-Wert-Verteilungstabelle  
verglichen

# Bivariate Statistik

- Referenzwerte in Abhängigkeit von Freiheitsgraden (dF) und Irrtumswahrscheinlichkeiten ( $\alpha$ )

Freiheitsgrade	1 - $\alpha$					
	00,85	00,90	00,95	00,975	00,99	00,995
1	02,07	02,71	03,84	05,02	06,63	07,88
2	03,79	04,61	05,99	07,38	09,21	10,60
3	05,32	06,25	07,81	09,35	11,34	12,84
4	06,74	07,78	09,49	11,14	13,28	14,86
5	08,12	09,24	11,07	12,83	15,09	16,75
(...)	(...)	(...)	(...)	(...)	(...)	(...)

# Bivariate Statistik

- Berechnung der Freiheitsgrade (dF)
  - $dF = (\text{Zeilen} - 1) * (\text{Spalten} - 1)$
  - $dF = (2 - 1) * (2 - 1)$
  - $dF = 1$
- Die Irrtumswahrscheinlichkeit steht für die Wahr-scheinlichkeit, dass  $H_0$  irrtümlich abgelehnt wird

# Bivariate Statistik

- Ist der Chi-Quadrat-Wert größer als der Referenzwert, wird die Nullhypothese ( $H_0$ ) verworfen
- Dies bedeutet im vorliegenden Beispiel
  - $15 > 7,88$  (Referenzwert)
  - 99,5% Sicherheit in der Ablehnung von  $H_0$
  - H: Rauchen (x) führt zu Herzerkrankungen (y)

# Bivariate Statistik

- Ein ähnliches Verfahren unter Rückgriff auf Referenzwerte zeigt sich beim t-Test
- Dabei geht es um den Zusammenhang zwischen einer mindestens intervallskalierten abhängigen Variable und einer nominalskalierten unabhängigen Variable

# Bivariate Statistik

- Die nominalskalierte unabhängige Variable ermöglicht dem t-Test u.a. Gruppenvergleiche
  - Arithmetisches Mittel der Gruppe  $x_1$
  - Arithmetisches Mittel der Gruppe  $x_2$
- Tipp: Die Gruppen können auch nach den Merkmalsausprägungen 0 oder 1 benannt sein

# Bivariate Statistik

- Formal ist dies durch den standardisierten Vergleich beider arithmetischer Mittel in Abhängigkeit von der Anzahl der Fälle (N) möglich

$$t = \frac{\bar{x}_1 - \bar{x}_2}{\sqrt{\frac{s_1^2}{N_1} + \frac{s_2^2}{N_2}}}$$



# Bivariate Statistik

- Beim t-Test beinhaltet die t-Wert-Verteilungstabelle die entsprechen Referenzwerte

Freiheitsgrade	1 - $\alpha$					
	00,85	00,90	00,95	00,975	00,99	00,995
20	01,06	01,32	01,72	02,09	02,53	02,86
40	01,05	01,30	01,68	02,02	02,42	02,70
60	01,04	01,29	01,67	02,00	02,39	02,66
80	01,04	01,29	01,66	01,99	02,37	02,63
100	01,04	01,29	01,66	01,98	02,36	02,62
(...)	(...)	(...)	(...)	(...)	(...)	(...)

# Bivariate Statistik

- Anwendung und Interpretation erfolgen analog dem für den Chi-Quadrat-Test vorgestellten Beispiel
- Tipp: Der hier vorgestellte t-Test ist eigentlich der Welch-Test, bei dem die intervallskalierte ab-hängige Variable nicht normalverteilt sein muss

# Bivariate Statistik

- Zur Visualisierung eines Gruppenvergleichs werden im HEART Datensatz Gruppen über die Funktion subset(...) angelegt:

```
# t-Test (Teil 1)
```

```
low_smoking_areas <- subset(heart.data,  
heart.data$smoking < 15.43)
```

```
high_smoking_areas <- subset(heart.data,  
heart.data$smoking > 15.43)
```

# Bivariate Statistik

- Über die Funktion par(...) werden die beiden Funktionen boxplot(...) zusammengefasst:

```
par(mfrow=c(1,2))
```

```
boxplot(low_smoking_areas[c(3)], ylim=c(0, 22),  
main="Low Smoking Areas (0)")
```

```
boxplot(high_smoking_areas[c(3)], ylim=c(0, 22),  
main="High Smoking Areas (1)")
```

# Bivariate Statistik

- Schließlich lassen sich die arithmetischen Mittel der beiden Gruppen auch direkt über die Funktion t.test(...) vergleichen:

```
# t-Test (Teil 2)
```

```
t.test(heart.data$heart.disease~nominal_x)
```

# Obligatorischer Exkurs

- Exponentialfunktion mit negativem Exponenten:

```
x <- seq(0,50,1)
y <- runif(1,5,5)*exp(-runif(1,0.1,0.1)*x)+rnorm(51,0,0.5)
a_start <- 10
b_start <- 2*log(2)/a_start
m <- nls(y~a*exp(-b*x), start=list(a=a_start, b=b_start))
plot(x,y)
lines(x, predict(m), col="blue", lty=2,lwd=3)
```

Klausurrelevant (!)

# Obligatorischer Exkurs

- Michaelis-Menten-Gleichung:

```
x <- seq(0,50)
y <- (runif(1,10,20)*x)/(runif(1,0,10)+x)+rnorm(51,0,1)
a_start <- 10
b_start <- 2*log(2)/a_start
m <- nls(y~a*x/(b+x), start=list(a=a_start, b=b_start))
plot(x,y)
lines(x, predict(m), lty=2, col="blue", lwd=3)
```

# (III) DATENANALYSE

## 3. Übungsaufgabe



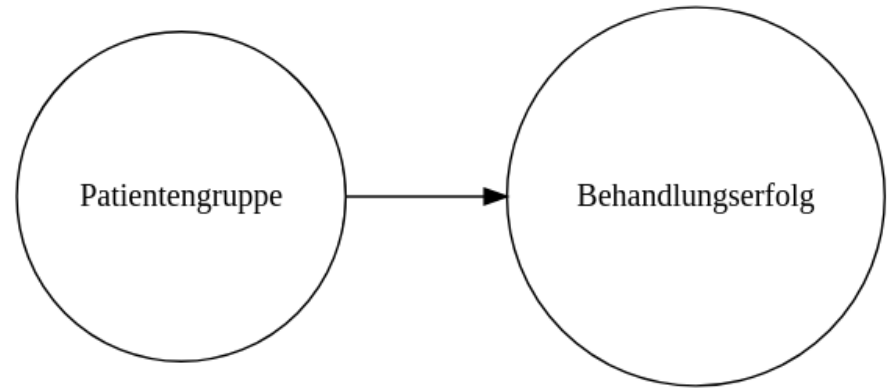


# 3. Übungsaufgabe

- In dieser Übungsaufgaben stehen zwei nominalskalierte Variablen zur Verfügung
  - Patientinnen und Patienten in Gruppe A oder B
  - Behandlung erfolgreich bzw. nicht erfolgreich
- Diesmal ist der Datensatz nicht in R enthalten

