Allgemeines Lineares Modell

BSc Psychologie SoSe 2023

Prof. Dr. Dirk Ostwald

(13) Multiple Regression

Anwendungsszenario

Modellformulierung

Modellschätzung

Modellevaluation

Selbstkontrollfragen

Anwendungsszenario

Modellformulierung

Modellschätzung

Modellevaluation

Selbstkontrollfragen

Anwendungsszenario

- Generalisierung der einfachen linearen Regression zu mehr als einer unabhängigen Variable.
- Eine univariate abhängige Variable bestimmt an randomisierten experimentellen Einheiten.
- Zwei oder mehr “kontinuierliche” unabhängige Variablen.
- Die unabhängigen Variablen heißen Regressoren, Prädiktoren, Kovariaten oder Features.

Ziele

- Quantifizierung des Erklärungspotentials der Variation der AV durch die Variation der UVs.
- Quantifizierung des Einflusses einzelner UVs auf die AV im Kontext anderer UVs.
- Prädiktion von AV Werten aus UVs Werten nach Parameterschätzung.

Anwendungsbeispiel

- BDI Differenzwerte (`BDI`) in Abhängigkeit von Therapiedauer (`Duration`) und Alter (`Age`)

Anwendungsszenario

Beispieldatensatz ($n = 100$)

ID	Age	Duration	BDI
1	50	16	9
2	38	13	9
3	46	16	10
4	62	17	3
5	25	23	38
6	34	23	29
7	36	24	31
8	36	18	21
9	57	20	20
10	46	17	16
11	59	21	18
12	54	22	24
13	27	14	20
14	56	18	12
15	41	20	31
16	46	23	30
17	23	15	23
18	36	22	27
19	44	19	23
20	70	20	11
21	72	13	-3
22	57	16	12
23	67	16	3
24	41	19	23
25	44	14	15

Anwendungsszenario

Modellformulierung

Modellschätzung

Modellevaluation

Selbstkontrollfragen

Modellformulierung

Definition (Modell der multiplen Regression)

υ_i mit $i = 1, ..., n$ sei die Zufallsvariable, die den $i$ten Wert einer abhängigen Variable modelliert. Dann hat das *Modell der multiplen Regression* die strukturelle Form

$$\upsilon_i = x_{i1}\beta_1 + \cdots + x_{ip}\beta_p + \varepsilon_i \text{ mit } \varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2) \text{ u.i.v. für } i = 1, ..., n \text{ und } \sigma^2 > 0, \tag{1}$$

wobei $x_{ij} \in \mathbb{R}$ mit $1 \le i \le n$ und $1 \le j \le p$ den $i$ten Wert der $j$te unabhängigen Variable bezeichnet. Die unabhängigen Variablen werden auch *Regressoren*, *Prädiktoren*, *Kovariaten* oder *Features* genannt. Mit

$$x_i := (x_{i1}, ..., x_{ip})^T \in \mathbb{R}^p \text{ und } \beta := (\beta_1, ..., \beta_p)^T \in \mathbb{R}^p \tag{2}$$

hat das Modell der multiplen Regression die Datenverteilungsform

$$\upsilon_i \sim N(\mu_i, \sigma^2) \text{ u.v. für } i = 1, ..., n, \text{ wobei } \mu_i := x_i^T \beta. \tag{3}$$

In diesem Zusammenhang wird $x_i \in \mathbb{R}^p$ auch als $i$ter *Featurevektor* bezeichnet. Die Designmatrixform des Modells der multiplen Regression schließlich ist gegeben durch

$$\upsilon = X\beta + \varepsilon \text{ mit } \varepsilon \sim N(0_n, \sigma^2 I_n) \tag{4}$$

mit

$$\upsilon := (\upsilon_1, ..., \upsilon_n)^T, X := (x_{ij})_{1 \le i \le n, 1 \le j \le p} \in \mathbb{R}^{n \times p}, \beta := (\beta_1, ..., \beta_p)^T \in \mathbb{R}^p \text{ und } \sigma^2 > 0. \tag{5}$$

Bemerkung

- Das Modell der multiplen Regression und die allgemeine Form des ALMs sind identisch.

Beispieldatensatzerzeugung

```
# Datensimulation
library(MASS)                                         # Multivariate Normalverteilung
set.seed(10)                                          # reproduzierbare Daten
n              = 100                                  # Anzahl Datenpunkte
p              = 3                                    # Anzahl Parameter
x_1            = round(runif(n,20,80))                # Regressorwerte Alter
x_2            = round(runif(n,12,24))                # Regressorwerte Therapiedauer
X              = matrix(c(rep(1,n),x_1,x_2), nrow = n) # Designmatrix
I_n            = diag(n)                              # Identitätsmatrix
beta           = matrix(c(5,-.5,2), nrow = p)         # Betaparametervektor
sigsqr         = 10                                   # Varianzparameter
y              = mvrnorm(1, X %*% beta, sigsqr*I_n)   # eine Realisierung eines n-dimensionalen ZVs

# Dataframeformatierung
D             = data.frame("ID" = 1:n)                # Dataframe Initialisierung und ID Variable
D$Age         = x_1                                   # Alter
D$Duration    = x_2                                   # Therapiedauer
D$BDI         = y                                     # PrePost-BDI Differenzwerte

# Datenspeicherung
write.csv( D, file = file.path(getwd(), "13_Daten", "13_Multiple_Regression_Daten.csv"))
```

