

# Blockpraktikum zur Statistik mit R

17. September 2014

Johannes Blank

## Beispiel: Ausgangsfrage

- ▶ Wie wirkt sich die eingesetzte Menge des Düngers auf den Ernteertrag aus?
- ▶ Wie stark ist der Zusammenhang zwischen der eingesetzten Menge eines Düngemittels und der Erntemenge?

### Ziel:

- ▶ **Quantifizierung des Zusammenhangs** zweier Merkmalsausprägungen

# Gliederung

## 1 Lineare Zusammenhänge erkennen

- Korrelationskoeffizienten
- Korrelation vs. Kausalität

## 2 Lineare Regressionsmodell

- Methode der kleinsten Quadrate
- Residuenanalyse und Bestimmtheitsmaß

## 3 Multiple lineare Regression

- Die Modellierung
- Der KQ-Schätzer

## 4 Logit Modelle

- Modellierung binärer Regression
- Beispiel und Parameterschätzung

# Gliederung

## 1 Lineare Zusammenhänge erkennen

- Korrelationskoeffizienten
- Korrelation vs. Kausalität

## 2 Lineare Regressionsmodell

- Methode der kleinsten Quadrate
- Residuenanalyse und Bestimmtheitsmaß

## 3 Multiple lineare Regression

- Die Modellierung
- Der KQ-Schätzer

## 4 Logit Modelle

- Modellierung binärer Regression
- Beispiel und Parameterschätzung

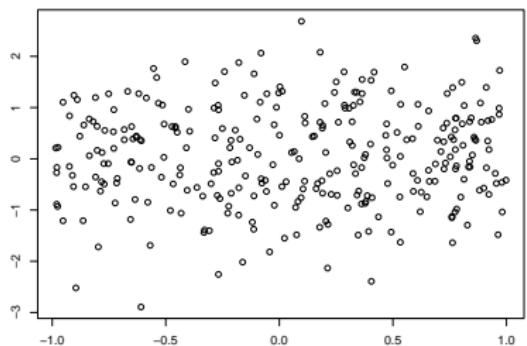
# Lineares Modell

**Modellannahme:** Zwischen zwei Merkmalen  $X$  und  $Y$  besteht ein *zufällig gestörter* funktionaler Zusammenhang der Form

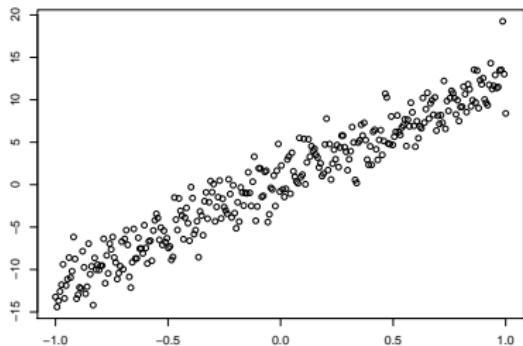
$$Y = f(X) + \epsilon$$

- ▶  $Y$  ist im Wesentlichen eine *deterministische lineare* Funktion von  $X$
- ▶ Der *zufällige Fehler*  $\epsilon$  geht additiv in das Modell ein
- ▶ Gilt  $Y_i = \alpha + \beta X_i + \epsilon_i \rightsquigarrow$  (einfaches) Lineares Regressionsmodell
- ▶ Gilt  $Y_i = \alpha + \beta_1 X_i^1 + \dots + \beta_p X_i^p + \epsilon_i \rightsquigarrow$  Polynomiale Regression
- ▶ Gilt  $Y_i = \alpha + \beta_1 X_{i,1} + \dots + \beta_p X_{i,p} + \epsilon_i \rightsquigarrow$  Multiple lineare Regression
- ▶ Streudiagramm der Daten: Gibt Hinweis auf einen Zusammenhang