# 3. Übungsaufgabe

- Nominalskalierte Variablen
  - Patientengruppe (X)
  - Behandlungserfolg (Y)
- Hypothese:  
Behandlungs-erfolg in Gruppe A größer als in Gruppe B



# 3. Übungsaufgabe

- Über die Funktionen `cbind(...)` und `rbind(...)` kann der Datensatz aus der Übungsaufgabe in R überführt werden:

```
# Zusätzliche Syntax für R (Teil 1)
```

```
erfolgreich <- cbind(70, 55)
```

```
nicht_erfolgreich <- cbind(30, 45)
```

```
matrix <- rbind(erfolgreich, nicht_erfolgreich)
```

# 3. Übungsaufgabe

- Die Funktion chisq.test(...) ermittelt in R das exakte Signifikanzniveau:

*# Zusätzliche Syntax für R (Teil 2)*  
*chisq.test(matrix)*

# 3. Übungsaufgabe

- Ziele dieser Übungsaufgabe (ohne R)
  - Nullhypothese aufsetzen
  - Erwartete Werte bestimmen
  - Chi-Quadrat-Wert bestimmen
  - Nullhypothese mit Referenzwert prüfen

# (III) DATENANALYSE

## 4. Übungsaufgabe

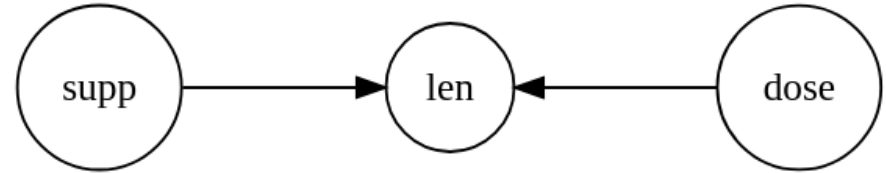


# 4. Übungsaufgabe

- Die Übungsaufgabe zum TOOTHGROWTH Datensatz kann mit dem t-Test gelöst werden
- Hierbei geht es um den Einfluss von Orangensaft oder purem Vitamin C als Supplement (Variable: supp) auf das Wachstum der Zähne (Variable: len) von Meerschweinchen

# 4. Übungsaufgabe

- Insgesamt stehen drei Variablen zur Verfügung
  - supp ( $X_1$ )
  - dose ( $X_2$ )
  - len ( $Y$ )





# 4. Übungsaufgabe

- Dabei sollen die Unterschiede zwischen den Gruppen der Meerschweinchen zunächst über die Funktionen subset(...) und boxplot(...) visualisiert werden:

```
# Vitamin C Meerschweinchen  
vc <- subset(ToothGrowth, supp=="VC")  
boxplot(vc[c(1,3)], main="VC")
```

# (III) DATENANALYSE

## Multivariate Statistik



# Multivariate Statistik

- Das Prinzip der multivariaten Statistik, also der Vorhersage einer abhängigen Variable über mehrere unabhängige Variablen, kann über zwei Verfahren veranschaulicht werden
  - Lineare Regression
  - Logistische Regression

# Multivariate Statistik

- Bei der (einfachen) linearen Regression wird über den Korrelationskoeffizienten und die dazugehörigen Standardabweichungen das Regressionsgewicht ( $b_1$ ) der unabhängigen Variable bestimmt

$$b_1 = r_{xy} * \frac{s_y}{s_x}$$

# Multivariate Statistik

- Mit dem Regressionsgewicht ( $b_1$ ) und dem arithmetischen Mittel für  $y$  und  $x_1$  lässt sich daraufhin der Schnittpunkt der Regressionsgeraden mit der  $y$ -Achse ( $a$ ) bestimmen

$$a = \bar{y} - b_1 \bar{x}_1$$

# Multivariate Statistik

- Regressionsanalysen geben zusätzlich Auskunft über den Grad an Varianzaufklärung
- Der Determinationskoeffizient ( $R^2$ ) basiert bei der (einfachen) linearen Regression auf dem Korrelationskoeffizienten

$$R^2 = (r_{xy})^2$$

# Multivariate Statistik

- Um dies zu veranschaulichen wird ein letztes Mal auf den externen HEART Datensatz über die Funktion read.csv(...) zurückgegriffen:

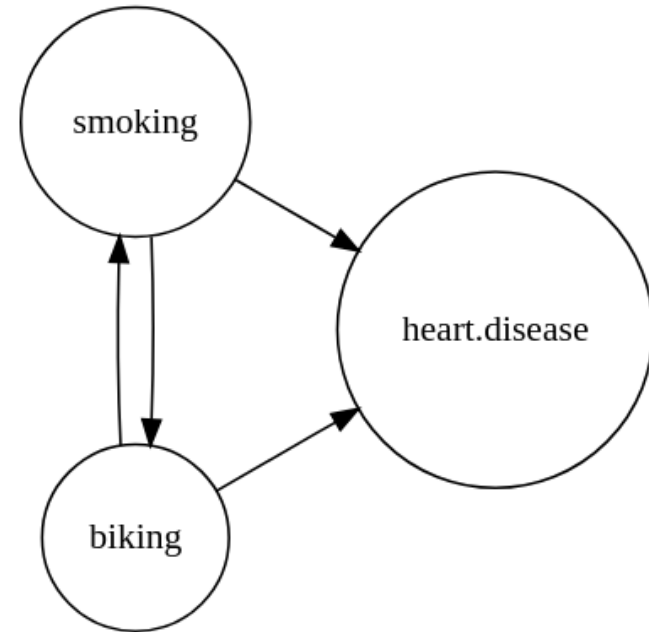
```
# Datensatz einlesen
```

```
heart.data <-
```

```
read.csv("https://raw.githubusercontent.com/statistical-  
thinking/free-datasets/main/heart.data.csv")
```

# Multivariate Statistik

- Diesmal geht es um die Vorhersage von heart.disease
  - $(X_1)$  biking
  - $(X_2)$  smoking
  - $(Y)$  heart.disease





# Multivariate Statistik

- Eine (einfache) lineare Regression kann über die Funktion lm(...) aufgerufen werden:

```
# Multivariate Statistik (Teil 1)  
(lm(heart.disease~biking, data=heart.data))
```

- Tipp: Über die äußere (...) lässt sich das Regressionsmodell bei Bedarf mit anderen Funktionen kombinieren, bspw. mit summary(...)