Beispieldatenvisualisierung

```
# Dateneinlesen
fname      = file.path(getwd(), "13_Daten", "13_Multiple_Regression_Daten.csv")
D          = read.table(fname, sep = ",", header = TRUE)

# Open GL Visualisierung  mit car package, siehe ?scatter3d für Details
library(car)
```

```
> Lade nötiges Paket: carData
```

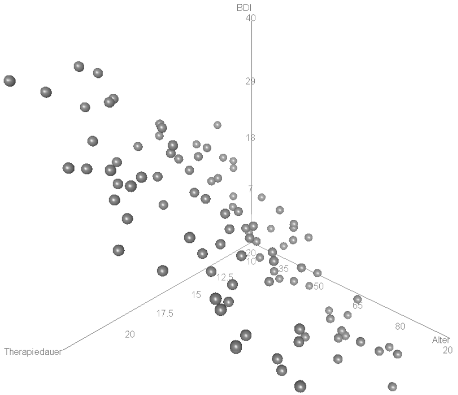
```
scatter3d(
D$Age,
D$BDI,
D$Duration,
xlab        = "Alter",
ylab        = "BDI",
zlab        = "Therapiedauer",
point.col   = "gray40",
axis.col    = rep("black",3),
axis.scales = T,
axis.ticks  = T,
surface     = F)
```

```
> Lade nötigen Namensraum: rgl

> Lade nötigen Namensraum: mgcv
```

Modellschätzung

Beispieldatenvisualisierung



Anwendungsszenario

Modellformulierung

Modellschätzung

Modellevaluation

Selbstkontrollfragen

Überblick

Der Betaparameterschätzer hat bekanntlich die Form

$$\hat{\beta} := (X^T X)^{-1} X^T \upsilon \tag{6}$$

Dabei quantifizieren in sehr grober Auflösung

- $X^T \upsilon \in \mathbb{R}^p$ die Kovariabilität der Regressoren mit den Daten und
- $X^T X \in \mathbb{R}^{p \times p}$ die Kovariabilität der Regressoren untereinander.

Damit ergibt sich für die Betaparameterschätzer also eine Interpretation als “regressorkovariabilitäts-normalisierte Regressordatenkovariabilität”,

$$\hat{\beta} \approx \text{Regressorkovariabilität}^{-1} \cdot \text{Regresssordatenkovariabilität}. \tag{7}$$

Im Folgenden wollen wir diese Intuition am Beispiel einer einfachen multiplen Regression mit einem Interzeptregressor und zwei unabhängigen Variablen Regressoren vertiefen, wobei die betreffenden Kovariabilitäten einmal durch Stichprobenkorrelationen und einmal durch partielle Stichprobenkorrelationen quantifiziert werden sollen.

Modellschätzung

Theorem (Betaparameterschätzer und Korrelationen)

Gegeben sei ein multiples Regressionsmodel der Form

$$
\upsilon = X\beta + \varepsilon, \varepsilon \sim N(0_n, \sigma^2 I_n) \text{ mit } X := \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} \end{pmatrix} \text{ und } \beta := \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}. \tag{8}
$$

Dann gilt

$$
\hat{\beta} = \begin{pmatrix} \bar{\upsilon} - \hat{\beta}_1 \bar{x}_1 - \hat{\beta}_2 \bar{x}_2 \\ \frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{1 - r^2_{x_1,x_2}} \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \\ \frac{r_{\upsilon,x_2} - r_{\upsilon,x_1} r_{x_1,x_2}}{1 - r^2_{x_1,x_2}} \frac{s_\upsilon}{s_{x_2}} \end{pmatrix}, \tag{9}
$$

wobei für die υ_i, x_{i1} und x_{i2} mit $i = 1, ..., n$ $\bar{\cdot}$, $s_\cdot$ und $r_{\cdot,\cdot}$ die entsprechenden Stichprobenmittel, Stichprobenstandardabweichungen, und Stichprobenkorrelationen bezeichnen.

Bemerkung

- In Bezug auf die Regressoren sind die Begriffe Stichprobenmittel, Stichprobenstandardabweichung, und Stichprobenkorrelation lediglich formal gemeint, nach Voraussetzung des ALMs sind die Regressorenwerte keine Realisierungen von Zufallsvariablen.

Modellschätzungen

Bemerkungen

Exemplarisch betrachten wir

$$\hat{\beta}_1 = \frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{1 - r_{x_1,x_2}^2} \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}}. \tag{10}$$

Man erkennt unter anderem:

- Nur im Fall $r_{x_1,x_2} = 0$ und $s_\upsilon = s_{x_1}$ gilt $\hat{\beta}_1 = r_{\upsilon,x_1}$.
- Im Fall $r_{x_1,x_2} = \pm 1$ ist $\hat{\beta}_1$ nicht definiert.
- Je größer $|r_{x_1,x_2}|$, desto größer der von r_{υ,x_1} subtrahierte Term $r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}$.
- Je größer $|r_{\upsilon,x_2}|$, desto größer der von r_{υ,x_1} subtrahierte Term $r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}$.
- Bei identischen Korrelationen und gleich bleibender Regressorstandabweichung steigt $\hat{\beta}_1$ mit s_υ.

