Thema 10: Lineare Modelle

QM1, SoSe 22

HOCHSCHULE ANSBACH

Grundlagen

Drei Arten von Zielen wissenschaftlicher Studien

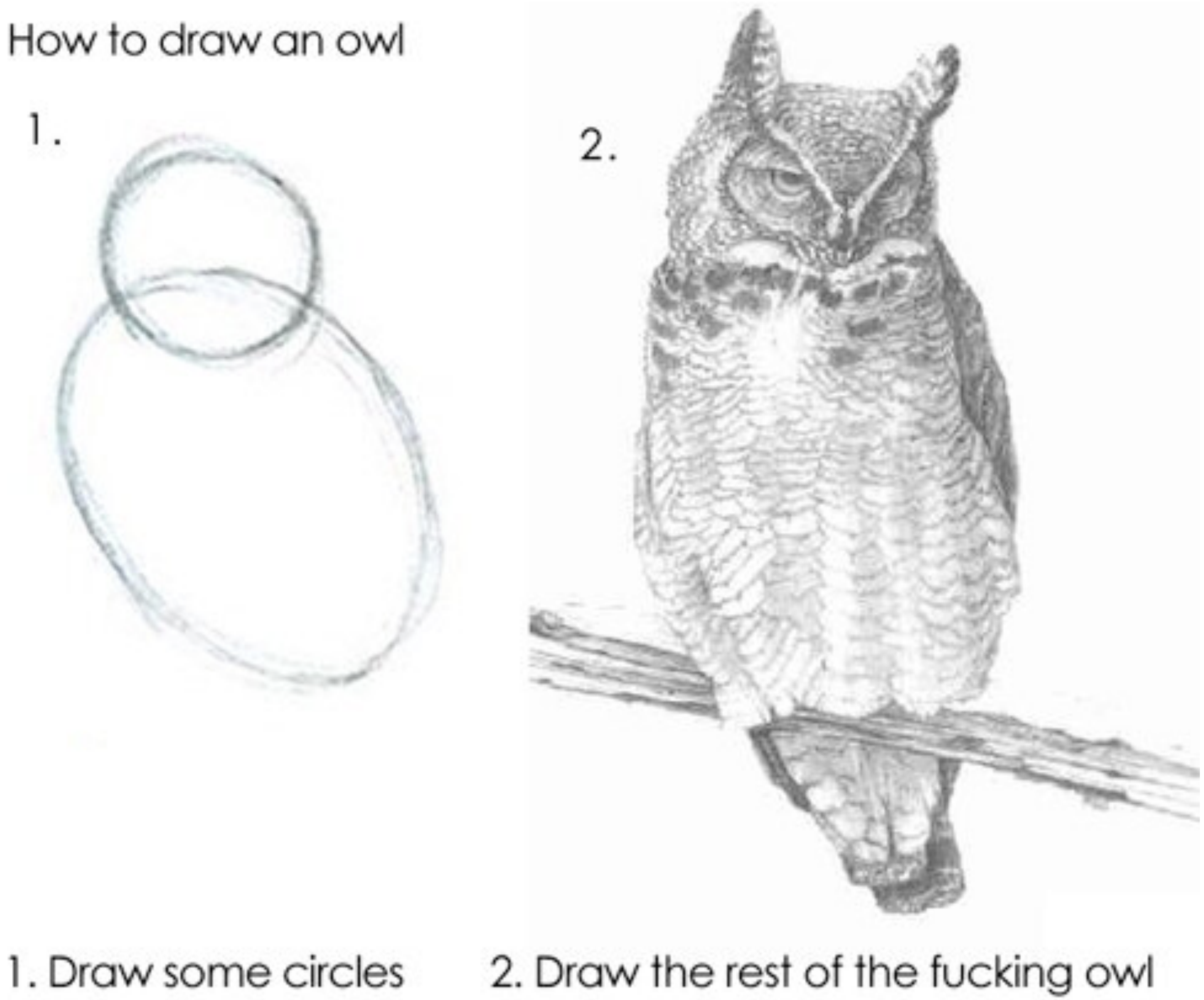
Deskription

Explikation

Prognose

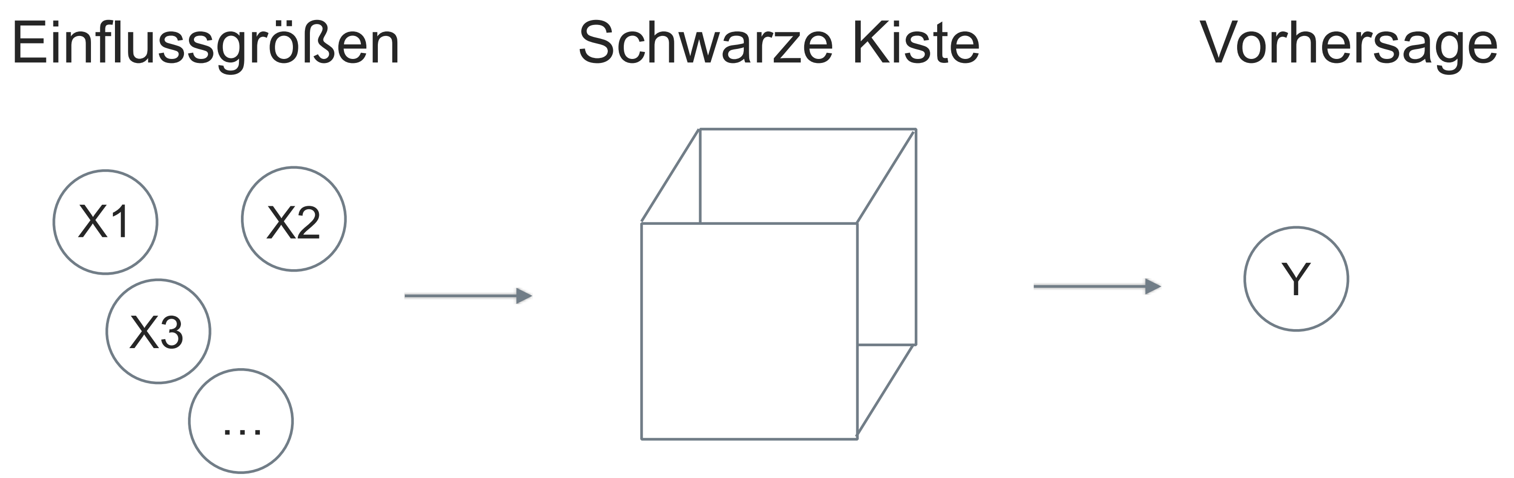
Was ist ein Modell?

Modellieren als mirakulöser Zwischenschritt ?