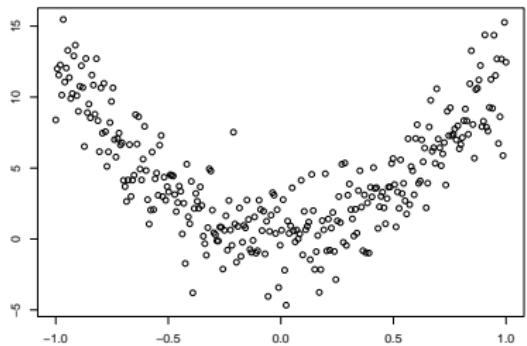
Kein Zusammenhang



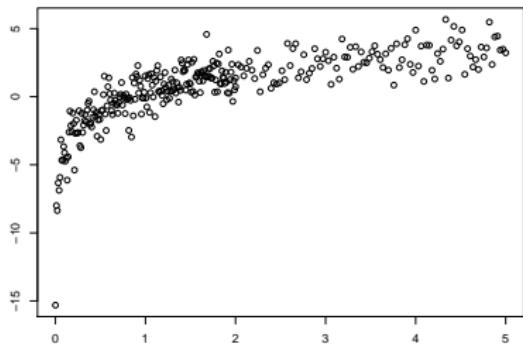
Linearer Zusammenhang



Quadratischer Zusammenhang



logistischer Zusammenhang



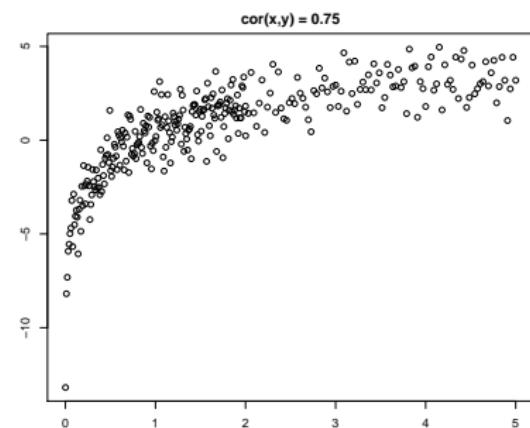
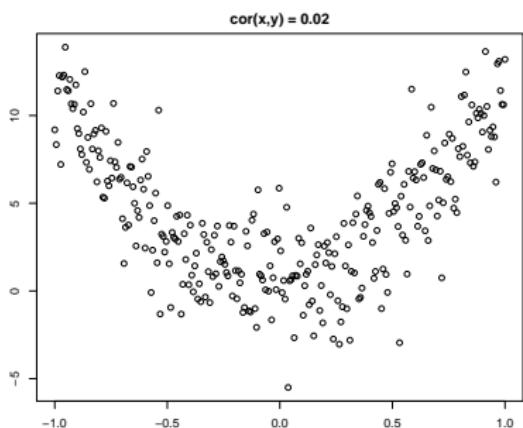
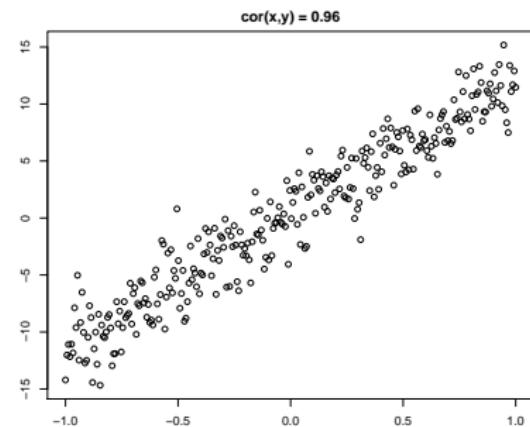
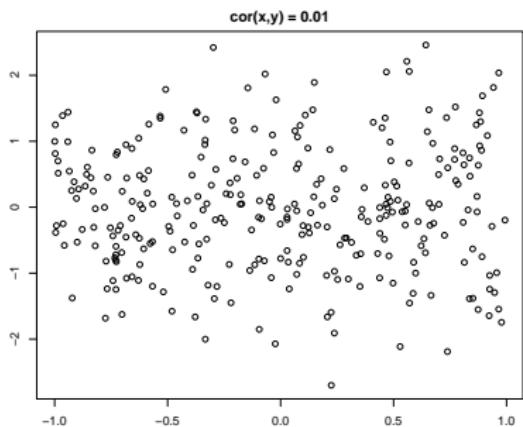
# Bravais-Pearson-Korrelationskoeffizient

Bei linearem Zusammenhang ist der *empirische Korrelationskoeffizient* (auch *Bravais-Pearson-Korrelationskoeffizient*) ein Maß für die Stärke des Zusammenhangs:

$$r := r_{xy} := \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}$$

für Beobachtungen  $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ .

- ▶  $r > 0$  deutet auf *gleichsinnigen* linearen Zusammenhang (d.h. die Werte liegen um eine Gerade mit positiver Steigung)
- ▶  $r < 0$ : *gegensinniger* linearen Zusammenhang
- ▶  $r = 0$ : unkorreliert, kein linearer Zusammenhang



# Eigenschaften von $r$

- ▶  $r$  ist das empirische Gegenstück zum theoretischen Korrelationskoeffizienten (Ersetzung der (Ko)Varianzen durch empirische Gegenstücke)
- ▶  $r$  nimmt Werte in  $[-1, 1]$  an
- ▶  $|r| = 1$ : Punkte liegen genau auf einer Geraden
- ▶ Berechnung in R mit `cor(x, y)`

Grobes Einteilungsraster von Korrelationen:

„schwache Korrelation“	$ r  < 0.5$
„mittlere Korrelation“	$0.5 \leq  r  < 0.8$
„starke Korrelation“	$0.8 \leq  r $

# Spearman'scher Korrelationskoeffizient

Bei Vermutung auf monotonen Zusammenhang  $\rightsquigarrow$  bilde *Spearman'schen Korrelationskoeffizient* (robuster als Bravais-Pearson)

$$r_{SP} = \frac{\sum_{i=1}^n (\text{rg}(x_i) - \bar{\text{rg}}_x)(\text{rg}(y_i) - \bar{\text{rg}}_y)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\text{rg}(x_i) - \bar{\text{rg}}_x)^2 \sum_{i=1}^n (\text{rg}(y_i) - \bar{\text{rg}}_y)^2}} \quad (= r_{\text{rg}(x) \text{ rg}(y)})$$

wobei  $\text{rg}(x_i) = \text{Rang von } x_i$ ,  $\text{rg}(x) = (\text{rg}(x_1), \dots, \text{rg}(x_n))$  der Vektor der Ränge von  $x$  und  $\bar{\text{rg}}_x = n^{-1} \sum_{i=1}^n \text{rg}(x_i) = (n+1)/2$ .

- ▶  $r_{SP} > 0$ : gleichsinniger monotoner Zusammenhang  
also: „ $x$  groß  $\Leftrightarrow y$  groß“ sowie: „ $x$  klein  $\Leftrightarrow y$  klein“
- ▶  $r_{SP} < 0$ : gegensinniger monotoner Zusammenhang
- ▶  $r_{SP} = 0$ : kein monotoner Zusammenhang
- ▶  $|r_{SP}| = 1$ : Die Punkte  $(\text{rg}(x_i), \text{rg}(y_i))$ ,  $i = 1, \dots, n$  liegen auf einer Geraden

# Spearman'scher Korrelationskoeff.: Bsp & R-Befehle

Für  $x = (7, 5, 9, 6)$  bzw.  $y = (7, 9, 6, 7)$  gilt

- ▶  $\text{rg}(x_1) = 3$  (7 ist drittkleinster Wert in  $x$ )
- ▶  $\text{rg}(x_2) = 1$  (5 ist kleinster Wert in  $x$ )
- ▶  $\text{rg}(y_1) = \text{rg}(y_4) = \frac{2+3}{2} = 2.5$
- ▶ Also:  $\text{rg}(x) = (3, 1, 4, 2)$  bzw.  $\text{rg}(y) = (2.5, 4, 1, 2.5)$
- ▶ Somit:  $r_{\text{SP}} = -0.95$

Die zugehörigen R-Befehle lauten

- ▶ `rank(x)` für die Rang-Statistik von  $x$
- ▶ `cor(x,y,method="spearman")` für  $r_{\text{SP}}$

# Korrelation vs. Kausalität

- ▶ Korrelation erfasst die Stärke von Zusammenhängen, *keine Wirkungen*
- ▶ Kausalzusammenhänge lassen sich nur aus inhaltlichen Überlegungen begründen
- ▶ Dies erfordert tiefere Kenntnisse aus dem entspr. Forschungsgebiet
- ▶ Bsp:  $X$  beeinflusst zwar  $Y$ , aber nicht direkt, sondern über ein direktes Merkmal  $Z$
- ▶ Nichtberücksichtigung von  $Z$  führt dann zu falschen Schlüssen

