UNIVERSITÄT LEIPZIG

Eine Einführung in R: Das Lineare Modell II

Bernd Klaus, Verena Zuber
Institut für Medizinische Informatik, Statistik und Epidemiologie (IMISE),

Universität Leipzig

6. Dezember 2012

I. Modelldiagnose

Wiederholung: Residuenanalyse

Frage: Sind die Voraussetzungen für das lineare Modell erfüllt?
Zu untersuchen sind:

1. **Anpassung des Modells an die Daten**:
   $\rightarrow$ Residuen gegen gefittete Wert $\hat{Y}$
2. **Normalverteilung des Fehlers**:
   $\rightarrow$ QQ-Plot: Quantile der Residuen gegen die theoretische NV
3. **Homoskedastizität des Fehlers**:
   $\rightarrow$ Standardisierte Residuen gegen gefittete Wert $\hat{Y}$,
   wenn die geeignet mit H standardisierten Residuen abhängig von $\hat{Y}$ sind, deutet dies auf ungleiche Varianzen der Fehler hin

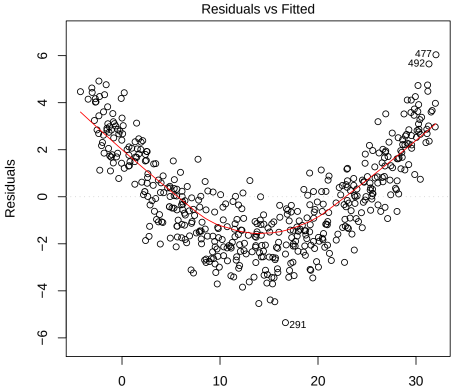
Beispiele: Simulationen

```
h1<-seq(1,6,0.01)
X<-h1+rnorm(length(h1), mean=0, sd=0.1)
```

1. Kein linearer, sondern quadratischer Zusammenhang:
   ```
   epsilon1<-rnorm(length(X), mean=0, sd=1)
   Y1<-X*X+epsilon1
   ```
2. Kein Normal-, sondern gleichverteilter Fehler:
   ```
   epsilon2<-runif(length(X), min=-1, max=1)
   Y2<-X+epsilon2
   ```
3. Die Fehler haben unterschiedliche Varianz, bzw sind abhängig von Y:
   ```
   epsilon3<-rnorm(length(X),
   mean=rep(0,length(X)), sd=X)
   Y3<-X+epsilon3
   ```

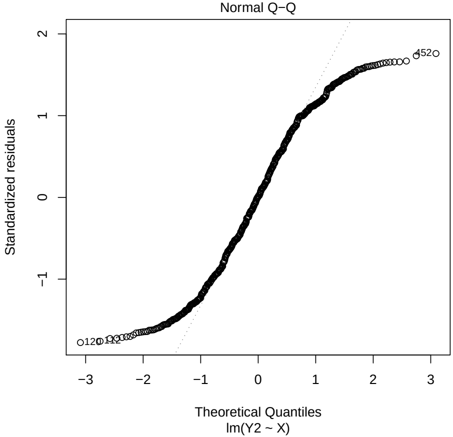
Modelldiagnose in R I: Residuen gegen gefittete Werte

- Residuen gegen gefittete Werte $\hat{Y}$ zur Untersuchung der Anpassung des Modells an die Daten



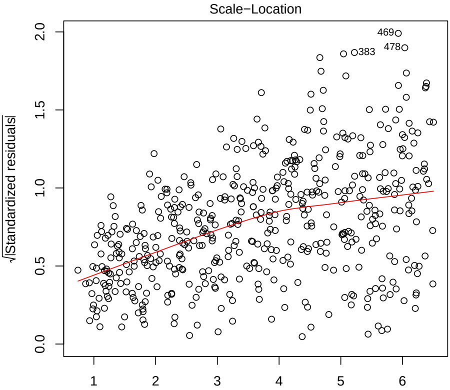
Modelldiagnose in R II: Residuen-QQ

- Plot der studentisierten gegen die theoretischen (NV) Residuen zur Untersuchung der Normalverteilung des Fehlers



Modelldiagnose in R III: Standardisierte Residuen gegen $\hat{Y}$

- Standardisierte, absolute Residuen gegen gefittete Werte $\hat{Y}$ zur Untersuchung der Homoskedastizität des Fehlers



R^2 oder das adjustierte R^2

In der multiplen Regression wird zum R^2 meist auch das adjustierte R^2 ausgegeben:

$$R^2_{adjust} = R^2 - \frac{p - (1 - R)}{n - p - 1}$$

Dann können auch Modelle verglichen werden, die eine unterschiedliche Zahl p an Variablen besitzen.