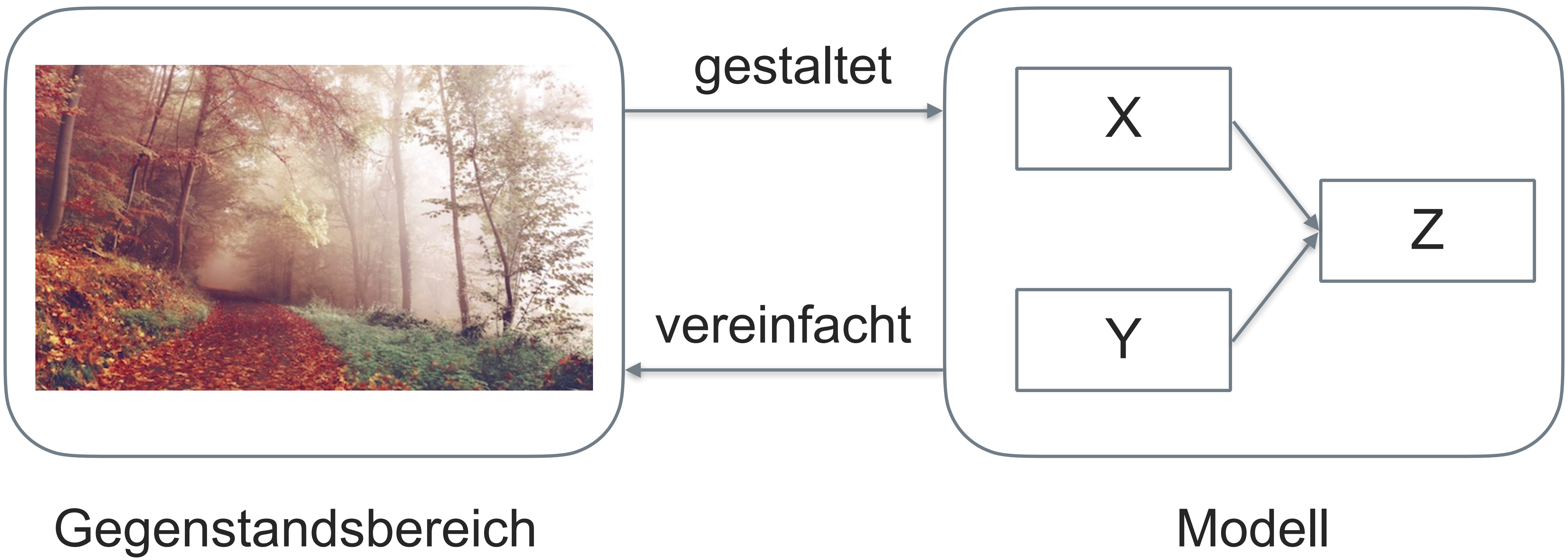
Quelle

Wie wichtig ist Transparenz im Modellieren?