# Multivariate Statistik

- Die Kennwerte dieses Regressionsmodells lassen sich mit den Funktionen plot(...) und abline(...) visualisieren:

```
plot(heart.data$heart.disease~heart.data$biking)  
abline(lm(heart.data$heart.disease~heart.data$biking),  
col="green")
```

# Multivariate Statistik

- Das Regressionsgewicht ( $b_1$ ) entspricht dabei der Steigung der linearen Funktion
- Der Schnittpunkt mit der y-Achse ( $a$ ) kann als theoretisch begründbarer Ausgangspunkt der linearen Funktion betrachtet werden

# Multivariate Statistik

- Die Kennwerte der (einfachen) linearen Regression für die unabhängige Variable smoking lassen sich ebenfalls über die Funktion lm(...) aufrufen:

```
(lm(heart.disease~biking+smoking, data=heart.data))
```

# Multivariate Statistik

- Die Funktion lm(...) ermöglicht auch die lineare Regression mit beiden unabhängigen Variablen:

```
# Multivariate Statistik (Teil 2)
```

```
reg1 <- (lm(heart.disease~., data=heart.data))
```

```
summary(reg1)
```

- Die Funktion summary(...) gibt dabei eine zusätzliche Modellzusammenfassung aus

# Multivariate Statistik

- In der Modellzusammenfassung sind insbesondere die Residuen von Interesse
- Dabei geht es um die “Fehler“ in der Vorhersagegenauigkeit des Regressionsmodells

# Multivariate Statistik

- Die Residuen sollten bei der linearen Regression normalverteilt sein
- Dies lässt sich über die Modellzusammenfassung mit der Funktion summary(...) überprüfen

# Multivariate Statistik

- Darüber hinaus sollten die Residuen keine Muster beinhalten, die auf eine nicht-lineare Vorhersagbarkeit schließen lassen
- Dies ist bspw. bei Heteroskedastizität der Fall: Die Varianz der Residuen variiert mit zunehmenden bzw. abnehmenden Werten des Prädiktors



# Multivariate Statistik

- Die Residuen eines Regressionsmodells können über die Funktion `plot(...)` auf solche Muster hin überprüft werden:

```
plot(reg1$residuals)
```

# Multivariate Statistik

- Wenn die abhängige Variable lediglich als nominalskalierte Variable vorliegt, so kann auf die logistische Regression zurückgegriffen werden

# Multivariate Statistik

- Zur Veranschaulichung wird über die Funktion ifelse(...) eine nominalskalierte abhängige Variable generiert:

```
# Multivariate Statistik (Teil 3)
```

```
nominal_y <- ifelse(heart.data$heart.disease > 10.17, 1, 0)
```

# Multivariate Statistik

- Die Herausforderung in der Interpretation des Zusammenhangs zeigt sich in der Visualisierung über die Funktion plot(...):

```
plot(nominal_y~heart.data$biking)
```

# Multivariate Statistik

- Einer nominalskalierten abhängigen Variablen fehlen kleinschrittige Merkmalsausprägungen, so dass eine lineare Funktion nicht zur Vorhersage geeignet ist
- In diesem Fall wird auf eine logistische Funktion mit S-förmigen Verlauf zurückgegriffen

# Multivariate Statistik

- Dafür wird in der Funktion glm(...) das Argument family=binomial spezifiziert:

```
reg2 <- glm(nominal_y~heart.data$biking, family=binomial)  
summary(reg2)
```

- Achtung: Die Estimates sind nicht wie lineare Regressionsgewichte zu interpretieren!

# Multivariate Statistik

- Die nominalskalierte abhängige Variable wird in der logistischen Regression mit logarithmierten Odds Ratios als Regressionsgewichte vorhergesagt
- Dazu ein Beispiel: Die logarithmierte Odds Ratio ein nerdiger Star Wars Fan zu sein

# Multivariate Statistik

- 7 von 10 Nerds sind Star Wars Fans
- 4 von 10 Normalos sind Star Wars Fans
  - $7 / 10 = 70\%$  als Wahrscheinlichkeit für Nerds
  - $4 / 10 = 40\%$  als Wahrscheinlichkeit für Normalos
  - $70\% / (1 - 70\%) = 2,33$  als Odds für Nerds
  - $40\% / (1 - 40\%) = 0,66$  als Odds für Normalos



# Multivariate Statistik

- Die Odds von 2,33 für einen Nerd und 0,66 für KEINEN Nerd ergeben demnach...
  - $2,33 / 0,66 = 3,5$  als Odds Ratio
  - $\ln(3,5) = 1,25$  als logarithmierte Odds Ratio
- Dieser Wert wird auch Logit genannt
  - $\text{Logit} = \ln(\text{Odds Ratio})$

# Obligatorischer Exkurs

- Logarithmierte Odds Ratio eines nerdigen Star Wars Fans:

```
starwars <- data.frame(  
  Nerd=c(1,1,1,1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,0,0,0,0,0,0),  
  Fan=c(1,1,1,1,1,1,1,0,0,0,1,1,1,1,0,0,0,0,0))  
glm(data=starwars, Fan~Nerd, family=binomial)
```

Klausurrelevant (!)