# Scheinkorrelation

Bei 5 Kindern wurde der Wortschatz  $X$  und die Körpergröße  $Y$  gemessen

$x_i$	37	30	20	28	35
$y_i$	130	112	108	114	136

- ▶ Korrelation ist hoch:  $\text{cor}(x, y) = 0.863$
- ▶ Sachlogisch lässt sich eine Beeinflussung nicht begründen
- ▶ Merkmal Alter ( $Z$ ) muss hier berücksichtigt werden

$z_i$	12	7	6	7	13
-------	----	---	---	---	----

- ▶ Es gilt:  $\text{cor}(x, z) = 0.867$  und  $\text{cor}(y, z) = 0.995$

# Scheinkorrelation

Bei 5 Kindern wurde der Wortschatz  $X$  und die Körpergröße  $Y$  gemessen

$x_i$	37	30	20	28	35
$y_i$	130	112	108	114	136

- ▶ Korrelation ist hoch:  $\text{cor}(x, y) = 0.863$
- ▶ Sachlogisch lässt sich eine Beeinflussung nicht begründen
- ▶ Merkmal Alter ( $Z$ ) muss hier berücksichtigt werden

$z_i$	12	7	6	7	13
-------	----	---	---	---	----

- ▶ Es gilt:  $\text{cor}(x, z) = 0.867$  und  $\text{cor}(y, z) = 0.995$

# Verdeckte Korrelation

Nichtbeachtung eines Merkmals kann Korrelation verschleiern oder das Vorzeichen eines Zusammenhangs ändern:

z.B. Einfluss auf statistische Objekte mit unbeachteten Merkmal Neu ist genau entgegengesetzt bei den Ausprägung A und Ausprägung B. Die Nichtberücksichtigung des Merkmals liefert stattdessen eine Korrelation von 0.

Die Aufgaben 9.1 - 9.3 des Aufgabenblattes können  
jetzt bearbeitet werden.

# Gliederung

## 1 Lineare Zusammenhänge erkennen

- Korrelationskoeffizienten
- Korrelation vs. Kausalität

## 2 Lineare Regressionsmodell

- Methode der kleinsten Quadrate
- Residuenanalyse und Bestimmtheitsmaß

## 3 Multiple lineare Regression

- Die Modellierung
- Der KQ-Schätzer

## 4 Logit Modelle

- Modellierung binärer Regression
- Beispiel und Parameterschätzung

# (homoskedastische) lineare Regression

Einfaches lineares Modell:

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \epsilon_i \quad i = 1, \dots, n$$

wobei

- ▶  $y_1, \dots, y_n$  beobachtbare Werte einer metrischen Zielvariablen (z.B. Ernteertrag)
- ▶  $x_1, \dots, x_n$  gegebene *Kontrollparameter* (z.B. Menge des Düngemittels)
- ▶  $\alpha$  und  $\beta$  unbekannte, zu schätzende Parameter
- ▶  $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$  (unbeobachtbare) Zufallsvariablen mit:
  - ▶  $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$  sind unabhängig
  - ▶  $\mathbb{E}(\epsilon_i) = 0$  für alle  $i$
  - ▶  $\text{Var}(\epsilon_i) = \sigma^2$  für alle  $i$  (*homoskedastisches Verhalten*)

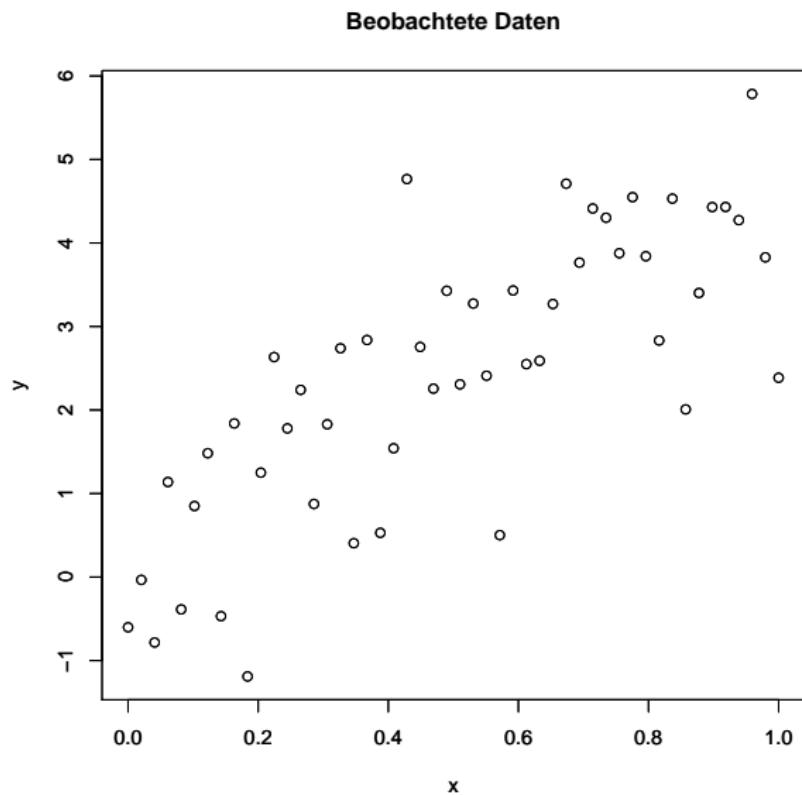
# Methode der kleinsten Quadrate

- ▶ **Ziel:** Schätze anhand der Daten  $x$  und  $y$  die Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  so, dass die Daten „gut an das Modell angepasst sind“
- ▶ Methode der kleinsten Quadrate: Suche  $\hat{\alpha}$ ,  $\hat{\beta}$  mit