Weitere Kriterien sind Akaike Information Criterion (AIC), Baysian Information Criterion (BIC) und viele mehr!

Interpretation der Koeffizienten

Metrische erklärende Variablen

- Der Regressionskoeffizient β_j einer Variable X_j gibt deren Einfluss auf die Zielgröße Y unter gleichzeitiger Kontrolle der anderen Variablen an.
- Bei einer metrischen Variable X_j gilt:
  (Gegeben die übrigen $(p-1)$ Variablen werden festgehalten)
  Wenn sich X_j um eine Einheit erhöht, so verändert sich Y um β_j Einheiten.
- Beispiel: Datensatz "airquality"

$$\texttt{Ozone}_i = -145.7 + 2.27847 \cdot \texttt{Temp}_i + 0.05711 \cdot \texttt{Solar.R}_i + \varepsilon_i$$

- "Wenn die Temperatur (bei gegebener Sonneneinstrahlung) um eine Einheit steigt, steigt die Ozonkonzentration um ca. 2.3 Einheiten"

Kategoriale erklärende Variablen

- Warnung: Kategoriale Variablen X_j können nicht wie metrische interpretiert werden!
- Vorgehensweise:
  1. Wähle eine Kategorie als Referenz
  2. Führe binäre Variablen ("Dummyvariablen") ein, die angeben, ob eine Beobachtung in die Referenzkategorie oder in eine andere Kategorie fällt
  3. Wenn k Kategorien vorliegen, müssen $k-1$ Dummyvariablen konstruiert werden
  4. Interpretation:
     (Gegeben die übrigen $(p-1)$ Variablen werden festgehalten)
     Wenn eine Beobachtung nicht in die Referenzkategorie fällt, so verändert sich Y um β_j Einheiten
- Deswegen ist es in R essentiell, kategoriale Variablen als Faktoren zu führen (dann berechnet R die Dummyvariablen automatisch)

Beispieldaten: "Work"

Untersuchung verschiedener Einflussfaktoren (`COMP`, `RTW`, `PVT`) auf den prozentualen Anteil der Beschäftigten im öffentlichen Sektor `DENS`, die in einer Gewerkschaft organisiert sind, in verschiedenen amerikanischen Bundesstaaten.

- Metrische Variablen:
  - `DENS`: *Percent of public sector employees in unions, 1982*
  - `PVT`: *Percent of private sector employees in unions, 1982*
- Kategoriale Variablen:
  - `COMP`: *State bargaining laws cover public employees (1) or not (0)* (Referenzkategorie: Keine Rechte)
  - `RTW`: *State right-to-work law (1) or not (0)*

Zunächst ist folgendes lineares Modell von Interesse:

$$\mathtt{DENS}_i = \beta_0 + \alpha_{RTW_i} + \beta_1 \cdot \mathtt{PVT}_i + \varepsilon_i$$

Beispieldaten: "Work"

- `Work <- read.table("Work.csv", header = TRUE)`
- Umwandlung von `RTW` in einen Faktor
  `Work$RTW <- as.factor(Work$RTW)`
- `test <- lm(DENS ~ RTW + PVT, data = Work)`

Ausgabe in `R`:

```
 Coefficients:
(Intercept)    RTW1      PVT
35.3881       -10.8599   0.1418
```

Interpretation von α_{RTW}: Gibt es ein "Recht auf Arbeit", so verringert sich der Anteil der im öffentlichen Dienst in einer Gewerkschaft organisierten Beschäftigten um ca. 11%

Testen der Regressionskoeffizienten

Der standardisierte Regressionskoeffizient ist t-verteilt mit einer Freiheitsgradzahl, die sich aus dem Stichprobenumfang n und der Variablenzahl p bestimmt:

$$T_j = \frac{\hat{\beta}_j}{\mathrm{SE}(\hat{\beta}_j)} \quad \sim t(n-p-1)$$

$\mathrm{SE}(\hat{\beta}_j)$: Standardfehler von $\hat{\beta}_j$

- $H_0 : \beta = 0$ **ablehnen, falls** $|T_j| > t_{1-\alpha/2}(n-p-1)$
- $H_0 : \beta > 0$ **ablehnen, falls** $T_j < t_{\alpha}(n-p-1)$
- $H_0 : \beta < 0$ **ablehnen, falls** $T_j > t_{1-\alpha}(n-p-1)$

`R` gibt in der `summary` sowohl die βs (`estimate`), deren **Standardabweichung** (`Std. Error`) und t-**Statistik** (`t value`) und p-**Wert** (`Pr(>|t|)`) an.