# (III) DATENANALYSE

## Komplexitätsreduktion



# Komplexitätsreduktion

- Datensätze können viele Variablen und Fälle beinhalten, die sich dennoch (theoriegeleitet) zusammenfassen lassen
  - Variablen der Bildung vs. des Einkommens
  - Fälle im Schwimmverein vs. Basketballverein

# Komplexitätsreduktion

- Bekannte Verfahren der Komplexitätsreduktion
  - Faktorenanalyse (bzgl. Variablen)
  - Clusteranalyse (bzgl. Fälle)
- Zunächst wird eine Einführung in die Faktorenanalyse gegeben

# Komplexitätsreduktion

- Die Packages PSYCH und CORRPLOT beinhalten Funktionen für die Faktorenanalyse und können nach erfolgreicher Installation über die Funktion library(...) aufgerufen werden:

```
# Funktionsumfang von R erweitern  
library(psych)  
library(corrplot)
```

# Komplexitätsreduktion

- Als Beispiel wird der BFI Datensatz des Packages PSYCH herangezogen
- Erste Details zum BFI Datensatz verraten die Funktionen dim(...) und summary(...):

```
# Deskriptive Statistik  
dim(bfi)  
summary(bfi)
```

# Komplexitätsreduktion

- Fehlwerte (NA) werden über die Funktion na.omit(...) ausgeschlossen und relevante Variablen in den Spalten 11 bis 20 fokussiert:

```
data <- na.omit(bfi[c(11:20)])  
dim(data)  
summary(data)
```



# Komplexitätsreduktion

- Variablen der  
Extraversion

- (X<sub>1</sub>) E1
- (X<sub>2</sub>) E2
- (X<sub>3</sub>) E3
- (X<sub>4</sub>) E4
- (X<sub>5</sub>) E5

- Variablen des  
Neurotizismus

- (X<sub>6</sub>) N1
- (X<sub>7</sub>) N2
- (X<sub>8</sub>) N3
- (X<sub>9</sub>) N4
- (X<sub>10</sub>) N5

# Komplexitätsreduktion

- Fasst man die Variablen von Extraversion zusammen, lässt sich das arithmetische Mittel des Sum-menscores über die Funktion mean(...) aufrufen:

```
# Summenscores vergleichen  
extraversion_sum <-  
(data$E1+data$E2+data$E3+data$E4+data$E5)/5  
mean(extraversion_sum)
```

# Komplexitätsreduktion

- Analog ist dies für Neurotizismus über die Funktion mean(...) möglich:

```
neuroticism_sum <-  
(data$N1+data$N2+data$N3+data$N4+data$N5)/5  
mean(neuroticism_sum)
```

- Die arithmetischen Mittel unterscheiden sich

# Komplexitätsreduktion

- Zusätzlich bestätigt die Funktion cor(...), dass die Variablen stärker innerhalb ihrer theoretischen Konstrukte korrelieren:

```
# Bivariate Statistik  
cor_matrix <- cor(data)  
corrplot(cor_matrix)
```

# Komplexitätsreduktion

- Schließlich führen die Funktionen fa.parallel(...) und fa(...) zur Faktorenanalyse:

```
# Faktorenanalyse
```

```
fa.parallel(data, fa="both")
```

```
factors <- fa(data, nfactors=2, rotate="varimax")
```

```
factors
```

# Komplexitätsreduktion

- Die Funktion plot(...) visualisiert die Befunde:  
*plot(factors)*
- Faktorenanzahl und Rotationsverfahren lassen sich über die Funktion fa(...) variieren, sollten aber theoretisch begründet werden können:

*fa(data, nfactors=3, rotate="varimax")*

# Komplexitätsreduktion

- Auswahl an Rotationsverfahren
  - Varimax (Reduktion der Varianz)
  - Promax (wie Varimax mit Standardisierung)
- Rotationsverfahren drehen das zugrundeliegende Koordinatensystem, bis ein Kriterium erfüllt wird (bspw. Anzahl an Faktoren)

# Komplexitätsreduktion

- Tipp: Ein Abgleich der Faktorenanalyse mit den Befunden der ursprünglichen Studie ist über die Funktion help(...) möglich:

*help(bfi)*



# Komplexitätsreduktion

- Für die Clusteranalyse steht das Package CLUSTER zur Verfügung, welches nach erfolgreicher Installation über die Funktion library(cluster) aufgerufen wird:

```
# Funktionsumfang von R erweitern  
library(cluster)
```

# Komplexitätsreduktion

- Hierbei wird auf den bereits bekannten IRIS Datensatz und die Variablen zu den Schwertlilienarten setosa, versicolor und virginica zurückgegriffen

# Komplexitätsreduktion

- Variablen im IRIS Datensatz
  - $(x_1)$  Sepal.Length
  - $(x_2)$  Sepal.Width
  - $(x_3)$  Petal.Length
  - $(x_4)$  Petal.Width
  - $(Y)$  Species < - - - Cluster (!)

# Komplexitätsreduktion

- Die Funktionen dim(...) und summary(...) beschreiben den IRIS Datensatz:

```
# Deskriptive Statistik  
dim(iris)  
summary(iris)
```

# Komplexitätsreduktion

- Mittels z-Transformation und der Funktion scale(...) werden die unabhängigen Variablen standardisiert:

```
# Relevante Variablen z-transformieren  
cluster_data <- scale(iris[c(1:4)])  
summary(cluster_data)
```

# Komplexitätsreduktion

- Danach werden über die Funktion sum(...) die Within Cluster Sum of Squares (WSS) herangezogen, um die Anzahl an Clustern zu ermitteln:

```
# Within Cluster Sum of Squares (WSS) ermitteln  
wss <- (nrow(cluster_data)-  
1)*sum(apply(cluster_data,2,var))  
for (i in 2:10) wss[i] <- sum(kmeans(cluster_data,  
centers=i)$withinss)
```

# Komplexitätsreduktion

- Die WSS lassen sich über die Funktion plot(...) wieder entsprechend visualisieren:

```
# Grafische Darstellung der Anzahl an Clustern (WSS)  
plot(1:10, wss, type="c", xlab="Cluster", ylab="WSS",  
main="Clusteranzahl in Abhängigkeit von WSS")
```

# Komplexitätsreduktion

- Mit der entsprechenden Anzahl an Clustern wird die Clusteranalyse bspw. über die Funktion kmeans(...) aufgerufen:

```
# K-Means Algorithmus anwenden  
k_means_cluster <- kmeans(iris[,-5], 3, nstart=30)  
clusplot(iris, k_means_cluster$cluster, color=TRUE,  
shade=TRUE, lines=0)
```



# Komplexitätsreduktion

- Die Präzision der Clusteranalyse lässt sich über die Funktion table(...) überprüfen:

```
# Präzision des K-Means Algorithmus  
table(iris$Species, k_means_cluster$cluster)
```

# (III) DATENANALYSE

## 5. Übungsaufgabe



# 5. Übungsaufgabe

- Diese Übungsaufgabe orientiert sich am Beispiel zum BFI Datensatz
- Diesmal sind alle fünf Faktoren mittels Faktorenanalyse zu identifizieren

# 5. Übungsaufgabe

- Alle benötigten Informationen sind bereits in der Übungsaufgabe enthalten und können ggfls. über die Funktion help(...) spezifiziert werden:

*help(bfi)*

- Tipp: Die Packages PSYCH und CORRPLOT setzen Dependencies voraus (!)