Modellschätzung

Beweis

Wir erinnern zunächst daran, dass die Form des Betaparameterschätzers bekanntlich zum System der Normalengleichungen äquivalent ist (vgl. (6) Parameterschätzung),

$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T \upsilon \Leftrightarrow X^T X \hat{\beta} = X^T \upsilon. \tag{11}$$

Ausschreiben des Normalengleichungssystems für den hier betrachteten ALM Spezialfall ergibt dann zunächst

$$
\begin{aligned}
X^T X \hat{\beta} &= X^T \upsilon \\
\Leftrightarrow \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ x_{11} & \cdots & x_{n1} \\ x_{12} & \cdots & x_{n2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ x_{11} & \cdots & x_{n1} \\ x_{12} & \cdots & x_{n2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \upsilon_1 \\ \vdots \\ \upsilon_n \end{pmatrix} \\
\Leftrightarrow \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i2} \\ \sum_{i=1}^n x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 & \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} \\ \sum_{i=1}^n x_{i2} & \sum_{i=1}^n x_{i2}x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n \upsilon_i \\ \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i1} \\ \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i2} \end{pmatrix} \\
\Leftrightarrow \begin{pmatrix} n & \sum_{i=1}^n x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i2} \\ \sum_{i=1}^n x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 & \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} \\ \sum_{i=1}^n x_{i2} & \sum_{i=1}^n x_{i2}x_{i1} & \sum_{i=1}^n x_{i2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \hat{\beta}_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n \upsilon_i \\ \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i1} \\ \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i2} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Modellschätzung

Beweis (fortgeführt)

und damit

$$
\begin{aligned}
X^TX\hat{\beta} &= X^T\upsilon \\
\Leftrightarrow \begin{pmatrix} n\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1\sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_2\sum_{i=1}^n x_{i2} \\ \hat{\beta}_0\sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_1\sum_{i=1}^n x_{i1}^2 + \hat{\beta}_2\sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} \\ \hat{\beta}_0\sum_{i=1}^n x_{i2} + \hat{\beta}_1\sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} + \hat{\beta}_2\sum_{i=1}^n x_{i2}^2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^n \upsilon_i \\ \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i1} \\ \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i2} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Aus der Gleichung der ersten Vektorkomponenten folgt dann direkt die Form von $\hat{\beta}_0$ mit

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^n \upsilon_i &= n\hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1\sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_2\sum_{i=1}^n x_{i2} \\
\Leftrightarrow \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n \upsilon_i &= \hat{\beta}_0 + \hat{\beta}_1\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_2\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_{i2} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_0 &= \bar{\upsilon} - \hat{\beta}_1\bar{x}_1 - \hat{\beta}_2\bar{x}_2
\end{aligned}
\tag{12}
$$

Modellschätzung

Beweis (fortgeführt)

Einsetzen dieser Form von $\hat{\beta}_0$ in die Gleichung der zweiten Vektorkomponenten ergibt dann

$$
\begin{aligned}
\hat{\beta}_0 \sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} &= \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i1} \\
\Leftrightarrow (\bar{\upsilon} - \hat{\beta}_1\bar{x}_1 - \hat{\beta}_2\bar{x}_2) \sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} &= \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i1} \\
\Leftrightarrow \bar{\upsilon} \sum_{i=1}^n x_{i1} - \hat{\beta}_1\bar{x}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1} - \hat{\beta}_2\bar{x}_2 \sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} &= \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i1} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1}^2 - \hat{\beta}_1\bar{x}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1} + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} - \hat{\beta}_2\bar{x}_2 \sum_{i=1}^n x_{i1} &= \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i1} - \bar{\upsilon} \sum_{i=1}^n x_{i1} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_1 \left(\sum_{i=1}^n x_{i1}^2 - \bar{x}_1 \sum_{i=1}^n x_{i1} \right) + \hat{\beta}_2 \left(\sum_{i=1}^n x_{i1}x_{i2} - \bar{x}_2 \sum_{i=1}^n x_{i1} \right) &= \sum_{i=1}^n \upsilon_i x_{i1} - \bar{\upsilon} \sum_{i=1}^n x_{i1}
\end{aligned}
$$

Modellschätzung

Beweis (fortgeführt)

Im Beweis des Theorems zur Ausgleichsgerade (vgl. (1) Regression) haben wir gesehen, dass

$$\sum_{i=1}^{n} x_{i1}x_{i1} - \bar{x}_1 \sum_{i=1}^{n} x_{i1} = \sum_{i=1}^{n}(x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i1} - \bar{x}_1), \tag{13}$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_{i1}x_{i2} - \bar{x}_2 \sum_{i=1}^{n} x_{i1} = \sum_{i=1}^{n}(x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2) \text{ und} \tag{14}$$

$$\sum_{i=1}^{n} \upsilon_i x_{i1} - \bar{\upsilon} \sum_{i=1}^{n} x_{i1} = \sum_{i=1}^{n}(\upsilon_i - \bar{\upsilon})(x_{i1} - \bar{x}_1) \tag{15}$$

Beweis (fortgeführt)

Es ergibt sich also, dass

$$
\begin{aligned}
& \hat{\beta}_1 \sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i1} - \bar{x}_1) + \hat{\beta}_2 \sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2) = \sum_{i=1}^n (\upsilon_i - \bar{\upsilon})(x_{i1} - \bar{x}_1) \\
\Leftrightarrow\ & \hat{\beta}_1 \frac{\sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i1} - \bar{x}_1)}{n-1} + \hat{\beta}_2 \frac{\sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2)}{n-1} = \frac{\sum_{i=1}^n (\upsilon_i - \bar{\upsilon})(x_{i1} - \bar{x}_1)}{n-1}
\end{aligned}
\tag{16}
$$