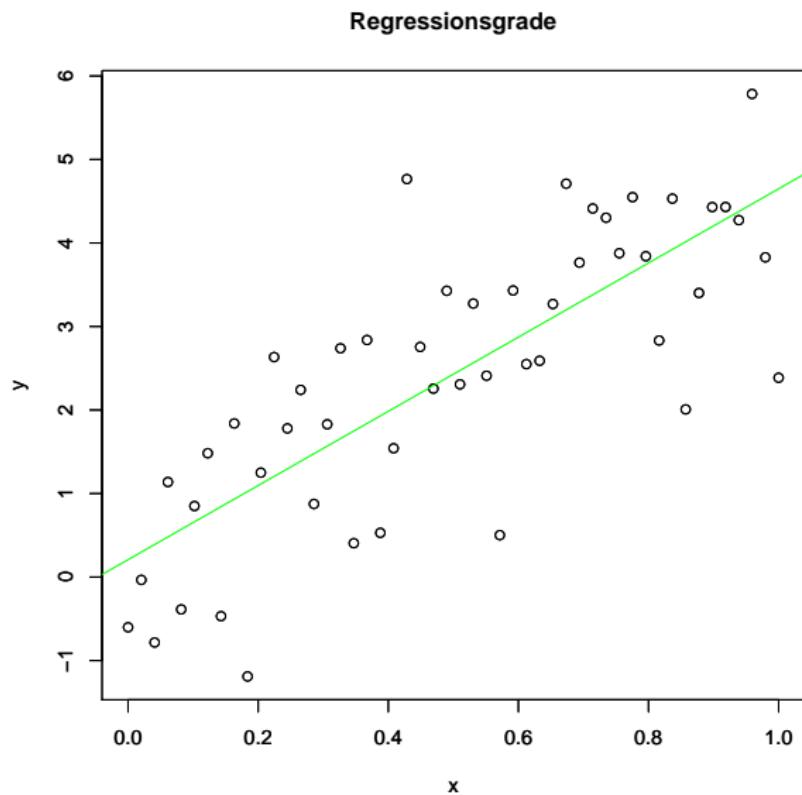
$$\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta}x_i)^2 = \min_{(\alpha, \beta)} \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha - \beta x_i)^2$$

- (summierte) quadratische Abstand zwischen den beobachteten Daten und der Geraden  $x \mapsto \hat{\alpha} + \hat{\beta}x$  ist minimal

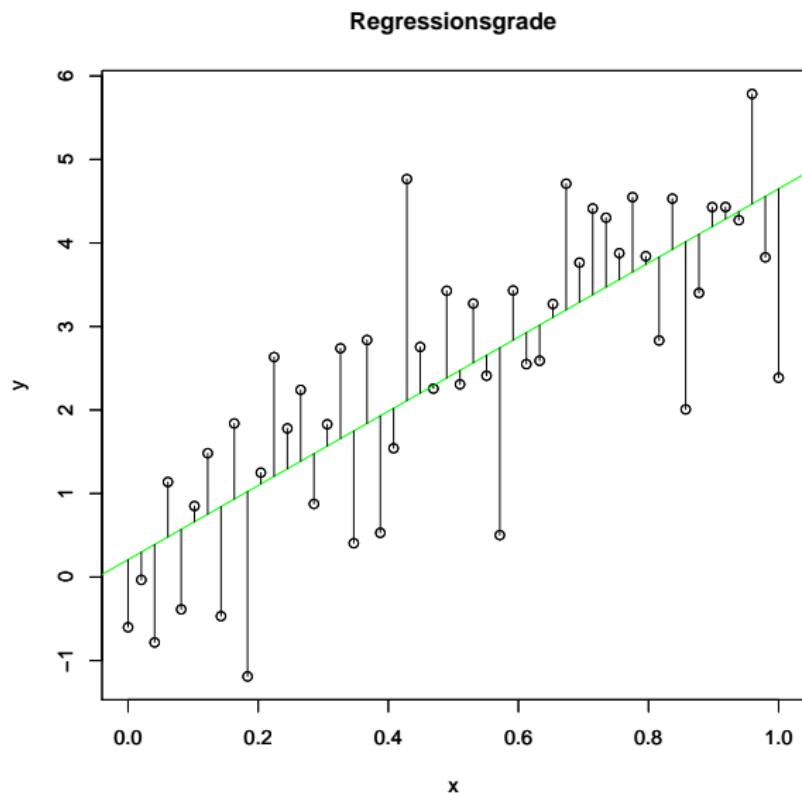
# Regressionsgerade



# Regressionsgerade



# Regressionsgerade



# Kleinste-Quadrat-Schätzer

- ▶ Kurvendiskussion der Funktion  $(\alpha, \beta) \mapsto \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha - \beta x_i)^2$  liefert die *Kleinste-Quadrat-Schätzer (KQS)*  $\hat{\alpha}$  und  $\hat{\beta}$ :

$$\hat{\alpha} = \bar{y} - \hat{\beta} \cdot \bar{x} \quad \text{und} \quad \hat{\beta} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$$

- ▶ Lineare Regression in R: Aufruf von `lm(y~x)`
- ▶ Wenn man sachlogisch  $\alpha = 0$  annimmt: Aufruf `lm(y~x+0)`
- ▶ `lm()` gibt eine spezielle Liste (`lm`-Objekt) zurück, die man besser immer zwischenspeichert
- ▶ Durch den anschließenden Aufruf von `summary(lm)` erhält man eine detaillierte Ausgabe der Modellanpassung
- ▶ Einfügen der Regressionsgerade in das Streudiagramm: `abline(lm)`

# Residuen

- ▶ Abweichungen  $\hat{\epsilon}_i$  zwischen Beobachtungen  $y_i$  und den durch das Modell vorhergesagten  $y$ -Werten  $\hat{y}_i$  nennt man *Residuen*
- ▶ Bei linearer Regression mit KQS:  $\hat{y}_i = \hat{\alpha} + \hat{\beta} \cdot x_i$ , also

$$\hat{\epsilon}_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta} \cdot x_i$$

- ▶ **Ziel:** „Güte des Modells“ anhand der Residuen beurteilen
- ▶ Mögliches Gütemaß: Welcher Anteil der Streuung der  $y_i$  lässt sich durch die Regression erklären? (dieser Wert sollte möglichst groß sein)
- ▶ Gesamtstreuung SQT (*sum of squares total*) ist gegeben durch

$$\text{SQT} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

# Residuen

- ▶ Abweichungen  $\hat{\epsilon}_i$  zwischen Beobachtungen  $y_i$  und den durch das Modell vorhergesagten  $y$ -Werten  $\hat{y}_i$  nennt man *Residuen*
- ▶ Bei linearer Regression mit KQS:  $\hat{y}_i = \hat{\alpha} + \hat{\beta} \cdot x_i$ , also

$$\hat{\epsilon}_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta} \cdot x_i$$