# (IV) MACHINE LEARNING

## Theoretische Einführung



# Theoretische Einführung

- Die in einem Datensatz enthaltenen Informationen werden für automatisierte Verallgemeinerungen herangezogen
- Dazu werden die im Datensatz enthaltenen Informationen in erlernbare Beispiele überführt

# Theoretische Einführung

- Algorithmen sollen dabei Muster und Gesetzmäßigkeiten über die erlernbaren Beispiele hinaus identifizieren können
- Algorithmen sind Handlungsvorschriften, oftmals unter Rückgriff auf statistische Formeln

# Theoretische Einführung

- Beim Machine Learning sind zwei Vorgehensweisen voneinander zu unterscheiden
  - Supervised Machine Learning
  - Unsupervised Machine Learning



# Theoretische Einführung

- Beim Supervised Machine Learning werden Input und Output definiert und mittels Algorithmen in ein Modell überführt
- Dieses Modell soll den Output vorhersagen
  - Prediction (bspw. Lineare Regression)
  - Classification (bspw. Logistische Regression)

# Theoretische Einführung

- Beim Unsupervised Machine Learning versuchen die Algorithmen zunächst Muster und Gesetzmäßigkeiten zu erfassen und daraufhin in ein Modell zu überführen
  - Dimensionality Reduction (bspw. Faktorenanalyse)
  - Clustering (bspw. Clusteranalyse)

# Theoretische Einführung

- Mögliche Anwendungsgebiete
  - Bilderkennung (bspw. auf dem Smartphone)
  - Sentiment Analysis (bspw. auf Social Media)
  - eMail Klassifizierung (bspw. SPAM identifizieren)

# (IV) MACHINE LEARNING

## Praktische Einführung



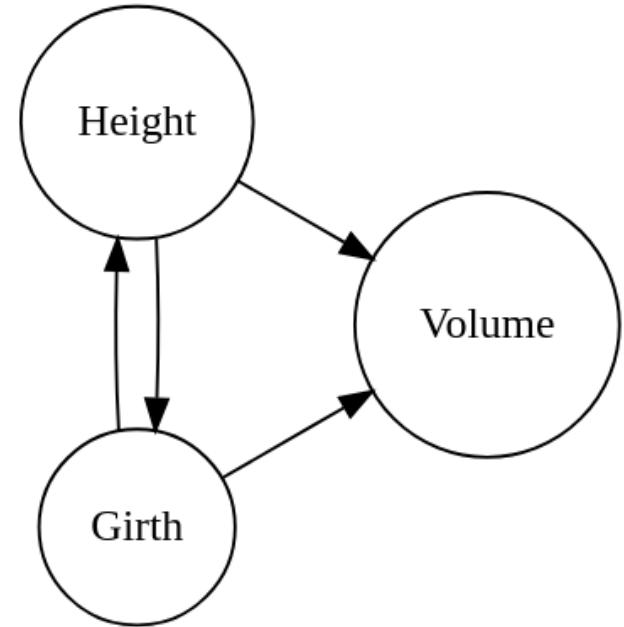
# Praktische Einführung

- Für die praktische Einführung wird erneut auf den bereits bekannten TREES Datensatz zurückgegriffen
- Die Funktion dim(...) gibt dabei Auskunft über die Anzahl der enthaltenen Fälle:

`dim(trees)`

# Praktische Einführung

- Ein Algorithmus soll ausgehend von ausgewählten Fällen ein Modell zur Vorhersage des Volumens ermöglichen



# Praktische Einführung

- Über die Funktion subset(...) werden die Fälle 1 bis 5 sowie 26 bis 30 ausgewählt:

```
# Trainingsdatensatz anlegen  
subset1 <- subset(trees[1:5,])  
subset2 <- subset(trees[26:30,])
```

# Praktische Einführung

- Die beiden Subsets werden über die Funktion rbind(...) zu einem Trainingsdatensatz zusammengefasst:

```
training_data <- rbind(subset1, subset2)  
training_data
```

- Der Algorithmus lernt am Trainingsdatensatz



# Praktische Einführung

- Die verbleibenden Fälle 6 bis 25 sowie 31 werden über die Funktion subset(...) für den Validierungsdatensatz ausgewählt:

```
# Validierungsdatensatz anlegen  
subset3 <- subset(trees[6:25,])  
subset4 <- subset(trees[31,])
```

# Praktische Einführung

- Der über die Funktion `rbind(...)` zusammengefasste Validierungsdatensatz ist somit kleiner als der Trainingsdatensatz:

```
validation_data <- rbind(subset3, subset4)  
validation_data
```

# Praktische Einführung

- Der Trainingsdatensatz ist in der Regel größer als der Validierungsdatensatz
  - 70 % Trainingsdatensatz
  - 30 % Validierungsdatensatz
- Oftmals wird zusätzlich ein unabhängiger Testdatensatz zur Überprüfung eingesetzt

# Praktische Einführung

- Anhand der Trainingsdaten und unter Rückgriff auf Algorithmen wird ein Modell aufgesetzt
  - Algorithmus (bspw. eine lineare Regression)
  - Modell (bspw. Befunde einer linearen Regression)
- Anhand des Validierungsdatensatzes lässt sich das Modell überprüfen

# Praktische Einführung

- Für den TREES Datensatz eignet sich eine lineare Regression über die Funktion lm(...) zur Vorhersage der Variable Volume:

```
# Lineares Regressionsmodell als Algorithmus  
algorithm <- lm(data=training_data, Volume~Girth+Height)
```

# Praktische Einführung

- Eine Überprüfung ermöglicht die Funktion `predict(...)`, welche die Befunde der linearen Regression auf die Merkmalsausprägungen des Validierungsdatensatzes anwendet:

```
# Algorithmus auf Validierungsdatensatz anwenden  
validation <- predict(algorithm, validation_data)
```

# Praktische Einführung

- Die Unterschiede zwischen den tatsächlichen Merkmalsausprägungen und den vorhergesagten Werten verdeutlicht die durchschnittliche Differenz über die Funktion mean(...):

```
difference <- validation_data-validation  
mean(difference$Volume)
```

# Praktische Einführung

- Die Präzision lässt sich über einen Vergleich der durchschnittlichen Differenz mit der Standardab-weichung über die Funktion sd(...) abschätzen:  
`sd(trees$Volume)`
- Weniger Abweichungen als bei der Standardabweichung sind ein präzises Modell



## (IV) MACHINE LEARNING

### CARET Package



# CARET Package

- Das Package CARET stellt Algorithmen zum Classification and Regression Training in RStudio bereit
- Die Installation erfordert Dependencies und nimmt etwas mehr Zeit in Anspruch (!)