Mit den Definitionen von Stichprobenstandardabweichung und -korrelation folgt dann weiter

$$
\begin{aligned}
\hat{\beta}_1 s_{x_1} s_{x_1} + \hat{\beta}_2 c_{x_1,x_2} &= c_{\upsilon,x_1} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_1 \frac{s_{x_1} s_{x_1}}{s_\upsilon s_{x_1}} + \hat{\beta}_2 \frac{c_{x_1,x_2}}{s_\upsilon s_{x_1}} &= \frac{c_{\upsilon,x_1}}{s_\upsilon s_{x_1}} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_1 \frac{s_{x_1}}{s_\upsilon} + \hat{\beta}_2 \frac{c_{x_1,x_2}}{s_\upsilon s_{x_1}} &= r_{\upsilon,x_1} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_1 \frac{s_{x_1}}{s_\upsilon} + \hat{\beta}_2 \frac{c_{x_1,x_2} s_{x_2}}{s_\upsilon s_{x_1} s_{x_2}} &= r_{\upsilon,x_1} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_1 \frac{s_{x_1}}{s_\upsilon} + \hat{\beta}_2 \frac{s_{x_2}}{s_\upsilon} r_{x_1,x_2} &= r_{\upsilon,x_1}
\end{aligned}
\tag{17}
$$

Modellschätzung

Beweis (fortgeführt)

Definition von

$$b_j := \frac{s_{x_j}}{s_\upsilon}, j = 1, 2 \tag{18}$$

erlaubt dann die Schreibweise

$$b_1 + b_2 r_{x_1,x_2} = r_{\upsilon,x_1}. \tag{19}$$

Schließlich folgt analog durch Vertauschen der Subskripte aus der Gleichung der dritten Vektorkomponenten

$$b_1 r_{x_1,x_2} + b_2 = r_{\upsilon,x_2} \tag{20}$$

Insgesamt haben wir also gesehen, dass die Definition des Betaparameterschätzers im vorliegenden ALM Spezialfall ergibt, dass mit

$$\hat{\beta}_j = b_j \frac{s_\upsilon}{s_{x_j}}, j = 1, 2 \tag{21}$$

gilt, dass

$$\begin{aligned} r_{\upsilon,x_1} &= b_1 + b_2 r_{x_1,x_2} \\ r_{\upsilon,x_2} &= b_1 r_{x_1,x_2} + b_2 \end{aligned} \tag{22}$$

Modellschätzung

Beweis (fortgeführt)

Damit folgt aus der zweiten Gleichung dann sofort

$$b_2 = r_{\upsilon,x_2} - b_1 r_{x_1,x_2}. \tag{23}$$

Einsetzen in die erste Gleichung ergibt dann

$$\begin{aligned}
b_1 + (r_{\upsilon,x_2} - b_1 r_{x_1,x_2}) r_{x_1,x_2} &= r_{\upsilon,x_1} \\
\Leftrightarrow b_1 + r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2} - b_1 r_{x_1,x_2}^2 &= r_{\upsilon,x_1} \\
\Leftrightarrow r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2} + b_1 \left(1 - r_{x_1,x_2}^2\right) &= r_{\upsilon,x_1} \\
\Leftrightarrow b_1 \left(1 - r_{x_1,x_2}^2\right) &= r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2} \\
\Leftrightarrow b_1 &= \frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{1 - r_{x_1,x_2}^2}
\end{aligned} \tag{24}$$

Modellschätzung

Beweis (fortgeführt)

Für b_2 ergibt sich damit weiterhin

$$
\begin{aligned}
& b_2 = r_{\upsilon,x_2} - b_1 r_{x_1,x_2} \\
\Leftrightarrow\ & b_2 = r_{\upsilon,x_2} - \left(\frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{1 - r_{x_1,x_2}^2}\right) r_{x_1,x_2} \\
\Leftrightarrow\ & b_2 = \frac{r_{\upsilon,x_2}\left(1 - r_{x_1,x_2}^2\right)}{1 - r_{x_1,x_2}^2} - \frac{r_{\upsilon,x_1} r_{x_1,x_2} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}^2}{1 - r_{x_1,x_2}^2} \\
\Leftrightarrow\ & b_2 = \frac{r_{\upsilon,x_2} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}^2 - r_{\upsilon,x_1} r_{x_1,x_2} + r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}^2}{1 - r_{x_1,x_2}^2} \\
\Leftrightarrow\ & b_2 = \frac{r_{\upsilon,x_2} - r_{\upsilon,x_1} r_{x_1,x_2}}{1 - r_{x_1,x_2}^2}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

Damit folgen dann aber

$$
\begin{aligned}
\hat{\beta}_1 &= b_1 \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} = \left(\frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{1 - r_{x_1,x_2}^2}\right) \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \\
\hat{\beta}_2 &= b_2 \frac{s_\upsilon}{s_{x_2}} = \left(\frac{r_{\upsilon,x_2} - r_{\upsilon,x_1} r_{x_1,x_2}}{1 - r_{x_1,x_2}^2}\right) \frac{s_\upsilon}{s_{x_2}}
\end{aligned}
\tag{26}
$$