http://www.sciencecartoonsplus.com/pages/gallery.php

Modellieren



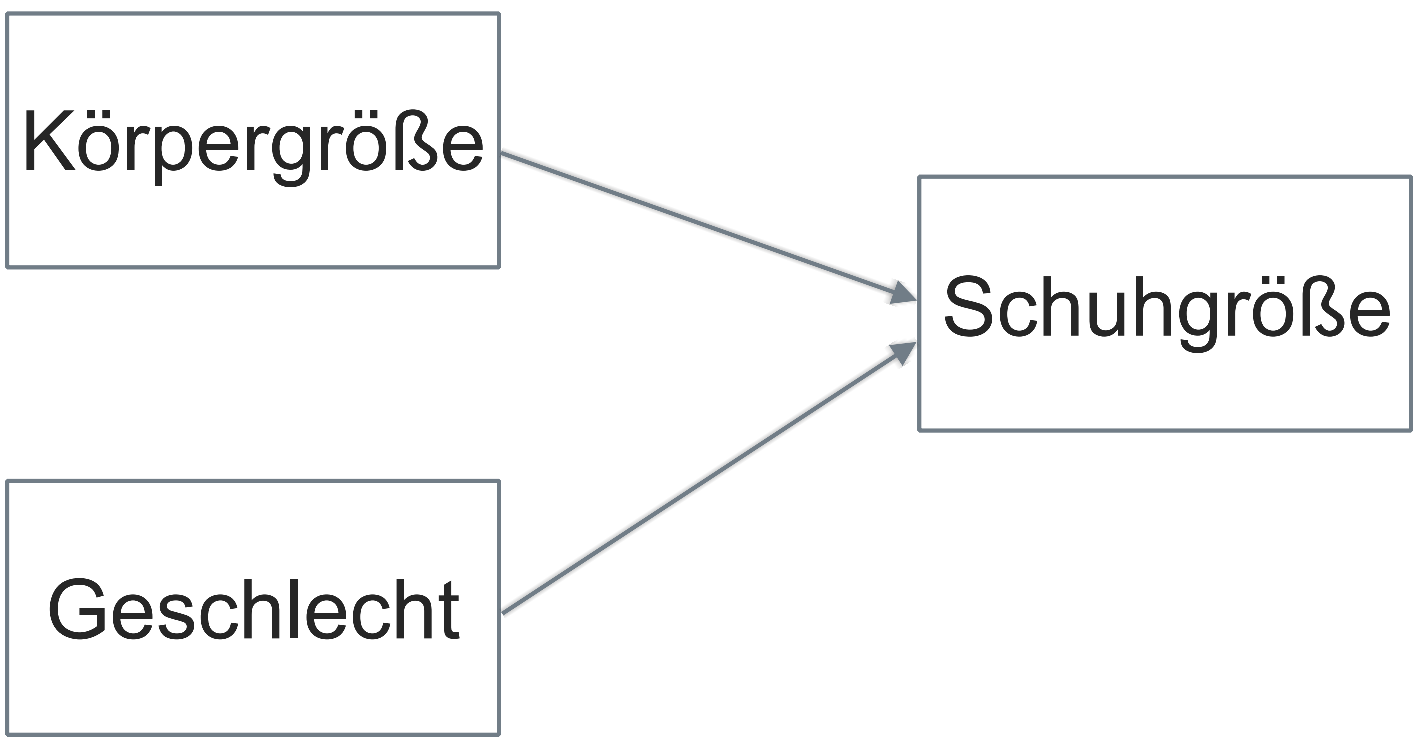
Beispiel zum Modellieren 1

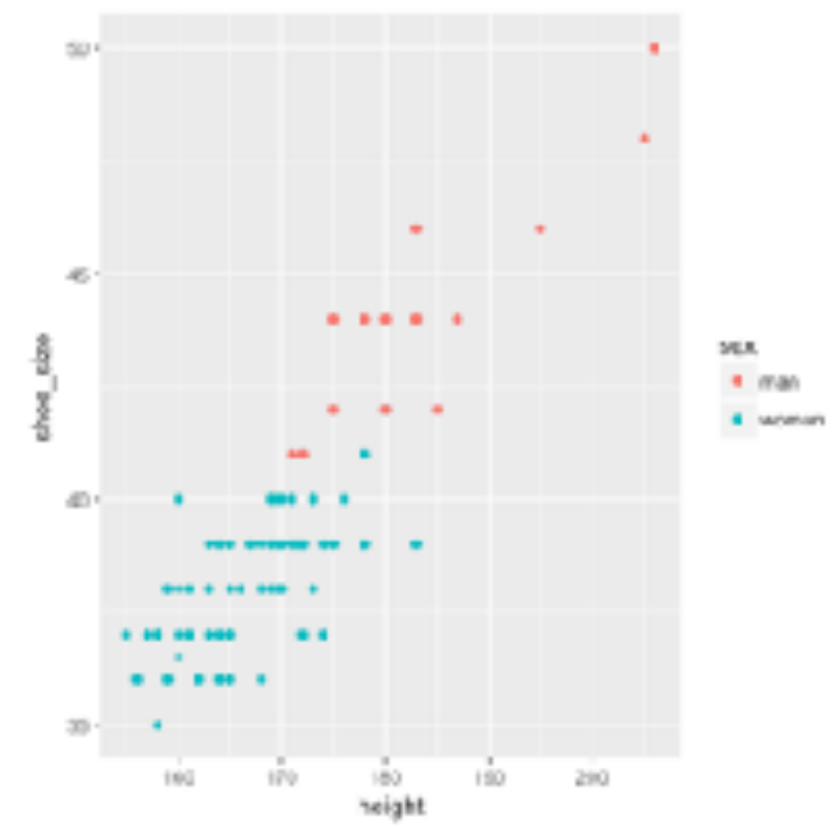
Körpergröße → Schuhgröße

Prädiktor, UV, X

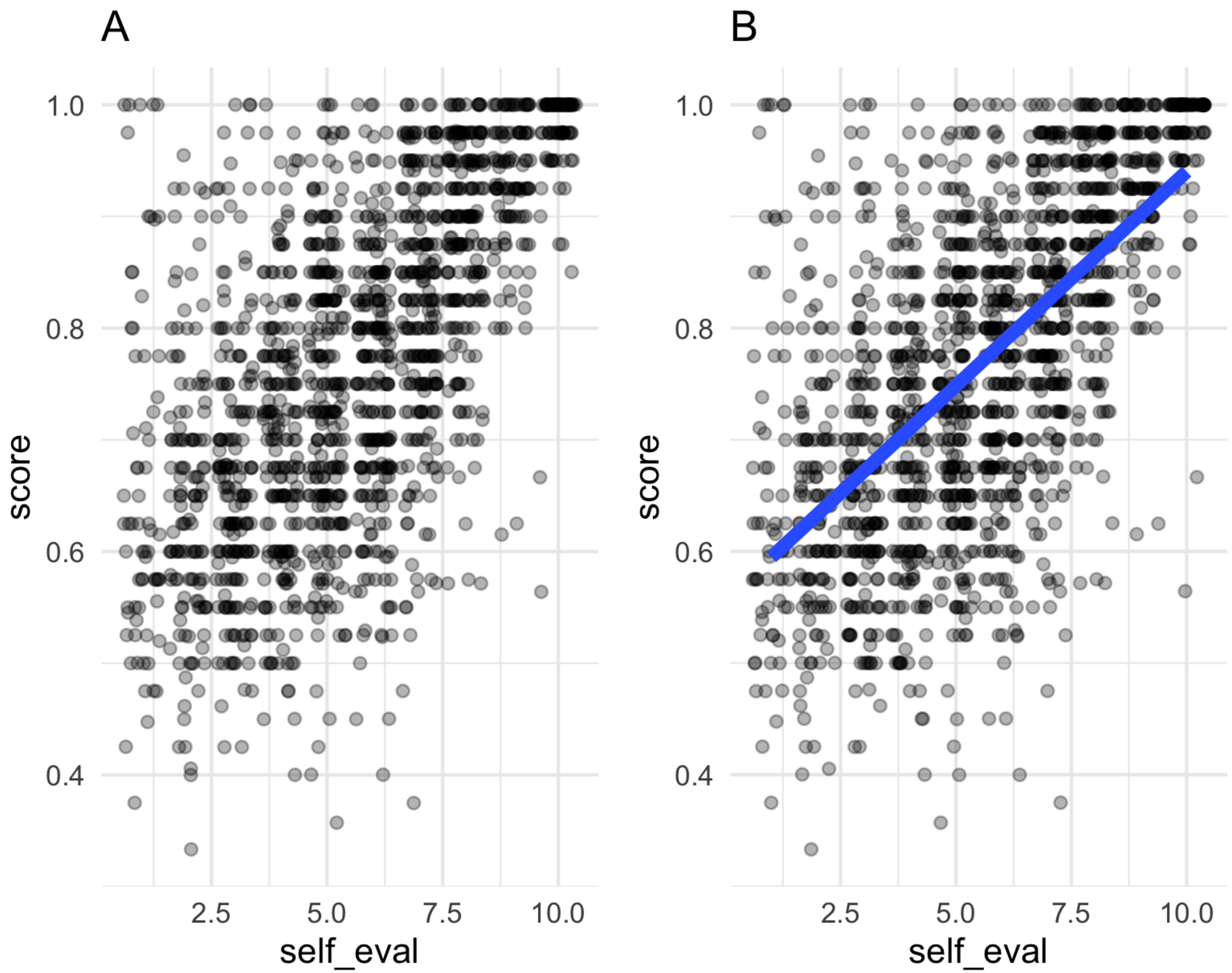