- ▶ **Ziel:** „Güte des Modells“ anhand der Residuen beurteilen
- ▶ Mögliches Gütemaß: Welcher Anteil der Streuung der  $y_i$  lässt sich durch die Regression erklären? (dieser Wert sollte möglichst groß sein)
- ▶ Gesamtstreuung SQT (*sum of squares total*) ist gegeben durch

$$\text{SQT} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

# Streuungszerlegung

- SQT lässt sich wie folgt zerlegen:

$$\text{SQT} = \text{SQE} + \text{SQR}$$

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$$

- SQE  $\hat{=}$  durch das Modell erklärte Abweichungen (*sum of squares explained*)
  - SQR  $\hat{=}$  Streuung der Residuen (*sum of squares residuals*)
- Der Anteil der Streuung der  $y_i$ , der durch die Regression erklärt wird, ist durch SQE / SQT gegeben
- Diesen Wert nennt man das *Bestimmtheitsmaß R<sup>2</sup>*

# Bestimmtheitsmaß $R^2$

Für  $R^2$  gilt

$$R^2 = \frac{\text{SQE}}{\text{SQT}} = 1 - \frac{\text{SQR}}{\text{SQT}}$$

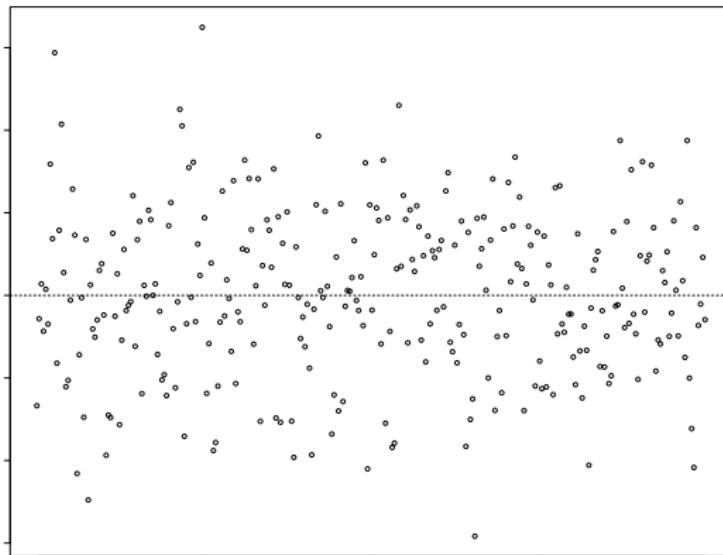
- ▶  $R^2 \in [0, 1]$
- ▶ Zusammenhang mit ▶ Bravais-Pearson-Korrelationskoeffizienten  $r$ :

$$R^2 = r_{x,y}^2 \quad (\text{längere Rechnung})$$

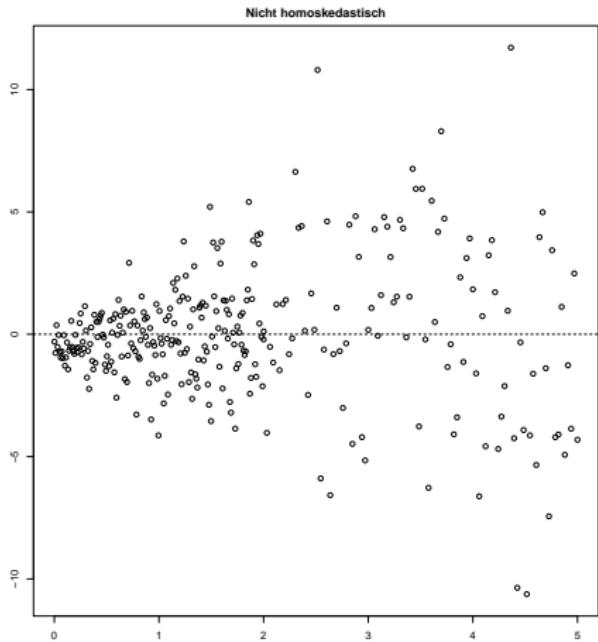
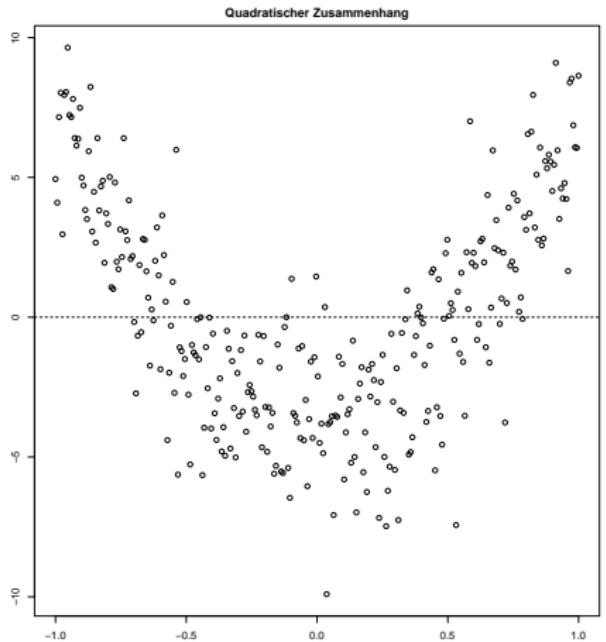
- ▶  $R^2 = 1$  heißt: Daten  $x, y$  liegen auf einer Geraden
- ▶  $R^2 = 0$ : Erklärte Streuung ist 0 (Regressionsmodell ist ungeeignet)

# Residualplots

- ▶ Anhand der Residuen können die Modellannahmen überprüft werden
- ▶ Residuen sollten mit ähnlicher Schwankungsbreite (homoskedastisch) um den Nullpunkt ( $\mathbb{E}(\epsilon_i) = 0$ ) streuen



# Residualplots: Beispiele



## Struktur von lm()

- ▶ Betrachte Körpergröße und Alter von 5 Kindern (siehe Folie 2) und erstelle mit `model<-lm(groesse~alter)` ein lineares Modell
- ▶ `model` ist eine Liste, deren Struktur man sich mit `str(model)` anzeigen lassen kann
- ▶ In `model$coefficients` stehen die KQS
- ▶ In `model$residuals` die Residuen
- ▶ Mit `summary(model)` erhält man eine detaillierte Information über das Modell

# Ausgabe von `summary(model)`

```

Call:
lm(formula = y ~ z)

Residuals:
    1      2      3      4      5 
-1.2857 -0.4762 -0.7143  1.5238  0.9524 

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) 86.1429     1.9967   43.14 2.74e-05 ***
z            3.7619     0.2112   17.81 0.000386 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ',' 1

Residual standard error: 1.369 on 3 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9906, Adjusted R-squared:  0.9875 
F-statistic: 317.3 on 1 and 3 DF,  p-value: 0.0003857

```

- ▶ KQS:  $\hat{\alpha} = 86.1429$ ,  $\hat{\beta} = 3.7619$  (in der Spalte Estimate)
- ▶  $R^2 = 0.9906$  (Multiple R-squared)
- ▶ Es werden Tests durchgeführt, ob die Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  signifikant in das Modell eingehen: Bei vielen Sternchen ist das der Fall, bei keinem Sternchen ist das Modell ungeeignet

Die Aufgaben 9.4. bis 9.6. des Aufgabenblattes  
können jetzt bearbeitet werden.