und es ist alles gezeigt. □

Modellschätzung

Anwendungsbeispiel

```
# Dateneinlesen
fname       = file.path(getwd(), "13_Daten", "13_Multiple_Regression_Daten.csv")
D           = read.table(fname, sep = ",", header = TRUE)         # Datensatz

# Modellschätzung
y           = D$BDI                                               # Abhängige Variable
n           = length(y)                                           # Anzahl Datenpunkte
X           = matrix(c(rep(1,n), D$Age, D$Duration), nrow = n)    # Designmatrix
beta_hat    = solve(t(X) %*% X) %*% t(X) %*% y                    # Betaparameterschätzer
eps_hat     = y - X %*% beta_hat                                  # Residuenvektor
sigsqr_hat = (t(eps_hat) %*% eps_hat) /(n-p)                      # Varianzparameterschätzer

# Betaparameterschätzer aus Stichprobenmittel, -standardabweichungen und -korrelationen
y12         = cbind(y,X[,-1])                                     # y,x_1,x_2 Matrix
bars        = apply(y12, 2, mean)                                 # Stichprobenmittel
s           = apply(y12, 2, sd)                                   # Stichprobenstandardabweichungen
r           = cor(y12)                                            # Stichprobenkorrelationen
beta_hat_1 = (r[1,2] - r[1,3]*r[2,3])/(1 - r[2,3]^2)*(s[1]/s[2]) # \hat{\beta}_1
beta_hat_2 = (r[1,3] - r[1,2]*r[2,3])/(1 - r[2,3]^2)*(s[1]/s[3]) # \hat{\beta}_2
beta_hat_0 = bars[1] - beta_hat_1*bars[2] - beta_hat_2*bars[3]    # \hat{\beta}_0

# Ausgabe
cat("beta_hat ALM-Schätzer           :"  , beta_hat,
    "\nbeta_hat Deskriptivstatistiken :", c(beta_hat_0,beta_hat_1,beta_hat_2))
```

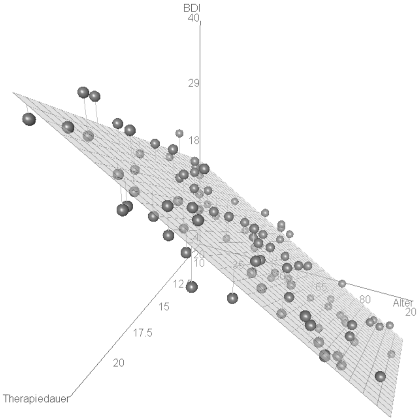
```
> beta_hat ALM-Schätzer           : 5.42 -0.481 1.91
> beta_hat Deskriptivstatistiken : 5.42 -0.481 1.91
```

Beispieldatenvisualisierung

```
# Dateneinlesen
fname      = file.path(getwd(), "13_Daten", "13_Multiple_Regression_Daten.csv")
D          = read.table(fname, sep = ",", header = TRUE)         # Datensatz

# Open GL Visualisierung  mit car package, siehe ?scatter3d für Details
library(car)
scatter3d(
D$Age,
D$BDI,
D$Duration,
xlab        = "Alter",
ylab        = "BDI",
zlab        = "Therapiedauer",
point.col   = "gray40",
axis.col    = rep("black",3),
axis.scales = T,
axis.ticks  = T,
surface     = T,
surface.col = "gray70",
neg.res.col = "gray70",
pos.res.col = "gray70")
```

Beispieldatenvisualisierung



Theorem (Betaparameterschätzer und partielle Korrelationen)

Gegeben sei ein multiples Regressionsmodel der Form

$$\upsilon = X\beta + \varepsilon, \varepsilon \sim N(0_n, \sigma^2 I_n) \text{ mit } X := \begin{pmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} \end{pmatrix} \text{ und } \beta := \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Dann gilt

$$\hat{\beta} = \begin{pmatrix} \bar{\upsilon} - \hat{\beta}_1 \bar{x}_1 - \hat{\beta}_2 \bar{x}_2 \\ r_{\upsilon, x_1 \setminus x_2} \sqrt{\frac{1 - r^2_{\upsilon, x_2}}{1 - r^2_{x_1, x_2}}} \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \\ r_{\upsilon, x_2 \setminus x_1} \sqrt{\frac{1 - r^2_{\upsilon, x_1}}{1 - r^2_{x_2, x_1}}} \frac{s_\upsilon}{s_{x_2}} \end{pmatrix}, \quad (28)$$

wobei für $1 \leq k, l \leq 2$ und $i = 1, ..., n$

- $r_{\upsilon, x_k \setminus x_l}$ die partielle Stichprobenkorrelation der υ_i und x_{ik} gegeben die x_{il} ist,
- r_{υ, x_k} die Stichprobenkorrelation der υ_i und x_{ik} ist, und
- r_{x_k, x_l} die Stichprobenkorrelation der x_{ik} und x_{il} ist.

Modellschätzung

Bemerkungen

- Im Allgemeinen gilt für $1 \leq i, l \leq k$, dass $\hat{\beta}_k \neq r_{\upsilon, x_k \backslash x_l}$.
- Betaparameterschätzer sind also im Allgemeinen keine partiellen Stichprobenkorrelationen.
- $\hat{\beta}_k = r_{\upsilon, x_k \backslash x_l}$ für $1 \leq i, l \leq k$ gilt genau dann, wenn $s_\upsilon = s_{x_1} = s_{x_2}$ und zudem
  - $r_{\upsilon, x_k} = r_{x_k, x_l} = 0$, wenn also die Stichprobenkorrelationen der Daten und der Werte des zweiten Regressors, sowie die Stichprobenkorrelation der Werte der beiden Regressoren gleich Null sind. Dies kann der Fall sein, wenn einer der Regressoren die Daten "sehr gut erklärt" und der andere Regressor von dem ersten "sehr verschieden" ist.
  - $|r_{\upsilon, x_l}| = |r_{x_k, x_l}|$, wenn also die obige Stichprobenkorrelationen dem Betrage nach gleich sind. Dies ist vermutlich selten der Fall.