Kriterium, AV, Y

Beispiel zum Modellieren 2



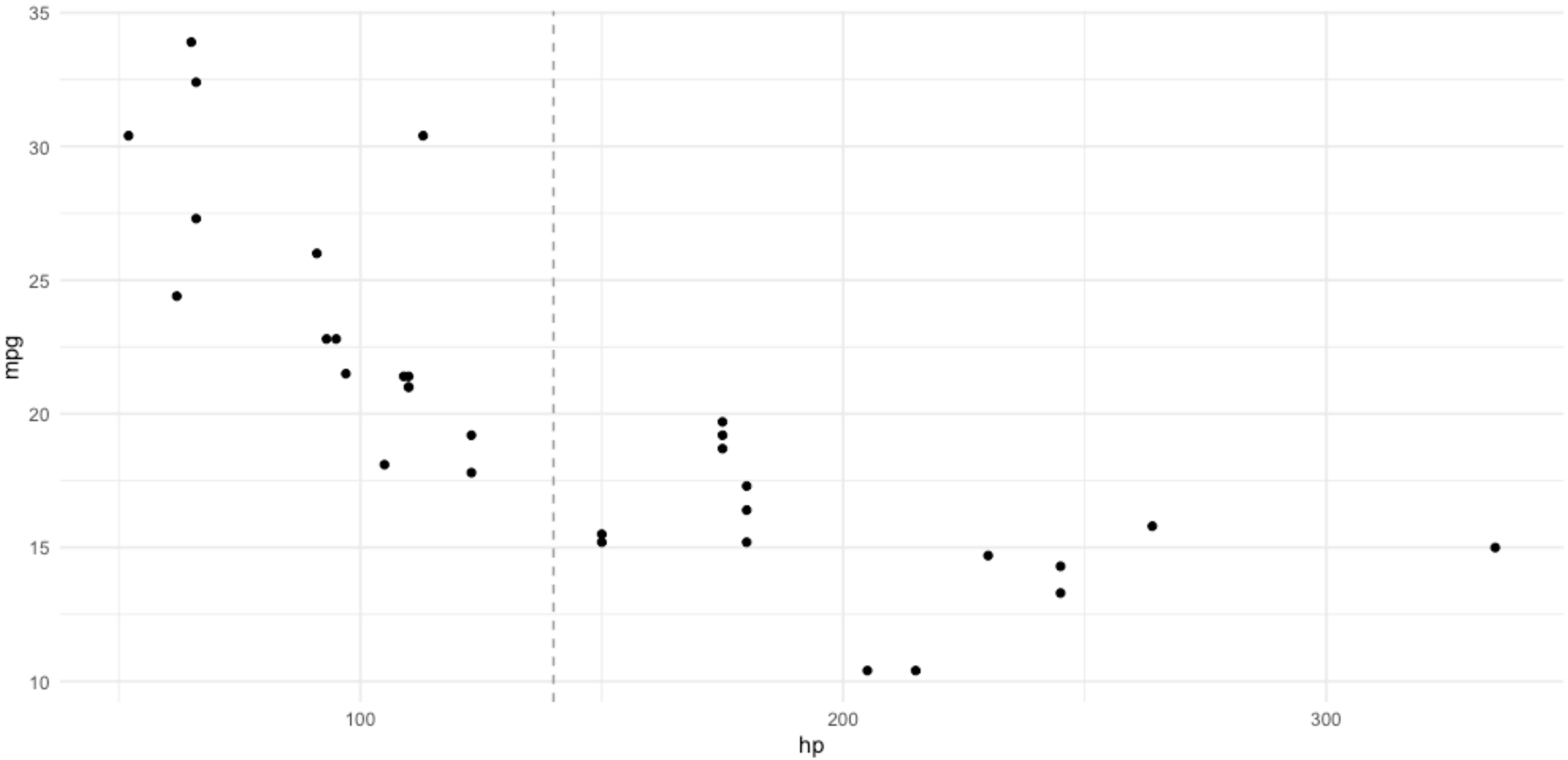


Beispiel zum Modellieren 2



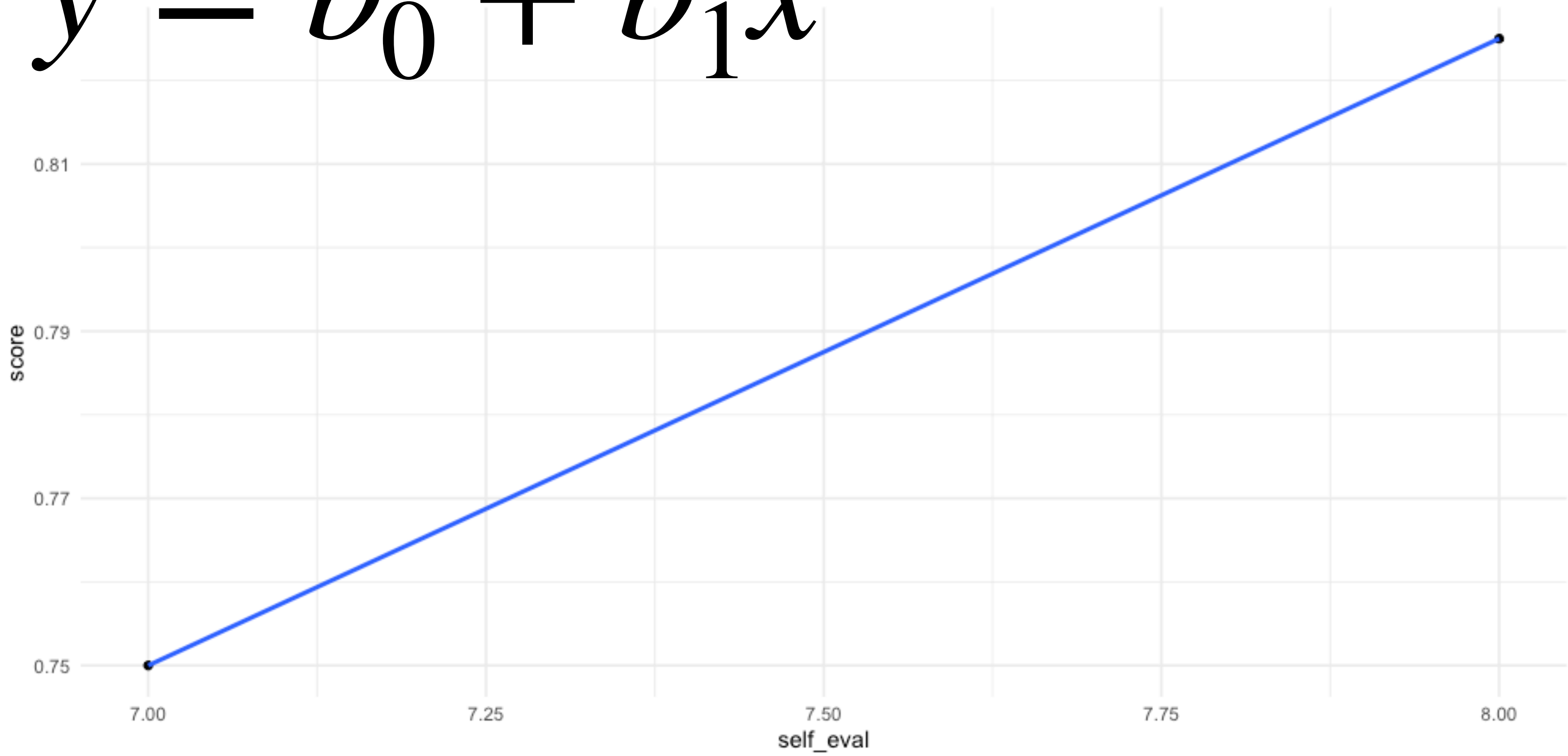
Geraden als Modelle

Wieviel Sprit braucht eine Karre mit 140 PS?