# CARET Package

- Die Installation und Aktivierung erfolgt über die Funktionen install.packages(...) und library(...):

```
# Zusatzprogramm CARET installieren und aktivieren  
install.packages("caret", dependencies=TRUE)  
library(caret)
```

# CARET Package

- Im nächsten Schritt werden über den Zuweisungspfeil die unabhängigen (x) und abhängigen Variablen (y) als Features definiert:

```
# Features anlegen  
x <- iris[,1:4]  
y <- iris[,5]
```

# CARET Package

- Die Funktion featurePlot(...) visualisiert die Merkmalsausprägungen der unabhängigen Variablen in Bezug auf die Schwertlilienarten:

```
# Grafische Darstellung der Features  
featurePlot(x=x, y=y, plot="box")
```

# CARET Package

- Über die Funktion shapes(...) kann den Schwertlilienarten ein Symbol zur besseren Unterscheidung zugewiesen werden:

```
# Grafische Darstellung: SEPAL.WIDTH und SEPAL.LENGTH  
shapes=c(1,0,20)  
shapes <- shapes[as.numeric(iris$Species)]
```

# CARET Package

- Die Funktionen plot(...) und legend(...) visualisieren das Zusammenspiel der unabhängigen Variablen:

```
plot(x=iris$Sepal.Length, y=iris$Sepal.Width, frame=FALSE,  
xlab="Sepal Length", ylab="Sepal Width", pch=shapes)  
legend("topright", legend=levels(iris$Species), pch=c(1,0,20))
```

# CARET Package

- Das Package CARET ermöglicht über die Funktion createDataPartition(...) die Erstellung eines Trainings- und Validierungsdatensatzes:

```
# Training Data und Validation Data anlegen  
validation_index <- createDataPartition(iris$Species, p=0.80,  
list=FALSE)  
validation <- iris[-validation_index,]  
training <- iris[validation_index,]
```



# CARET Package

- Trainings- und Validierungsdatensatz können über die Funktion summary(...) inspiziert werden:

```
# Training Data und Validation Data einsehen  
summary(validation)  
summary(training)
```

# CARET Package

- Im nächsten Schritt erfordert das Package CARET die Spezifizierung einer Validierungsmethode
- Bei der Kreuzvalidierung wird die Vorhersagegenauigkeit eines Modells über Teilmengen des Datensatzes in mehreren Schritten überprüft

# CARET Package

- Eine Kreuzvalidierung über zehn Schritte wird mit der Funktion trainControl(...) spezifiziert:

```
# Validierung festlegen  
control <- trainControl(method="cv", number=10)  
metric <- "Accuracy"
```

# CARET Package

- Schließlich werden verschiedene Machine Learning Algorithmen aufgerufen
  - Linear Discriminant Analysis (LDA)
  - K-Nearest-Neighbor (KNN)
  - Random Forest (RF)

# CARET Package

- Der LDA-Algorithmus versucht die aus den Merkmalsausprägungen zwei unabhängiger Variablen bestehenden Datenpunkte mittels einer linearen Funktion voneinander zu trennen

# CARET Package

- Über die Funktion train(...) wird der LDA-Algorithmus aufgerufen:

```
# Linear Discriminant Analysis trainieren  
fit.Ida <- train(Species~., data=training, method="lda",  
metric=metric, trControl=control)
```

# CARET Package

- Der KNN-Algorithmus verbindet naheliegende Datenpunkte ausgehend von ihrem Schwerpunkt der Verteilung und trennt diese von weiter entfernt liegenden Datenpunkten

# CARET Package

- Über die Funktion train(...) wird der KNN-Algorithmus aufgerufen:

```
# K-Nearest Neighbor trainieren  
fit.knn <- train(Species~., data=training, method="knn",  
metric=metric, trControl=control)
```



# CARET Package

- Der RF-Algorithmus kombiniert die Ergebnisse verschiedener Entscheidungsbäume durch Variation einzelner Bedingungen unter den Merkmalsausprägungen, um bestmögliche Entscheidungen zu treffen

# CARET Package

- Schließlich wird auch der RF-Algorithmus über die Funktion train(...) aufgerufen:

```
# Random Forest trainieren  
fit.rf <- train(Species~., data=training, method="rf",  
metric=metric, trControl=control)
```

# CARET Package

- Das Abschneiden der Algorithmen kann zunächst über die Funktion resample(...) aufgerufen und zwischengespeichert werden:

```
# Vergleich der Machine Learning Algorithmen  
results <- resamples(list(lda=fit.lda, knn=fit.knn, rf=fit.rf))
```

# CARET Package

- Über die Funktionen summary(...) und dotplot(...) ist ein Vergleich der Algorithmen möglich:

*summary(results)*

*dotplot(results)*

# CARET Package

- Ist die Entscheidung für einen Algorithmus gefallen, kann dieser über die Funktion print(...) im Detail analysiert werden:

```
# Fokus auf besten Algorithmus  
print(fit.lda)
```

# CARET Package

- Die Validitätsüberprüfung erfolgt schließlich über die Funktionen predict(...) und confusionMatrix(...):

```
# Algorithmus auf Validation Data anwenden  
predictions <- predict(fit.Ida, validation)  
confusionMatrix(predictions, validation$Species)
```

# Obligatorischer Exkurs

- Weitere Datensätze, viele davon für Machine Learning Algorithmen geeignet, sind online zur kostenlosen Nutzung hinterlegt
  - <https://www.kaggle.com/datasets/>
  - [https://openpsychometrics.org/\\_rawdata/](https://openpsychometrics.org/_rawdata/)