Beweis

Wir betrachten $\hat{\beta}_1$, das Resultat für $\hat{\beta}_2$ folgt dann durch Vertauschen der Indizes. Wir haben in vorherigem Theorem gesehen, dass

$$\hat{\beta}_1 = \frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{1 - r^2_{x_1,x_2}} \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \tag{29}$$

Weiterhin haben wir in (2) Korrelation gesehen, dass unter der Annahme der multivariaten Normalverteilung von y, x_1, x_2 ein Schätzer für die partielle Korrelation von y und x_1 gegeben x_2 durch

$$r_{\upsilon,x_1 \setminus x_2} = \frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{\sqrt{1 - r^2_{\upsilon,x_2}}\sqrt{1 - r^2_{x_1,x_2}}} \tag{30}$$

gegeben ist. Für $\hat{\beta}_1$ ergibt sich somit

$$\begin{aligned}
\hat{\beta}_1 &= \frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{1 - r^2_{x_1,x_2}} \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \\
\Leftrightarrow \left(1 - r^2_{x_1,x_2}\right) \hat{\beta}_1 &= \left(r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}\right) \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \\
\Leftrightarrow \frac{1 - r^2_{x_1,x_2}}{\sqrt{1 - r^2_{\upsilon,x_2}}\sqrt{1 - r^2_{x_1,x_2}}} \hat{\beta}_1 &= \frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{\sqrt{1 - r^2_{\upsilon,x_2}}\sqrt{1 - r^2_{x_1,x_2}}} \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \\
\Leftrightarrow \frac{1 - r^2_{x_1,x_2}}{\sqrt{1 - r^2_{\upsilon,x_2}}\sqrt{1 - r^2_{x_1,x_2}}} \hat{\beta}_1 &= r_{\upsilon,x_1 \setminus x_2} \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}}
\end{aligned} \tag{31}$$

Beweis

und damit weiter

$$
\begin{aligned}
\hat{\beta}_1 &= r_{\upsilon,x_1\backslash x_2} \frac{\sqrt{1-r_{\upsilon,x_2}^2}\sqrt{1-r_{x_1,x_2}^2}}{1-r_{x_1,x_2}^2}\frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_1 &= r_{\upsilon,x_1\backslash x_2} \frac{\sqrt{1-r_{\upsilon,x_2}^2}\sqrt{1-r_{x_1,x_2}^2}}{\left(\sqrt{1-r_{x_1,x_2}^2}\right)^2}\frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_1 &= r_{\upsilon,x_1\backslash x_2} \frac{\sqrt{1-r_{\upsilon,x_2}^2}}{\sqrt{1-r_{x_1,x_2}^2}}\frac{s_\upsilon}{s_{x_1}} \\
\Leftrightarrow \hat{\beta}_1 &= r_{\upsilon,x_1\backslash x_2} \sqrt{\frac{1-r_{\upsilon,x_2}^2}{1-r_{x_1,x_2}^2}}\frac{s_\upsilon}{s_{x_1}}
\end{aligned}
\tag{32}
$$

Modellschätzung

Anwendungsbeispiel

```
# Dateneinlesen
fname      = file.path(getwd(), "13_Daten", "13_Multiple_Regression_Daten.csv")
D          = read.table(fname, sep = ",", header = TRUE)          # Datensatz

# Modellschätzung
y          = D$BDI                                                # Abhängige Variable
n          = length(y)                                            # Anzahl Datenpunkte
X          = matrix(c(rep(1,n), D$Age, D$Duration), nrow = n)     # Designmatrix
p          = ncol(X)                                              # Anzahl Parameter
beta_hat   = solve(t(X) %*% X) %*% t(X) %*% y                     # Betaparameterschätzer
eps_hat    = y - X %*% beta_hat                                   # Residuenvektor
sigsqr_hat = (t(eps_hat) %*% eps_hat) /(n-p)                      # Varianzparameterschätzer

# Betaparameterschätzer aus partiellen Korrelationen und Korrelationen
library(ppcor)                                                    # partielle Korrelationentoolbox
y12        = cbind(y,X[,-1])                                      # y,x_1,x_2 Matrix
bars       = apply(y12, 2, mean)                                  # Stichprobenmittel
s          = apply(y12, 2, sd)                                    # Stichprobenstandardabweichungen
r          = cor(y12)                                             # Stichprobenkorrelationen
pr         = pcor(y12)                                            # partielle Stichprobenkorrelationen
pr         = pr$estimate                                          # partielle Stichprobenkorrelationen
beta_hat_1 = pr[1,2]*sqrt((1-r[1,3]^2)/(1-r[2,3]^2))*(s[1]/s[2]) # \hat{\beta}_1
beta_hat_2 = pr[1,3]*sqrt((1-r[1,2]^2)/(1-r[3,2]^2))*(s[1]/s[3]) # \hat{\beta}_2
beta_hat_0 = bars[1] - beta_hat_1*bars[2] - beta_hat_2*bars[3]   # \hat{\beta}_0

# Ausgabe
cat("Korrelationen  r(y,x_1),r(y,x_2),r(x_1,x_2)        :"  , c(r[1,2],r[1,3],r[2,3]),
    "\nPartielle Korrelationen r(y,x_1|x_2), r(y,x_2|x_1) :", c(pr[1,2],pr[1,3]),
    "\nbeta_hat ALM Schätzer                               :", beta_hat,
    "\nbeta_hat aus partieller Korrelation                 :", c(beta_hat_0,beta_hat_1,beta_hat_2))
```

```
> Korrelationen  r(y,x_1),r(y,x_2),r(x_1,x_2)        : -0.726 0.644 -0.0268
> Partielle Korrelationen r(y,x_1|x_2), r(y,x_2|x_1) : -0.927 0.909
> beta_hat ALM Schätzer                               : 5.42 -0.481 1.91
> beta_hat aus partieller Korrelation                 : 5.42 -0.481 1.91
```