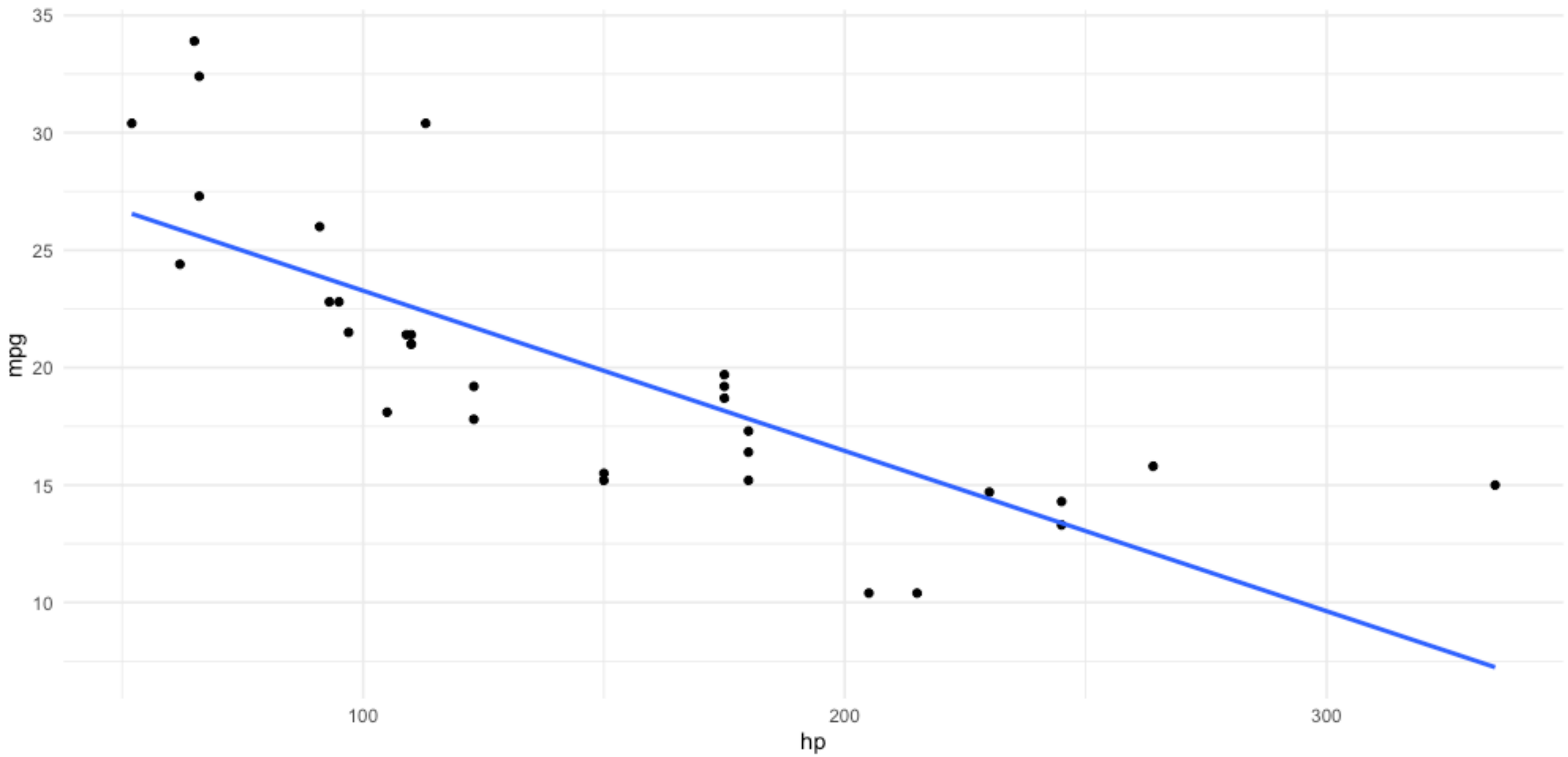
Eine Gerade als Modell

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x$$



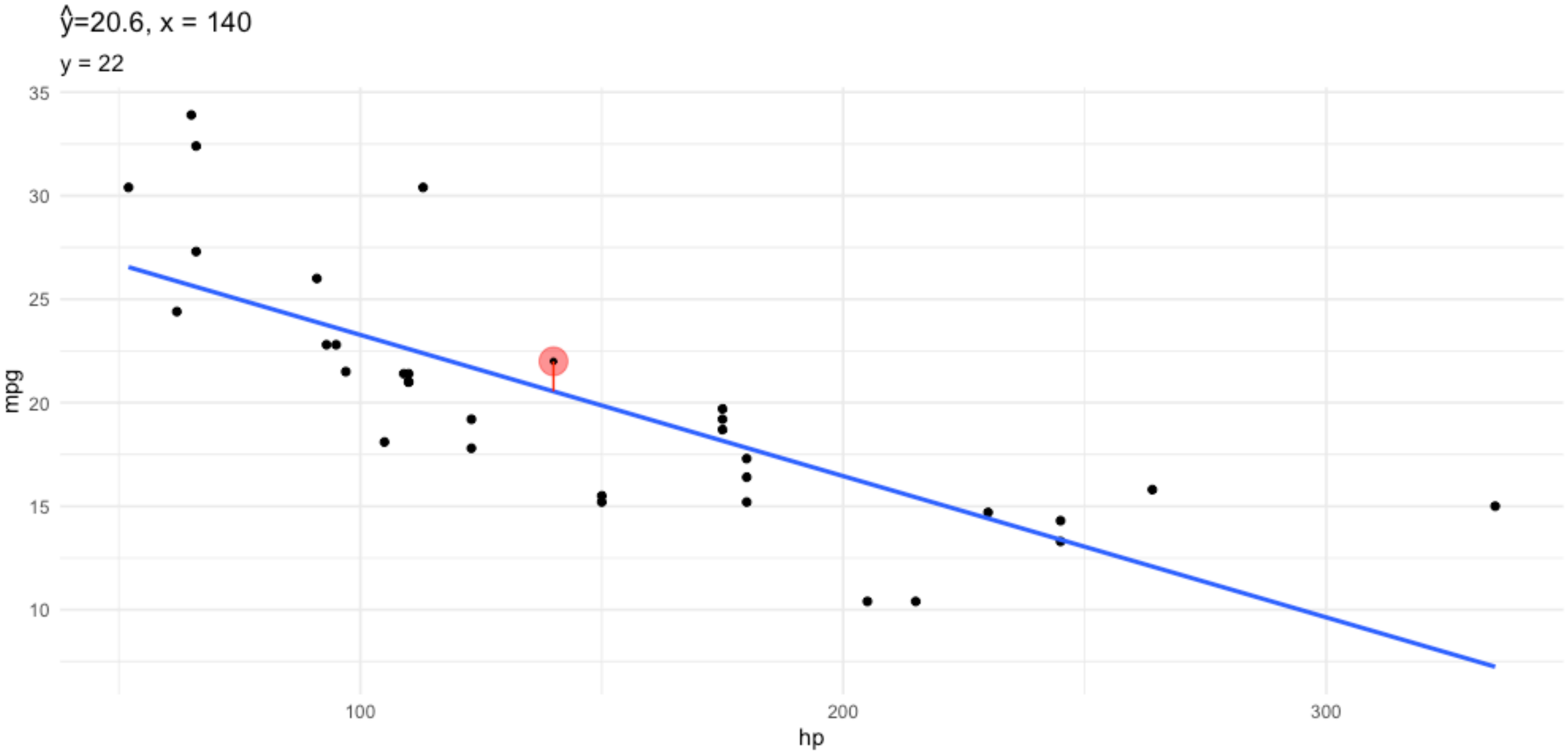
- Eine Gerade ist durch zwei Koeffizienten determiniert: Achsenabschnitt (b_0) und Steigungen (b_1).
- Kennt man die Koeffizienten, so kann man für jeden X-Wert den zugehörigen Y-Wert (Funktionswert) ausrechnen.