# (IV) MACHINE LEARNING

## 6. Übungsaufgabe





# 6. Übungsaufgabe

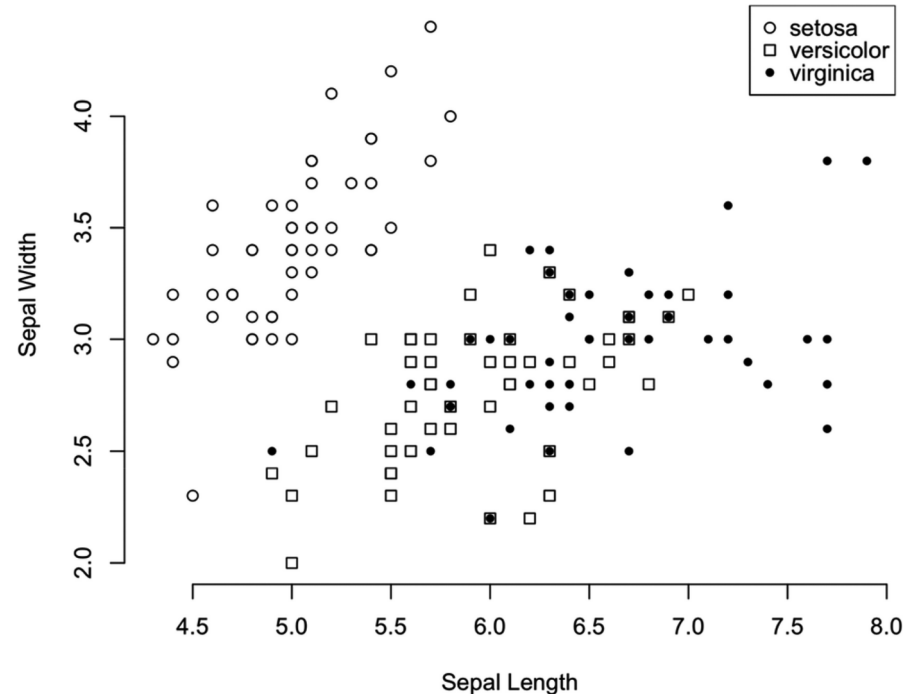
- Diese Übungsaufgabe reproduziert die zuvor vorgestellten Schritte zur Anwendung von Machine Learning Algorithmen am IRIS Datensatz
- Ziel: Der beste Machine Learning Algorithmus ist zu bestimmen

# 6. Übungsaufgabe

- Variablen im IRIS Datensatz
  - $(x_1)$  Sepal.Length < - - - Feature (!)
  - $(x_2)$  Sepal.Width < - - - Feature (!)
  - $(x_3)$  Petal.Length < - - - Feature (!)
  - $(x_4)$  Petal.Width < - - - Feature (!)
  - $(Y)$  Species

# 6. Übungsaufgabe

- Erinnerung an die Herausforderung:  
Schwertlilienarten  
können in Länge und  
Breite ihrer Blätter  
übereinstimmen



## 6. Übungsaufgabe

- Zusatzaufgabe: Wie schneiden die Machine Learning Algorithmen im Vergleich zu der Lösung aus der 1. Übungsaufgabe ab?

## (IV) MACHINE LEARNING

# Resampling



# Resampling

- Machine Learning Algorithmen können nur im Rahmen der vorgegebenen Datensätze (oftmals Stichproben) trainiert werden
- Ein Bias in den Daten führt demnach zu einem Bias des Modells

# Resampling

- Mit Resampling werden Verfahren bezeichnet, die auf Basis einer Stichprobe wiederholt kleine Stichproben generieren
- Demnach werden statistische Kennwerte nicht einmalig berechnet, sondern für die Anzahl der wiederholten Stichproben gemittelt

# Resampling

- Bewährte Resamplingverfahren sind die Permutationstests und das Bootstrapping
  - Permutationstest: Variation der Reihenfolge aller Fälle einer Stichprobe zur Abschätzung der p-Werte
  - Bootstrapping: Wiederholte Ziehung einzelner Fälle einer Stichprobe mit Zurücklegen zur Abschätzung der weiteren statistischen Kennwerte



# Resampling

- Für Machine Learning Algorithmen sind insbesondere die weiteren statistischen Kennwerte von Bedeutung
- Bootstrapping: Beispiel zum Regressionsgewicht bei der linearen Regression

# Resampling

- Bestimmung des Regressionsgewichtes im MTCARS Datensatz über die Funktion lm(...):

```
# Lineare Regression
```

```
lm(mtcars$mpg~mtcars$wt)
```

- Regressionsgewicht ( $b_{\text{Regression}}$ ) einmalig ermittelt

# Resampling

- Zur Vorbereitung des Resamplingverfahrens und zur Reproduzierbarkeit der Befunde wird auf die Funktion set.seed(...) zurückgegriffen:

```
# Resampling  
set.seed(1701)
```

# Resampling

- Das Resampling (R) soll 1.000-fach wiederholt werden und als Regressionsgewicht ( $b_{\text{Bootstrap}}$ ) angelegt werden:

```
R <- 1000
```

```
b <- vector(length=R)
```

# Resampling

- Eine entsprechende Bootstrapping-Funktion:

```
for(i in 1:R){  
  boot.data <-  
  mtcars[sample(1:nrow(mtcars),size=100,replace=T),]  
  boot.result <-  
  summary(lm(boot.data$mpg~boot.data$wt))  
  b[i] <- boot.result$coefficients[2,1]  
}
```

# Resampling

- Die Summe aller Regressionsgewichte ( $b_{\text{Bootstrap}}$ ) kann daraufhin über die Funktion summary(...) aufgerufen werden:

*summary(b)*

# Resampling

- Die Funktionen plot(...) und abline(...) stellen  $b_{\text{Reg}}$  und  $b_{\text{Bootstrap}}$  gegenüber:

```
# Verteilung der Regressionsgewichte  
plot(density(b), main="Stichprobenwiederholung der  
Regressionsgewichte", ylim=c(0.05,1.25), xlim=c(-7,-3.5))  
abline(0,0,0,-5.344, col="red")
```

# Resampling

- Mit der Funktion legend(...) wird eine entsprechende Legende hinzugefügt:

```
legend("topright", inset=.01, legend=c("b-coefficient  
(original) = -5.344"), col=c("red"), box.lty=0, lty=1:2,  
cex=1.0)
```



# Resampling

- Tipp: Resamplingverfahren tragen nicht nur im Rahmen des Machine Learnings zur besseren Interpretation statistischer Kennwerte bei