Anwendungsszenario

Modellformulierung

Modellschätzung

Modellevaluation

Selbstkontrollfragen

Parameterinferenz | T-Tests

Theorem (T-Statistik)

Es sei

$$\upsilon = X\beta + \varepsilon \text{ mit } \varepsilon \sim N(0_n, \sigma^2 I_n) \tag{33}$$

das ALM in generativer Form. Weiterhin seien

$$\hat{\beta} := (X^T X)^{-1} X^T \upsilon \text{ und } \hat{\sigma}^2 := \frac{(\upsilon - X\hat{\beta})^T(\upsilon - X\hat{\beta})}{n-p} \tag{34}$$

die Betaparameter- und Varianzparameterschätzer, respektive. Schließlich sei für einen *Kontrastgewichtsvektor* $c \in \mathbb{R}^p$ und einen *Nullhypothesenbetaparameter* $\beta_0 \in \mathbb{R}^p$ die *T-Teststatistik* definiert als

$$T := \frac{c^T\hat{\beta} - c^T\beta_0}{\sqrt{\hat{\sigma}^2 c^T (X^T X)^{-1} c}}. \tag{35}$$

Dann gilt

$$T \sim t(\delta, n-p) \text{ mit } \delta := \frac{c^T\beta - c^T\beta_0}{\sqrt{\sigma^2 c^T (X^T X)^{-1} c}} \tag{36}$$

- Das Theorem wurde in (7) T-Statistiken diskutiert.

Parameterinferenz | T-Tests

Einige mögliche Kontrastgewichtsvektoren und Nullhypothesen im Anwendungsbeispiel:

$$
\begin{array}{lll}
c = (1,0,0)^T & H_0 : \beta_1 = 0 & H_A : \beta_1 \neq 0 \\
c = (0,1,0)^T & H_0 : \beta_2 = 0 & H_A : \beta_2 \neq 0 \\
c = (0,0,1)^T & H_0 : \beta_3 = 0 & H_A : \beta_3 \neq 0 \\
c = (0,1,-1)^T & H_0 : \beta_2 - \beta_3 = 0 & H_A : \beta_2 - \beta_3 \neq 0 \\
c = (0,-1,1)^T & H_0 : \beta_3 - \beta_2 = 0 & H_A : \beta_3 - \beta_2 \neq 0 \\
\dots & \dots & \dots
\end{array}
$$

Modellevaluation

Parameterinferenz | T-Tests

```
# Dateneinlesen
fname      = file.path(getwd(), "13_Daten", "13_Multiple_Regression_Daten.csv")
D          = read.table(fname, sep = ",", header = TRUE)      # Datensatz

# Modellschätzung
y          = D$BDI                                             # Abhängige Variable
n          = length(y)                                         # Anzahl Datenpunkte
X          = matrix(c(rep(1,n), D$Age, D$Duration), nrow = n) # Designmatrix
p          = ncol(X)                                           # Anzahl Parameter
beta_hat   = solve(t(X) %*% X) %*% t(X) %*% y                 # Betaparameterschätzer
eps_hat    = y - X %*% beta_hat                                # Residuenvektor
sigsqr_hat = (t(eps_hat) %*% eps_hat) /(n-p)                  # Varianzparameterschätzer

# Modellevaluation | Parameterinferenz
C          = cbind(diag(p), matrix(c(0,1,-1), nrow = 3))      # Kontrastgewichtsvektoren
ste        = rep(NaN, ncol(C))                                 # Konstraststandardfehler
tee        = rep(NaN, ncol(C))                                 # T-Statistiken
pvals      = rep(NaN, ncol(C))                                 # p-Werte
for(i in 1:ncol(C)){
    c        = C[,i]                                           # Kontrastgewichtsvektor
    t_num    = t(c)%*%beta_hat                                 # Zähler der T-Statistik
    ste[i]   = sqrt(sigsqr_hat*t(c)%*%solve(t(X)%*%X)%*%c)    # Kontraststandardfehler/Nenner der T-Statistik
    tee[i]   = t_num/ste[i]                                    # T-Statistik
    pvals[i] = 2*(1 - pt(abs(tee[i]),n-p))                    # p-Wert
}
# Ausgabe
R           = data.frame(c(beta_hat, t(C[,4]%*%beta_hat)),ste, tee, pvals)
rownames(R)  = c("(Intercept)", "Age", "Therapy", "Age-Therapy")
colnames(R)  = c("Estimate", "Std. Error", "t value", "Pr(>|t|)")
print(R)
```

```
>              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
> (Intercept)     5.422     1.9024    2.85  0.00534
> Age            -0.481     0.0198  -24.33  0.00000
> Therapy         1.912     0.0893   21.41  0.00000
> Age-Therapy    -2.393     0.0909  -26.32  0.00000
```

Modellinferenz | F-Tests

Theorem (F-Statistik)

Für $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $\beta \in \mathbb{R}^p$ und $\sigma^2 > 0$ sei ein ALM der Form

$$\upsilon = X\beta + \varepsilon \text{ mit } \varepsilon \sim N(0_n, \sigma^2 I_n) \tag{37}$$

mit der Partitionierung

$$X = \begin{pmatrix} X_0 & X_1 \end{pmatrix}, X_0 \in \mathbb{R}^{n \times p_0}, X_1 \in \mathbb{R}^{n \times p_1}, \text{ und } \beta := \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix}, \beta_0 \in \mathbb{R}^{p_0}, \beta_1 \in \mathbb{R}^{p_1}, \tag{38}$$

mit $p = p_0 + p_1$ gegeben. Schließlich sei

$$c := \begin{pmatrix} 0_{p_0} \\ 1_{p_1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^p \tag{39}$$

ein Vektor. Dann gilt

$$F \sim f(\delta, p_1, n - p) \text{ mit } \delta := \frac{c^T\beta \left(c^T(X^TX)^{-1}c\right)^{-1} c^T\beta}{\sigma^2} \tag{40}$$

- Das Theorem wurde in (8) F-Statistiken diskutiert.