# Gliederung

## 1 Lineare Zusammenhänge erkennen

- Korrelationskoeffizienten
- Korrelation vs. Kausalität

## 2 Lineare Regressionsmodell

- Methode der kleinsten Quadrate
- Residuenanalyse und Bestimmtheitsmaß

## 3 Multiple lineare Regression

- Die Modellierung
- Der KQ-Schätzer

## 4 Logit Modelle

- Modellierung binärer Regression
- Beispiel und Parameterschätzung

# Multiples Regressionsmodell

## Allgemeine Modellannahme:

$$Y_i = \theta_1 \cdot X_{i,1} + \dots + \theta_p \cdot X_{i,p} + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n$$

bzw. in Matrixnotation

$$\begin{pmatrix} Y_1 \\ \vdots \\ Y_n \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} X_{1,1} & \cdots & X_{1,p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ X_{n,1} & \cdots & X_{n,p} \end{pmatrix}}_{=\mathbf{X}} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} \theta_1 \\ \vdots \\ \theta_p \end{pmatrix}}_{=\boldsymbol{\theta}} + \begin{pmatrix} \epsilon_1 \\ \vdots \\ \epsilon_n \end{pmatrix}$$

mit:

- *Designmatrix  $\mathbf{X}$  hat vollen Rang ( $\Rightarrow \text{rang}(\mathbf{X}) = p \leq n$ )*
- Fehler  $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$  unabh. mit Erwartungswert 0, Varianz  $\sigma^2$

# Spezialfälle des Modells

- ▶ Der Fall  $p = 2$ ,  $X_{i,1} = 1$  für alle  $i$  ist das einfache Lineare Regressionsmodell
- ▶ Den Fall  $X_{i,k} = X_i^k$  nennt man *polynomiales Regressionsmodell*
- ↗ Hier hängt  $Y_i$  polynomial von *einer* Variablen  $X_i$  ab, d.h.

$$Y_i = P(X_i) + \epsilon_i$$

für ein Polynom  $P$  mit Grad  $p$

# KQ-Schätzer für $\theta$

- ▶ Gesucht: „guter“ Schätzer für  $\theta$
- ▶ Auch hier erhält man durch die Methode der kleinsten Quadrate einen KQS  $\widehat{\theta} = \widehat{\theta}(y)$  für  $\theta$

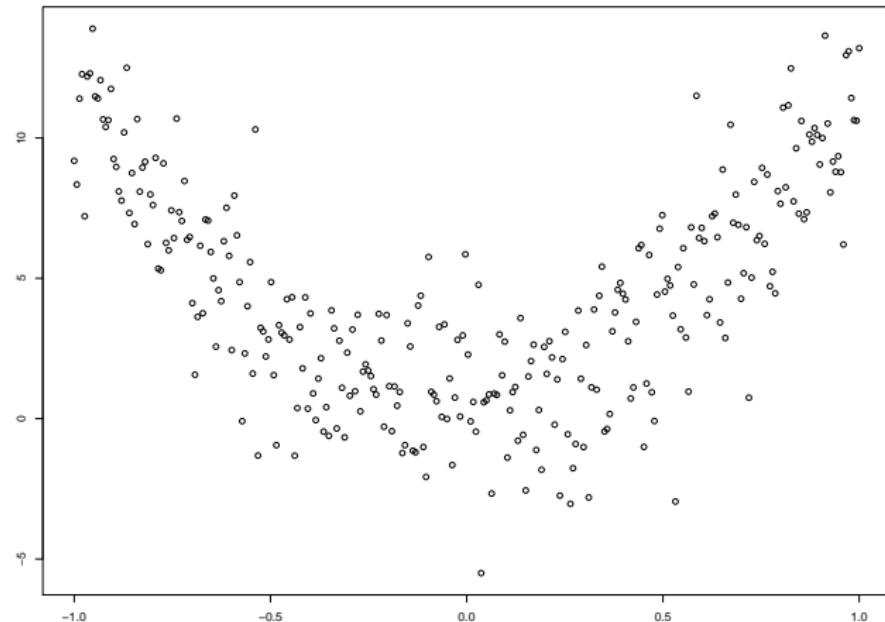
$$\widehat{\theta} = (\mathbf{X}^t \cdot \mathbf{X})^{-1} \cdot \mathbf{X}^t \cdot y$$