Spritverbrauch als Funktion von PS

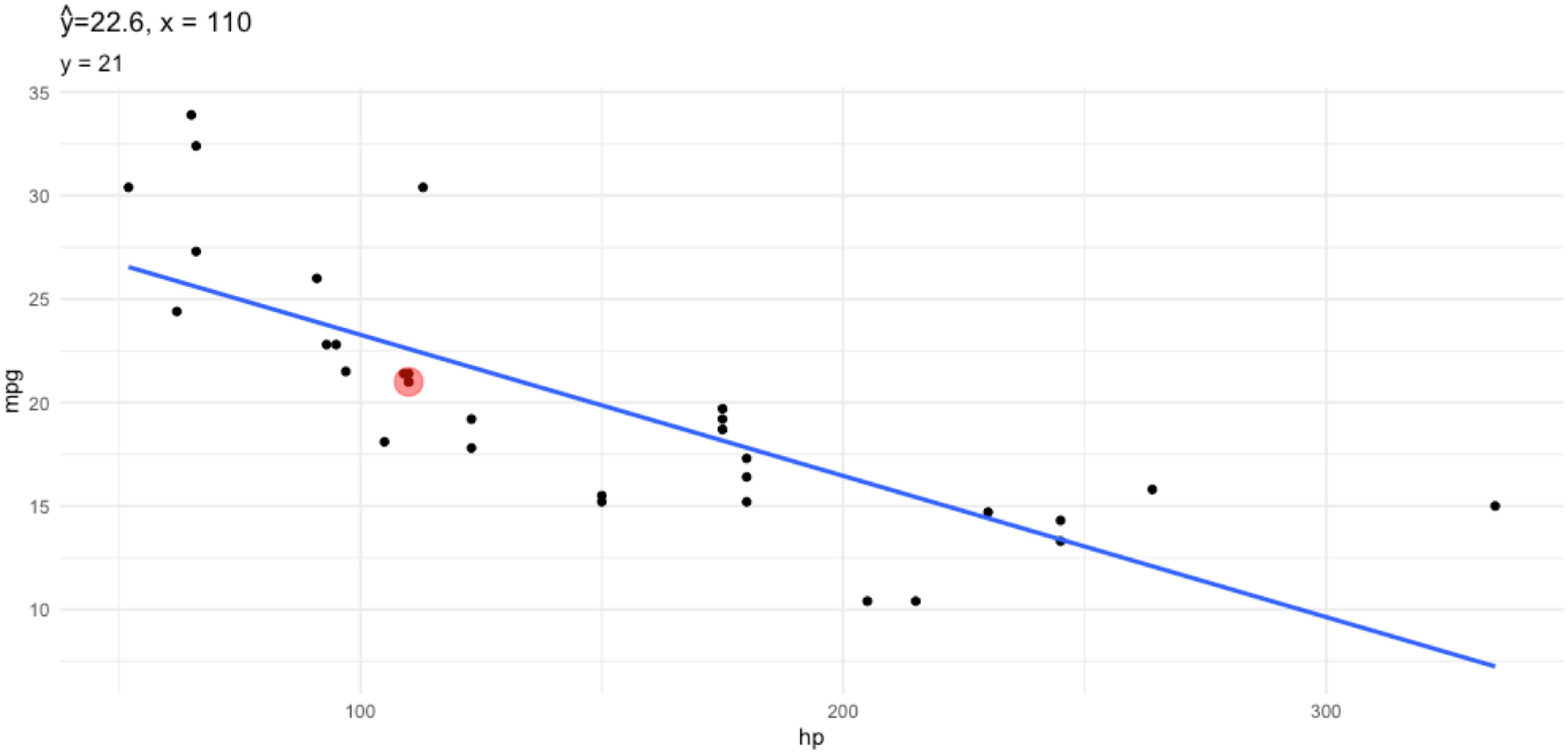


$$\hat{y} = 30 - 0.07 \cdot \text{PS}$$

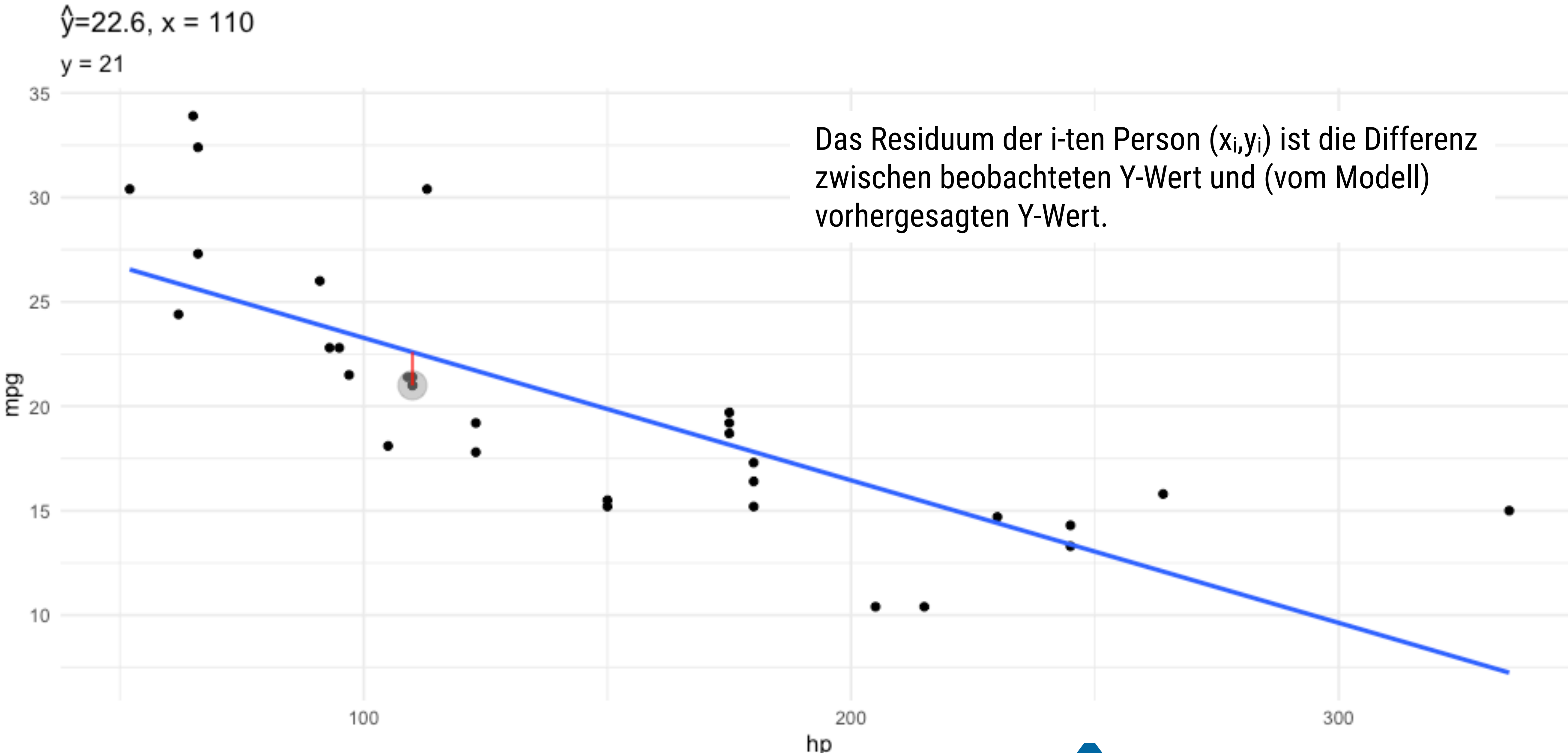
Gerade als Modell, nützlich zur Vorhersage



Wieviel Sprit braucht diese Karre?