Interaktionen

- Das Modell "test" besitzt nur ein R^2 von 0.25
- Wahrscheinlich sind wichtige Einflussfaktoren noch nicht berücksichtigt !
- Wir untersuchen daher das Modell:

$$\texttt{DENS}_i = \beta_0 + \alpha_{RTW_i} + \alpha_{COMP_i} + \alpha_{COMP_i * RTW_i} + \beta_1 \cdot \texttt{PVT}_i + \varepsilon_i$$

- Der Koeffizient $\alpha_{COMP_i * RTW_i}$ beschreibt eine multiplikative Interaktion der Faktoren `COMP` und `RTW`
- D.h. dieser Effekt besteht, wenn gleichzeitig Recht auf Arbeit UND Tarifverhandlungen der Gewerkschaftsmitglieder im öffentlichen Dienst gegeben sind.

Interaktionen - Umsetzung in R

- Das erweiterte Modell

$$\mathtt{DENS}_i = \beta_0 + \alpha_{RTW_i} + \alpha_{COMP_i} + \alpha_{COMP_i * RTW_i} + \beta_1 \cdot \mathtt{PVT}_i + \varepsilon_i$$

- Aufruf der Funktion `lm()`
- `testI <- lm(DENS ~ COMP*RTW + PVT, data = Work)`

Ausgabe in R:

```
Coefficients:
(Intercept)      COMP1       RTW1       PVT    COMP1:RTW1
   27.31371   14.92008   -0.58751   0.04727     -18.38723
```

Interaktionen - Interpretation der Ergebnisse

- `COMP1`: Gibt es ein Recht auf Tarifverhandlungen der Gewerkschaftsmitglieder im öffentlichen Dienst, aber KEINES auf Arbeit, STEIGT der Anteil der öffentlich Beschäftigten, die gewerkschaftlich organisiert sind, um 14.9%.
- `RTW1`: Gibt es ein Recht auf Arbeit, aber KEINES auf Tarifverhandlungen der Gewerkschaftsmitglieder im öffentlichen Dienst, SINKT der Anteil der öffentlich Beschäftigten, die gewerkschaftlich organisiert sind, marginal um 0.6%.
- `COMP1:RTW1`: Gibt es aber sowohl ein Recht auf Arbeit, als auch auf Tarifverhandlungen der Gewerkschaftsmitglieder im öffentlichen Dienst, so SINKT der Anteil der öffentlich Beschäftigten, die gewerkschaftlich organisiert sind, um ca. $18.4\% + 0.6\% - 14.9\% = 3.5\%$

Variablenselektion

Variablenselektion im Linearen Modell

- Ziel der Regressionsanalyse ist es oft, ein möglichst "gutes" Modell mit möglichst "wenig" Variablen zu erhalten (vergleiche **Occam's Razor**)
- Es gibt zwei weit verbreitete Varianten zur Variablenselektion in der linearen Regression:

1. **Test der Regressionkoeffizienten wie oben beschrieben**
   - $\Rightarrow$ Test einzelner Variablen auf Signifikanz
2. **Schrittweise Selektion von verschachtelten Modellen mittels F-test**
   - $\Rightarrow$ Test auf signifikante zusätzliche Varianzerklärung
   - verschachtelt heißt, dass das "volle" Modell das "reduzierte" komplett enthalten muss

Beispieldaten

Datensatz `cystfibr` aus dem R- Paket `ISwR`. Er enthält Daten von Mukoviszidose-Patienten (Chronische Lungenkrankheit).

- Körpermaße
    - **age** age in years.
    - **sex** 0: male, 1:female.
    - **height** height (cm).
    - **weight** weight (kg).
    - **bmp** body mass (% of normal).
- Lungenfunktionsmaße
    - **fev1** forced expiratory volume.
    - **rv** residual volume.
    - **frc** functional residual capacity.
    - **tlc** total lung capacity.
    - **pemax** maximum expiratory pressure.

Zielgrösse ist **pemax**, die durch die anderen Variablen erklärt werden soll.