# Obligatorischer Exkurs

- Tipp: Die Bootstrapping-Funktion lässt sich entsprechend adaptieren:
  - 1. Zusatzaufgabe: p-Werte für  
`t.test(ToothGrowth$len~ToothGrowth$supp)`
  - 2. Zusatzaufgabe: Chi-Quadrat-Werte für  
`mtcars$binary_mpg <- ifelse(mtcars$mpg<=20,1,0)`  
`chisq.test(mtcars$binary_mpg,mtcars$vs)`

# (IV) MACHINE LEARNING

## Herausforderungen



# Herausforderungen

- Die von den Machine Learning Algorithmen verwendeten Muster und Gesetzmäßigkeiten entsprechen nicht immer einer theoretischen Fundierung oder basieren auf einem realen Phänomen

# Herausforderungen

- Schließlich gilt: Korrelation  $\neq$  Kausalität
- Herausforderungen beim Machine Learning
  - Unzureichende Datenqualität
  - Übermäßige Optimierung
  - Limitationen bei der Durchführung
  - Fehlende Mathematik- und Statistikkenntnisse

# Herausforderungen

- Unzureichende Datenqualität
  - Statistische Kennwerte und Machine Learning Algorithmen sind nur unter Berücksichtigung der Datenqualität angemessen interpretierbar
  - Fokus auf die univariate Statistik in Bezug auf die relevanten Variablen (Verteilung, Fehlwerte, etc.)

# Herausforderungen

- Übermäßige Optimierung
  - Weniger Präzision der Machine Learning Algorithmen in Bezug auf die Trainings- und Validierungsdatensätze kann von Vorteil sein
  - Es gilt: Ein flexibler Dietrich ist manchmal besser als ein starrer Schlüssel

# Herausforderungen

- Limitationen auf einen Algorithmus / Trainings- und Validierungsdatensatz
  - Der Vergleich verschiedener Algorithmen beinhaltet wertvolle Informationen zur Interpretation
  - Resampling vermag die Varianz eines realen Phänomens besser abzubilden als ein einmaliger Datensatz / eine einmalige Stichprobe



# Herausforderungen

- Fehlende Mathematik- / Statistikkenntnisse
  - Die zugrundeliegenden Analyseverfahren, bspw. die Faktorenanalyse, sind primär der mathematischen Statistik zuzuordnen
  - Bei Herausforderungen in der Anwendung empfiehlt sich ein Verständnis der zugrundeliegenden Funktionsweise, bspw. dem Rechnen mit Vektoren

# Herausforderungen

- Tipp: In vielen Fällen führen die klassischen Analyseverfahren aus der Statistik, bspw. die lineare Regression, zu verlässlichen Befunden
- Machine Learning Algorithmen sind demnach nicht immer erforderlich

# Herausforderungen

- Schließlich lauten zwei der wichtigsten Regeln für eine zielführende Datenanalyse mit R
  - Prediction is only as good as the sum of its parts
  - KISS: Keep It Short & Simple (!)

ANHANG

# Fakultativer Exkurs

# Fakultativer Exkurs

- Tipp: Weiterführende Kursempfehlungen
  - <https://www.coursera.org/>
    - Mathematics for Machine Learning  
(Imperial College London)
    - Data Science Specialization  
(Johns Hopkins University)
    - Machine Learning  
(Stanford Online)

Nicht klausurrelevant (!)

# Fakultativer Exkurs

- Simpson-Paradoxon:

```
x <- c(3, 4, 5, 7, 8, 9)
y <- c(8, 9, 10, 2, 3, 4)
simpson <- data.frame(x, y)
plot(simpson, ylim=c(1, 11), xlim=c(1, 11))
abline(lm(data=simpson, y~x))
abline(lm(data=simpson[c(1, 2, 3),], y~x), col="red")
abline(lm(data=simpson[c(4, 5, 6),], y~x), col="green")
legend(8, 10.5, legend=c("Gruppe A", "Gruppe B"),
col=c("red", "green"), lty=1)
```

Nicht klausurrelevant (!)

# Fakultativer Exkurs

- Parallelen zwischen t-Test und linearer Regression:

```
t.test(ToothGrowth$len~ToothGrowth$supp)  
lm(ToothGrowth$len~ToothGrowth$supp)
```

- Mittelwert der Gruppe 0 entspricht dem Schnittpunkt mit der y-Achse (a)
- Differenz zwischen Gruppe 0 und Gruppe 1 entspricht der Steigung der Regressionsgeraden ( $b_1$ )

Nicht klausurrelevant (!)

# Fakultativer Exkurs

- Moderationseffekt (Teil 1):

```
set.seed(1701)
data <- data.frame(
  fan = rep(c("Star Wars", "Star Trek"), each = 30),
  nerdindex = rep(c("1", "2", "3"), each = 10, times = 2),
  tvindex = c(runif(10, -3, 3), runif(10, 0, 5), runif(10, 4, 6),
    runif(10, -4, 2), runif(10, 0, 3), runif(10, 5, 8)))
```

Nicht klausurrelevant (!)



# Fakultativer Exkurs

- Moderationseffekt (Teil 2):

```
interaction.plot(x.factor = data$nerdindex,  
trace.factor = data$fan, response = data$tvindex,  
fun = median, main = "Moderationseffekt (Schnittstelle)",  
ylab = "TV-Index (Stunden pro Tag)",  
xlab = "Nerd-Index (1=klein, 2=mittel, 3=groß)",  
col = c("red", "blue"), lty = 2, lwd = 2,  
trace.label = "Franchise")
```

Nicht klausurrelevant (!)

# Fakultativer Exkurs

- Moderationseffekt (Teil 3):
  - Schnittpunkte in der Interaktionsgrafik deuten an, dass zwischen den Variablen nerdindex und fan ein Moderationseffekt vorliegt
  - Dies wird in der Funktion lm(...) berücksichtigt:  
`summary(lm(data=data, tvindex~nerdindex*fan))`

Nicht klausurrelevant (!)

# Fakultativer Exkurs

- Plot der ersten Seite (Cover):

```
library(mgcv)
library(lattice)
x <- rnorm(100)
y <- rnorm(100)
z <- rnorm(100)
tab <- data.frame(x,y,z)
mod <- gam(z~te(x,y), data=tab)
z <- matrix(fitted(mod), ncol=10)
wireframe(z, drape=TRUE, colorkey=TRUE)
```

Nicht klausurrelevant (!)

*The End*