Vorhersagefehler (Residuum, e)

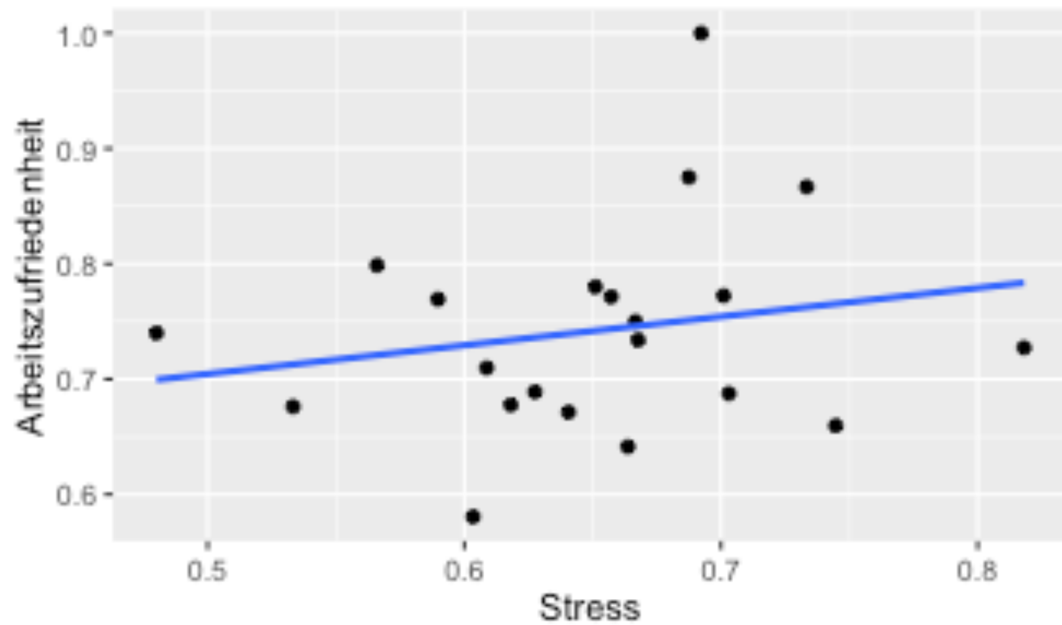


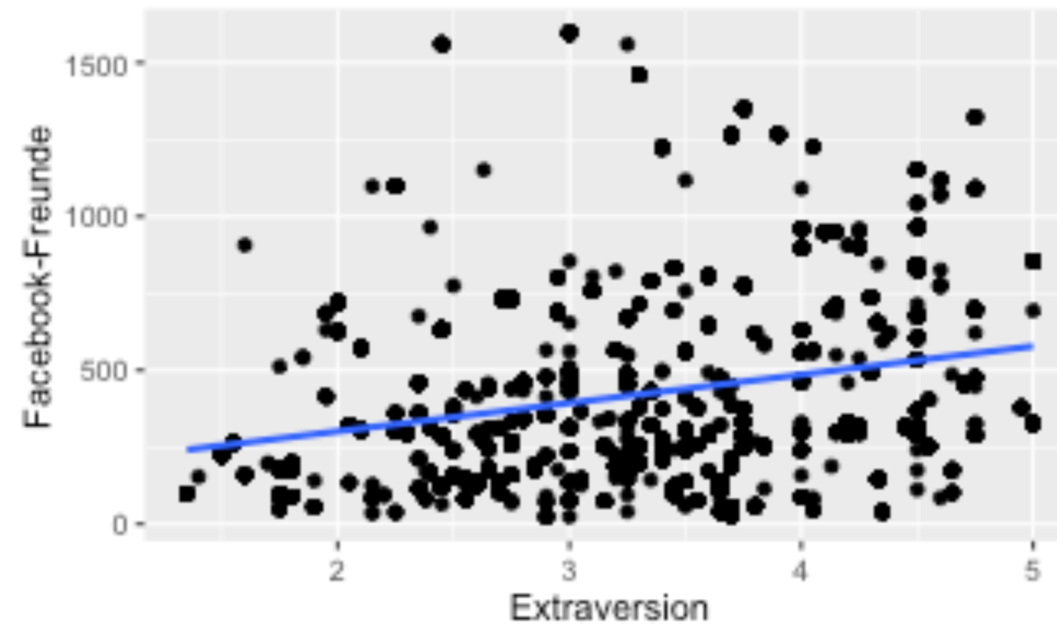
Das Residuum der i-ten Person (x_i,y_i) ist die Differenz zwischen beobachteten Y-Wert und (vom Modell) vorhergesagten Y-Wert.