für eine Beobachtung  $y = (y_1, \dots, y_n)$

- ▶ Berechnung erfolgt numerisch
- ▶ In R mit `lm(y~x1+x2+...+xp)`

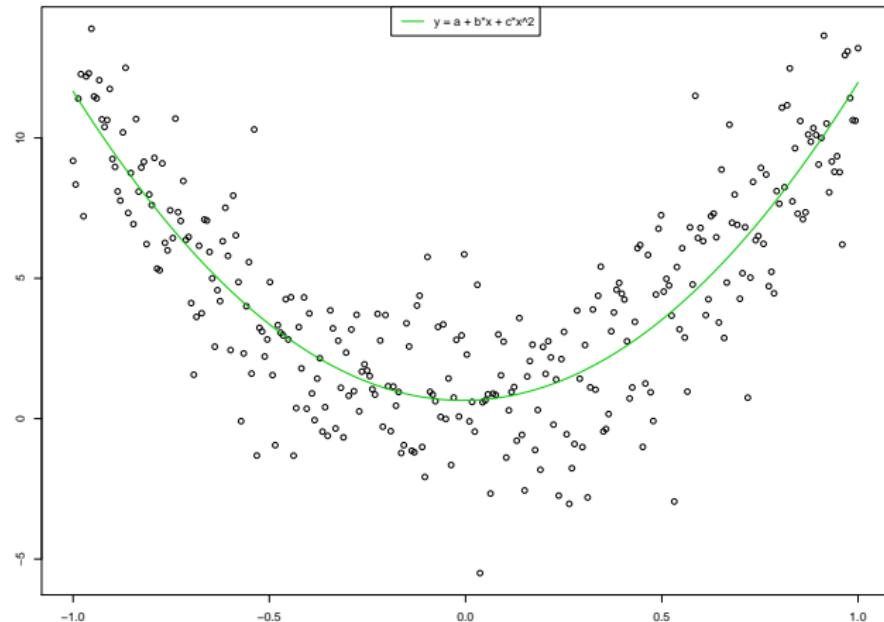
# Beispiel: Polynomielle Regression

Betrachte Beispiel von Folie 6



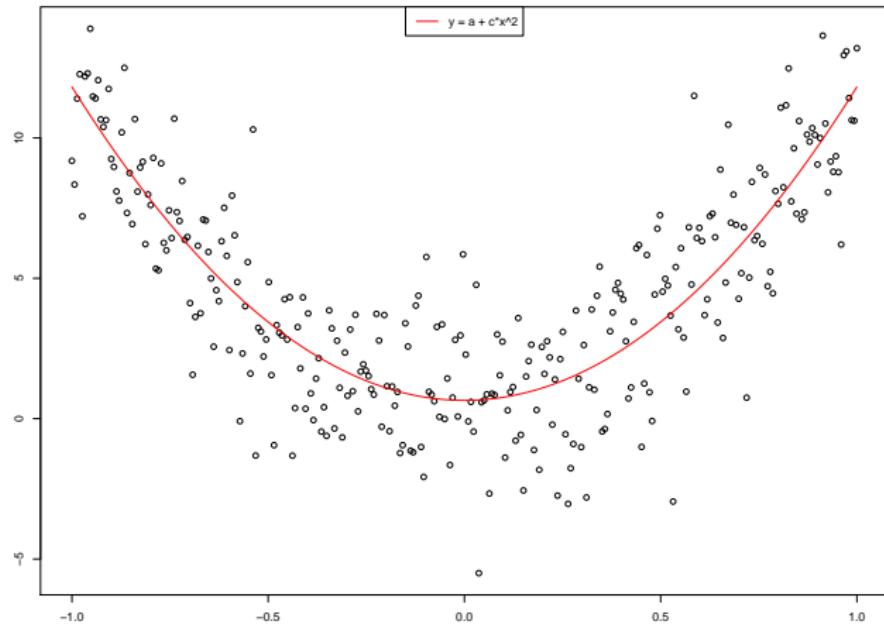
# Beispiel: Polynomielle Regression

Betrachte Beispiel von Folie 6



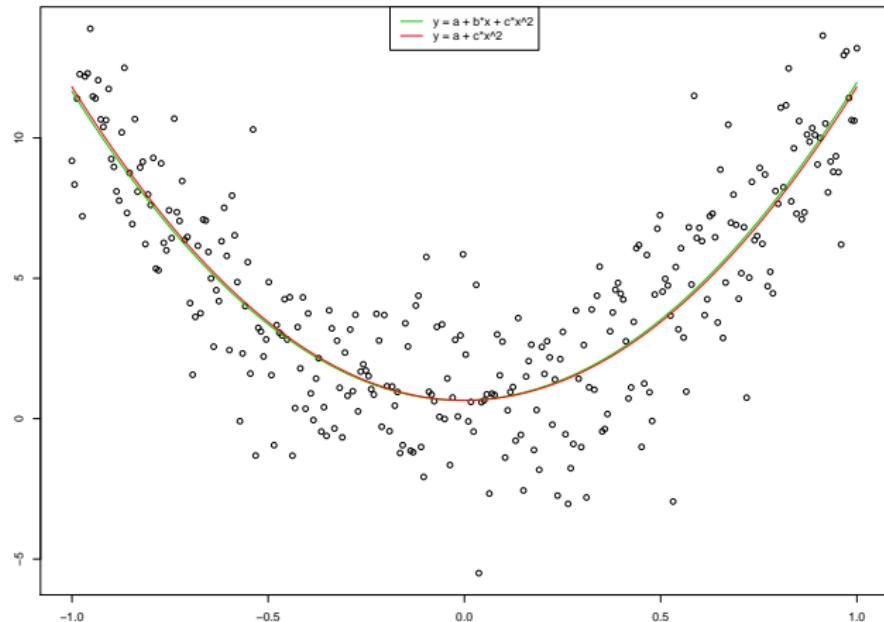
# Beispiel: Polynomielle Regression

Betrachte Beispiel von Folie 6



# Beispiel: Polynomielle Regression

Betrachte Beispiel von Folie 6



# Beispiel: Polynomielle Regression, Modellanpassung

- ▶ **summary** Ausgabe für das Modell  $Y_i = a + b \cdot X_i + c \cdot X_i^2 + \epsilon_i$ :

```
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) 0.6527    0.1848   3.532 0.000478 ***
b           0.1586    0.2127   0.746 0.456398    
c          11.1651    0.4105  27.200 < 2e-16 ***
```

⇒ Parameter  $b$  geht nicht signifikant in das Modell ein

- ▶ **summary** Ausgabe für das Modell  $Y_i = a + c \cdot X_i^2 + \epsilon_i$ :

```
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)    
(Intercept) 0.6527    0.1847   3.535 0.000473 ***
c          11.1651    0.4102  27.220 < 2e-16 ***
```

⇒ Modell mit weniger Parametern ist hier vorzuziehen

# Modellanpassung - Der Befehl step

**Frage:** Welches Modell beschreibt die Situation am besten?

Bsp.: Auf der vorherigen Folie geht  $b$  nicht signifikant in in das Modell ein. Das Modell ohne den linearen Term beschreibt die Situation besser. (Die  $p$ -Werte sind kleiner.)

- ▶ Man nehme das signifikanteste Modell.
- ▶ Hat man viele Einflussgrößen, so ist es aufwendig jedes einzelne Modell zu überprüfen.
- ▶ In R erledigt dies die Funktion `step`
- ▶ `step` entfernt oder fügt zu einem bestehenden Modell Einflussfaktoren hinzu und bewertet die Güte des neuen Modells.
- ▶ Als Güte Maß dient der **AIC**-Wert (Akaike's Information Criterion). Je niedriger der Wert, desto besser ist die Modellanpassung.