1. Selektion mittels *t*-Test I

Vollständiges Modell - adjusted $R^2 = 0.42$

pemax $\sim$ age+sex+height+weight+bmp+fev1+rv+frc+tlc

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(>|t|)
(Intercept)	176.0582	225.8912	0.779	0.448
age	-2.5420	4.8017	-0.529	0.604
sex	-3.7368	15.4598	-0.242	0.812
height	-0.4463	0.9034	-0.494	0.628
weight	2.9928	2.0080	1.490	0.157
bmp	-1.7449	1.1552	-1.510	0.152
fev1	1.0807	1.0809	1.000	0.333
rv	0.1970	0.1962	1.004	0.331
frc	-0.3084	0.4924	-0.626	0.540
tlc	0.1886	0.4997	0.377	0.711

1. Selektion mittels t-Test II

- $\Rightarrow$ Kein einzelner Prediktor signifikant!
- Problem: Korrelation unter den Kovariablen.
- z.B. `cor(frc,tlc) = 0.7`, `cor(age, height) = 0.9`
- $\Rightarrow$ Körpermaße und Lungenfunktionsmaße untereinander stark korreliert!
- wähle einige Repräsentanten aus jeder Gruppe aus!

Reduziertes Modell

pemax $\sim$ age+bmp+sex+fev1+tlc+rv

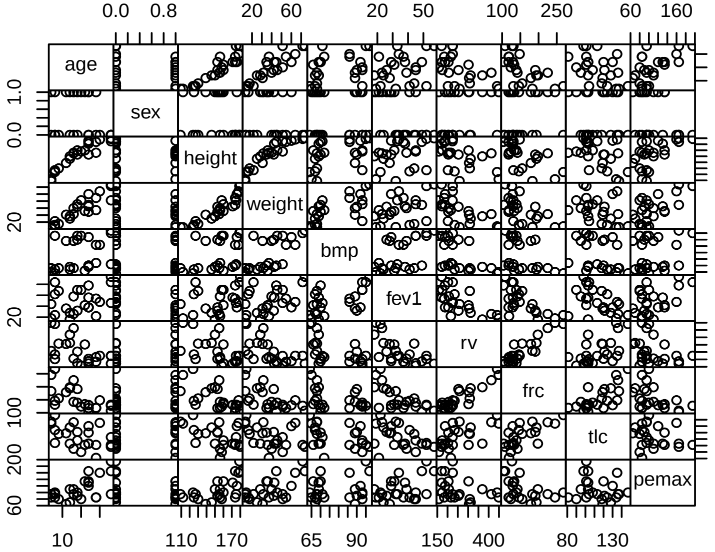
Einschub: Korrelationsstruktur erkennen

- Mittels `pairs` lässt sich ein guter Eindruck von der Korrelationsstruktur bekommen
- `cor` gibt paarweise Korrelationen oder die Korrelationsmatrix aus

Korrelationstruktur untersuchen

```
pairs(cystfibr, gap=0, cex.labels=3)
cor(cystfibr)
```

Einschub: Pairs-Plot für `cystfibr`



1. Selektion mittels t-Test III

Reduziertes Modell

pemax age+bmp+sex+fev1+tlc+rv

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(>|t|)	
(Intercept)	-83.5254	82.8081	-1.009	0.32650	
age	5.0380	1.2956	3.889	0.00108	**
bmp	-0.4030	0.5638	-0.715	0.48397	
sex	4.9907	12.9130	0.386	0.70367	
fev1	1.9313	0.7800	2.476	0.02345	*
tlc	0.4651	0.4046	1.149	0.26543	
rv	0.1135	0.1007	1.127	0.27450	

Entferne schrittweise alle Variablen mit hohen p-Werten!, zuerst **sex**

1. Selektion mittels t-Test IV

Dieses Vorgehen ergibt

Endgültiges Modell

pemax $\sim$ age+fev1+rv

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(>|t|)	
(Intercept)	-83.5254	82.8081	-1.009	0.32650	
age	4.54157	1.19442	3.802	0.00104	**
fev1	1.57425	0.60316	2.610	0.01635	*
rv	0.16122	0.08998	1.792	0.08761	.

adjusted $R^2 = 0.46$, also besser als beim vollen Modell!