Modellinferenz | F-Tests

$p_0 := 1$

```r
# Dateneinlesen
fname       = file.path(getwd(), "13_Daten", "13_Multiple_Regression_Daten.csv")
D           = read.table(fname, sep = ",", header = TRUE)      # Datensatz

# Modellevaluation
y           = D$BDI                                            # Abhängige Variable
n           = length(y)                                        # Anzahl Datenpunkte
X           = matrix(c(rep(1,n), D$Age, D$Duration), nrow = n) # Desigmatrix vollständiges Modell
p           = ncol(X)                                          # Anzahl Parameter vollständiges Modell
p_0         = 1                                                # Anzahl Parameter reduziertes Modell
p_1         = p - p_0                                          # Anzahl zusätzlicher Parameter im vollst. Modell
X_0         = X[,1:p_0]                                        # Designmatrix reduzierters Modell
beta_hat_0  = solve(t(X_0)%*%X_0)%*%t(X_0)%*%y                 # Betaparameterschätzer reduziertes Modell
beta_hat    = solve(t(X) %*%X )%*%t(X) %*%y                    # Betaparameterschätzer vollständiges Modell
eps_hat_0   = y - X_0 %*% beta_hat_0                           # Residuenvektor reduziertes Modell
eps_hat     = y - X %*% beta_hat                               # Residuenvektor vollständiges Modell
eh0_eh0     = t(eps_hat_0) %*% eps_hat_0                       # RQS reduziertes Modell
eh_eh       = t(eps_hat) %*% eps_hat                           # RQS vollständiges Modell
sigsqr_hat  = eh_eh/(n-p)                                      # Varianzparameterschätzer vollst. Modell
f           = ((eh0_eh0-eh_eh)/p_1)/sigsqr_hat                 # F-Statistik
pval        = 1 - pf(f,p_1,n-p)                                # p-Wert

# Ausgabe
cat("F-statistic:", f, "on", p_1, "and", n-p, "DF", "p-value: ", paste(pval))
```

```
> F-statistic: 540 on 2 and 97 DF p-value:  0
```

Modellformulierung, Modellschätzung und Modellevaluation mit R

```r
fname  = file.path(getwd(), "13_Daten", "13_Multiple_Regression_Daten.csv") # Datensatzdatei
D      = read.table(fname, sep = ",", header = TRUE)                        # Datensatzeinlesen
alm    = lm(BDI ~ Age + Duration, data = D)                                 # Modellformulierung und Modellschätzung
summary(alm)
```

```
>
> Call:
> lm(formula = BDI ~ Age + Duration, data = D)
>
> Residuals:
>    Min     1Q Median     3Q    Max
> -7.178 -2.165  0.438  2.585  7.119
>
> Coefficients:
>             Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
> (Intercept)   5.4225     1.9024    2.85   0.0053 **
> Age          -0.4815     0.0198  -24.33   <2e-16 ***
> Duration      1.9119     0.0893   21.41   <2e-16 ***
> ---
> Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
>
> Residual standard error: 3.07 on 97 degrees of freedom
> Multiple R-squared:  0.918,   Adjusted R-squared:  0.916
> F-statistic:  540 on 2 and 97 DF,  p-value: <2e-16
```

Anwendungsszenario

Modellformulierung

Modellschätzung

Modellevaluation

Selbstkontrollfragen

Selbstkontrollfragen

1. Erläutern Sie das Anwendungsszenario und die Ziele der multiplen Regression.
2. Definieren Sie das Modell der multiplen Regression.
3. Erläutern Sie die Begriffe Regressor, Prädiktor, Kovariate und Feature im Rahmen der multiplen Regression.
4. Erläutern Sie, warum $\hat{\beta} \approx$ Regressorkovariabilität^{-1}Regressordatenkovariabilität gilt.
5. Erläutern Sie den Zusammenhang zwischen Betaparameterschätzern und Korrelationen in einem multiplen Regressionmodell mit Interzeptprädiktor und zwei kontinuierlichen Prädiktoren anhand der Formel

$$\hat{\beta}_1 = \frac{r_{\upsilon,x_1} - r_{\upsilon,x_2} r_{x_1,x_2}}{1 - r_{x_1,x_2}^2} \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}}. \tag{41}$$

6. Erläutern Sie den Zusammenhang zwischen Betaparameterschätzern und partieller Korrelation in einem multiplen Regressionmodell mit Interzeptprädiktor und zwei kontinuierlichen Prädiktoren anhand der Formel

$$\hat{\beta}_1 = r_{\upsilon,x_1 \backslash x_2} \sqrt{\frac{1 - r_y^2, x_2}{1 - r_{x_1,x_2}^2}} \frac{s_\upsilon}{s_{x_1}}. \tag{42}$$

7. $X \in \mathbb{R}^{n \times 2}$ sei die Designmatrix eines multiplen Regressionsmodells mit zwei Prädiktoren und Betaparametervektor $\beta := (\beta_1, \beta_2)^2$. Geben Sie den Kontrastgewichtsvektor an, um die Nullhypothese $H_0 : \beta_1 = \beta_2$ mithilfe der T-Statistik zu testen.