# Beispiel - step

```
▶ step(lm(y ~ b + c))

Start:  AIC=457.75
y ~ b + c

          Df Sum of Sq    RSS      AIC
- b      1     2.5 1354.9  456.31
<none>            1352.4  457.75
- c      1   3368.8 4721.2 830.81

Step:  AIC=456.31
y ~ c

          Df Sum of Sq    RSS      AIC
<none>            1354.9  456.31
- c      1   3368.8 4723.7 828.97

Call:
lm(formula = y ~ c)

Coefficients:
(Intercept)           c
              0.6527    11.1651
```

▶ Alternativ: `step(model, .~.+groesse1+groesse2)`

# add1 und update

- ▶ add1 überprüft wie sich die Güte eines Modells bei Hinzunahme von Einflussfaktoren verändert.
- ▶ update fügt Größen zu einem Modell hinzu

## Beispiel

- ▶ `add1(model, .~.+groesse1+groesse2)`
- ▶ `update(model, .~.+groesses2)`

Die Aufgaben 9.7. bis 9.8. des Aufgabenblattes  
können jetzt bearbeitet werden.

# Gliederung

## 1 Lineare Zusammenhänge erkennen

- Korrelationskoeffizienten
- Korrelation vs. Kausalität

## 2 Lineare Regressionsmodell

- Methode der kleinsten Quadrate
- Residuenanalyse und Bestimmtheitsmaß

## 3 Multiple lineare Regression

- Die Modellierung
- Der KQ-Schätzer

## 4 Logit Modelle

- Modellierung binärer Regression
- Beispiel und Parameterschätzung

# Binäre Regression

- ▶ Lineare Modelle eignen sich gut, wenn die Zielvariable stetig ist (und zumindestens approximativ normalverteilt)
- ▶ In vielen Anwendungen ist Zielvariable nicht stetig, sondern binär
- ▶ Bsp: Antwort auf eine Ja/Nein Frage
- ▶ **Ziel einer binären Regression:** Modellierung und Schätzung des Effekts der Variablen  $X_{i,1}, \dots, X_{i,p}$  auf die (bedingte) Wahrscheinlichkeit

$$\pi_i = \mathbb{P}(Y_i = 1 \mid X_{i,1}, \dots, X_{i,p})$$

# Modellierungsprobleme

Der intuitive Ansatz

$$\pi_i = \theta_0 + \theta_1 \cdot X_{i,1} + \dots + \theta_p \cdot X_{i,p} + \epsilon_i, \quad i = 1, \dots, n$$

ist ungeeignet:

- ▶  $Y_i$  ist binär, was für die Regressorwerte der rechten Seite eine zu starke Einschränkung darstellt

# Modellierung

- ▶ **Lösungsansatz:** Verknüpfen den *linearen Prädiktor*

$\eta_i = \theta_0 + \theta_1 \cdot X_{i,1} + \dots + \theta_p \cdot X_{i,p}$  mit einer monoton wachsenden Funktion  $h: \mathbb{R} \rightarrow [0, 1]$ , also

$$\pi_i = h(\theta_0 + \theta_1 \cdot X_{i,1} + \dots + \theta_p \cdot X_{i,p})$$

und untersuche das Modell

$$h^{-1}(\pi_i) = \theta_0 + \theta_1 \cdot X_{i,1} + \dots + \theta_p \cdot X_{i,p}$$

- ▶ Als *Responsefunktion*  $h$  wählt man häufig eine Verteilungsfunktion
- ▶ Im Logit-Modell:  $h(t) = \frac{\exp(t)}{1+\exp(t)}$  (logistische Verteilungsfunktion)
- ▶ Umkehrfunktion  $h^{-1}(t) = \log(\frac{t}{1-t})$  heißt auch *Logit-Funktion*

# Modelle für die Chancen

- ▶ Für die *Chancen (odds)*

$$\frac{\pi_i}{1 - \pi_i} = \frac{\mathbb{P}(Y_i = 1 | X_{i,1}, \dots, X_{i,p})}{\mathbb{P}(Y_i = 0 | X_{i,1}, \dots, X_{i,p})}$$

erhält man (im Logit Modell!) das multiplikative Modell

$$\frac{\mathbb{P}(Y_i = 1 | X_{i,1}, \dots, X_{i,p})}{\mathbb{P}(Y_i = 0 | X_{i,1}, \dots, X_{i,p})} = \exp(\theta_0) \cdot \exp(\theta_1 X_{i,1}) \cdot \dots \cdot \exp(\theta_p X_{i,p})$$

- ⇒ Für die logarithmierten Chancen (*log-odds*) erhält man ein lineares Modell

# Interpretation

Bei Erhöhung der Kovariablen  $X_{i,k}$  um 1 ändert sich das Verhältnis der Chancen um  $\exp(\theta_k)$

$$\Rightarrow \exp(\theta_k) \cdot (\exp(\theta_0) \cdot \exp(\theta_1 X_{i,1}) \cdot \dots \cdot \exp(\theta_p X_{i,p}))$$

Also:

- ▶  $\theta_k > 0$ : Chance wird größer
- ▶  $\theta_k < 0$ : Chance wird kleiner
- ▶  $\theta_k = 0$ : Chance bleibt gleich

## Beispiel: Tod durch Herzversagen

- ▶ Zielvariable: Patient stirbt an Herzversagen (0/1 codiert)
  - ▶ Kovariablen: Alter, Geschlecht, Cholesterinspiegel, ...
  - ▶ Ist  $\theta_1 = 0.08$ : Chance an Herzversagen zu sterben erhöht sich bei einem 10 Jahre älterem Patienten um den Faktor  $\exp(10 \cdot 0.08) \approx 2.2$
  - ▶ Vorsicht: Bei unterschiedlichen Wahlen von  $h$  können die geschätzten Werte für  $\theta$  stark abweichen, die Verhältnisse  $\theta_2/\theta_1$  usw. bleiben jedoch nahezu konstant
- ⇒ Es kann festgestellt werden, welche Variable den größten Einfluss hat

# Schätzung der Parameter

- ▶  $\theta$  wird *nicht* durch die Methode der kleinsten Quadrate geschätzt
- ▶ Mit einem Maximum-Likelihood-Ansatz lässt sich (numerisch) ein guter Schätzer für  $\theta$  bestimmen. ( $Y_1, \dots, Y_n$ ) ist bedingt unter den Kovariablen  $\otimes_{i=1}^n B(1, \pi_i)$ -verteilt.
- ▶ In R erhält man diese mit  
`glm(Y ~ x1 + ... + xp, family = binomial(link="logit"))`