1. Selektion mittels F-Test I

- Wir benutzen das reduzierte Modell nach Berücksichtigung von der Korrelationen innerhalb der **Körpermaße** und **Lungenfunktionsmaße**

Reduziertes Modell

anova(lm(pemax$\sim$ age+bmp+sex+fev1+rv+tlc))

	Df	Sum Sq	Mean Sq	F value	Pr(>F)	
age	1	10098.5	10098.5	15.7840	0.0008921	***
bmp	1	0.2	0.2	0.0002	0.9877060	
sex	1	963.8	963.8	1.5065	0.2354890	
fev1	1	1944.2	1944.2	3.0388	0.0983542	.
rv	1	1464.5	1464.5	2.2891	0.1476481	
tlc	1	845.2	845.2	1.3211	0.2654344	

1. Selektion mittels F-Test II

- Die F-Test-Tabelle entspricht dem schrittweisen entfernen der Variablen von unten nach oben!
- Der F-Wert von `tlc` ergibt sich alternativ als

F-Wert von `tlc`

anova(lm(pemax $\sim$ age+bmp+sex+fev1+tlc), lm(pemax$\sim$ age+bmp+sex+fev1))

- Wir gehen nach Korrelationsgruppen vor und entfernen erst `tlc`, dann `bmp` und `sex`
- Dies ergibt, dass nur age und `fev1` im Modell verbleiben sollten

1. Selektion mittels F-Test III

Ergebnis:

Modell nur mit `age` und `fev`

summary(lm(pemax age+fev1))

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(>|t|)	
(Intercept)	27.8637	20.1497	- 1.383	0.18059	**
age	3.4735	1.0858	3.199	0.00414	**
fev1	0.8917	0.4906	1.818	0.08275	.

adjusted $R^2 = 0.40$

Variablenselektion im Linearen Modell - Fazit

- Es gibt **keinen** “Königsweg” bei der Variablenselektion
- Berücksichtigung von Korrelation sehr wichtig
- Variablenselektion = eigener Forschungszweig der Statistik, hier wurden nur die zwei wichtigsten Methoden gezeigt
- Nicht so sehr auf “Signifikanzen” achten!
- $\Rightarrow$ führt man viele Tests gleichzeitig durch, findet man fast zwangsläufig Signifikanzen! (Stichwort: multiples Testen)

Prädiktion

Vorhersage im Linearen Modell

- Gegeben: Lineares Modell mit Regressionskoeffizienten, die auf Basis bestehender Daten ermittelt wurden
- Neu: Eine neue Beobachtung X_{n+1} deren Zielgröße Y_{n+1} unbekannt ist
- Ziel: Vorhersage der unbekannten Zielgröße Y_{n+1}

Vorgehensweise zur Vorhersage:

- Bilde eine Vorhersageregel (*prediction rule*) aus dem gegeben Modell
- Setze die Werte der neuen Beobachtung X_{n+1} in diese Vorhersageregel ein und berechne die Vorhersage $\hat{Y}_{n+1}$

Anwendungsbeispiele

- Verwendung von sogenannten "Biomarkern" (wie bestimmte Genexpressionswerte, Variationen der DNA, oder bestimmte Ausprägungen der Proteinstruktur) zur Vorhersage von Krebsarten, Alter bis Ausbruch von Alzheimer, uvm.
- Neurowissenschaften: Vorhersage von Handlungen, Emotionen auf Basis von bestimmten Mustern in der Gehirnaktivität.
- Aus der Wirtschaft, Prognose aus Zeitreihen zur Konjunkturlage.
- Komplexe räumlich-zeitliche Modelle zu Klimaprognosen.

Beispiel: *Airquality*-Daten

- Gegeben: Lineares Modell mit Regressionskoeffizienten aus dem Datensatz "airquality"

$$\texttt{Ozone}_i = -145.7 + 2.27847 \cdot \texttt{Temp}_i + 0.05711 \cdot \texttt{Solar.R}_i + \varepsilon_i$$

- Neu: 3 neue Beobachtungen X_{n+1} `newdata`, deren Zielgröße Y_{n+1} unbekannt sind

Ozone	Solar.R	Temp
?	80	110
?	80	112
?	80	114

- Ziel: Vorhersage der unbekannten Zielgröße Y_{n+1}

Beispiel: *Airquality*-Daten

- Berechnung der Vorhersageregel `air`:
  `air <- lm( formula= Ozone ~ Temp + Solar.R, data= airquality)`
- Vorhersage der Ozonwerte für `newdata` mit Hilfe des Modells `air` mit dem R-Aufruf: `predict(air,newdata)`
- Dies ergibt folgende Vorhersagen:

Ozone	Solar.R	Temp
109.4970	80	110
114.0539	80	112
118.6108	80	114