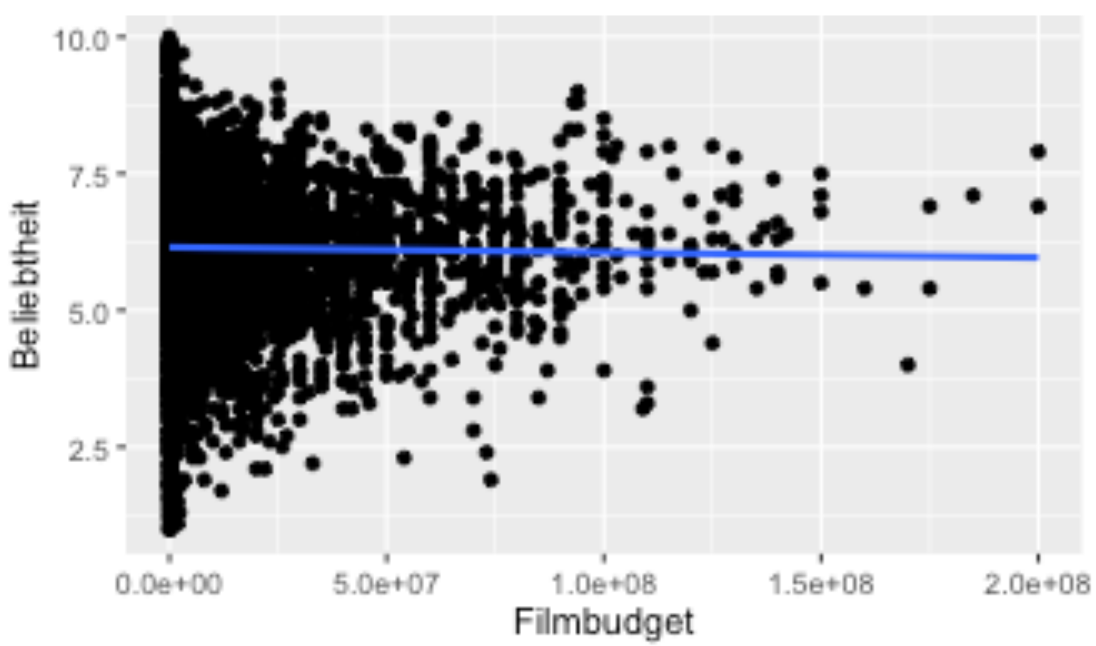
$$e_i = y_i - \hat{y}_i$$

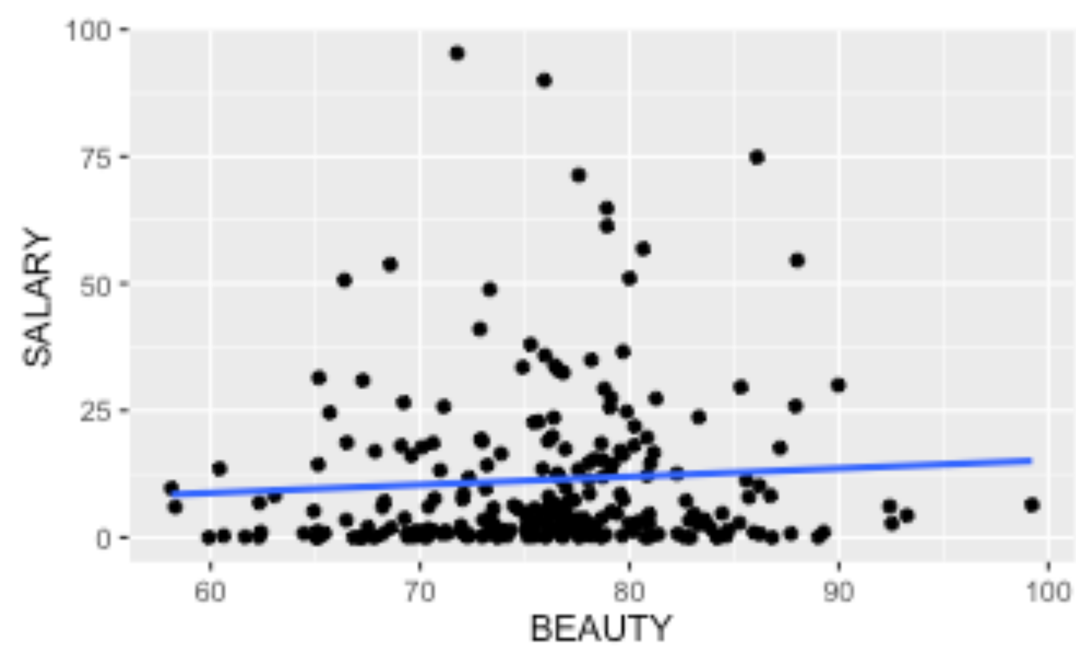
Regressionsgeraden können sich unterscheiden

- Regressionsgeraden können hinsichtlich Achsenabschnitt und Steigung unterscheiden
- Hat die Regressionsgerade eine Steigung von b=*0*, so leistet der Prädiktor keinen Beitrag zur Vorhersage (der Varianz) des Kriteriums.









Regressionsmodell

$$\hat{Y} = b_1 x + b_0 + \epsilon$$

- Eine **Regressionsanalyse** ist ein Weg, den Wert einer metrischen **Kriteriumsvariable Y** (=abhängige Variable, AV) durch eine metrische **Prädiktorvariable X** (=unabhängige Variable, UV) zu **erklären** (damit ist *kein* kausaler Anspruch verbunden).
- Den *statistischen* Einfluss von X auf Y stellen wir anhand einer Gerade durch die Punktewolke dar; die Gerade soll die Punkte möglichst gut beschreiben.
- Dabei wird eine Gerade so in die Punktewolke hineingelegt, dass sie möglichst „mittig" liegt – so, dass die (quadrierten) Abstände zwischen Geraden und Punkte möglichst **gering** sind.
- Anhand der Gerade können wir schätzen, welcher Y-Wert bei einem bestimmten X-Wert vorliegen sollte (man könnte sagen, wir führen einen Y-Wert auf seinen X-Wert zurück).
- Dabei werden wir Fehler machen, wenn unserer Vorhersage nicht perfekt ist.
- Eine Regressionsgerade ist – wie jede Gerade – durch folgende Gleichung gekennzeichnet:

$$\hat{Y} = b_1 x + b_0$$

wobei $\hat{Y}$ („Y-Dach") für den *vorhergesagten* (geschätzten) *Y-Wert*, *b1* für die *Steigung* der Geraden, *x* für den *Prädiktor* und *b0* für den *Achsenabschnitt* (d.h. der Y-Wert wenn x = 0) steht

$$Y = b_0 + b_1 x + \epsilon$$

Der *tatsächliche* (beobachtete) *Y-Wert* setzt sich zusammen aus dem geschätzten Y-Wert ($\hat{Y}$) plus einem Fehlerwert ε.

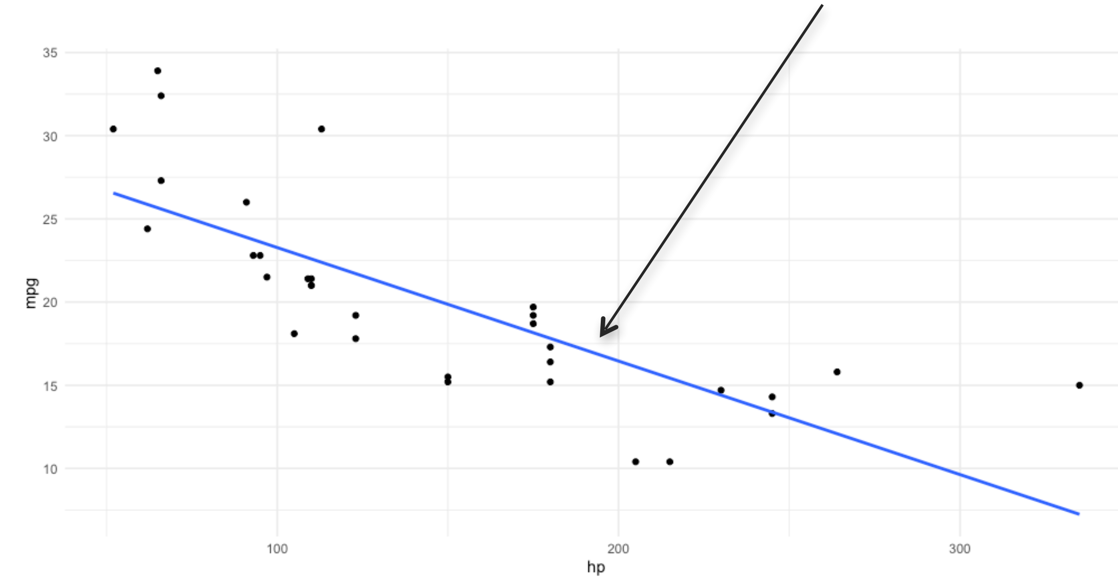
Die Steigung zeigt die Stärke des Zusammenhangs

- Die **Steigung *b1*** der Geraden quantifiziert die Stärke des Einflusses des Prädiktors X auf das Kriterium Y
- Steigung ist definiert als der Zuwachs in Y, wenn man X um eine Einheit erhöht (in R als *Estimate* bezeichnet)
- Abhängig von der Skalierung bei X und Y kann b1 alle möglichen Werte annehmen (positive und negative)
- Größere Werte von b sprechen tendenziell für einen größeren Einfluss von X auf Y
  - Beispiel: Zwei Autos, die sich um 1 PS unterscheiden, unterscheiden sich im Schnitt um ca. -0.07 MPG-Einheiten

- Der Achsenabschnitt b0 (engl. intercept) der Regressionsgeraden gibt den Y-Wert für X = 0 an
  - Beispiel: Bei 0 PS liegt der Spritverbrauch bei ca. 30 Meilen pro Gallone Sprit (theoretisch)

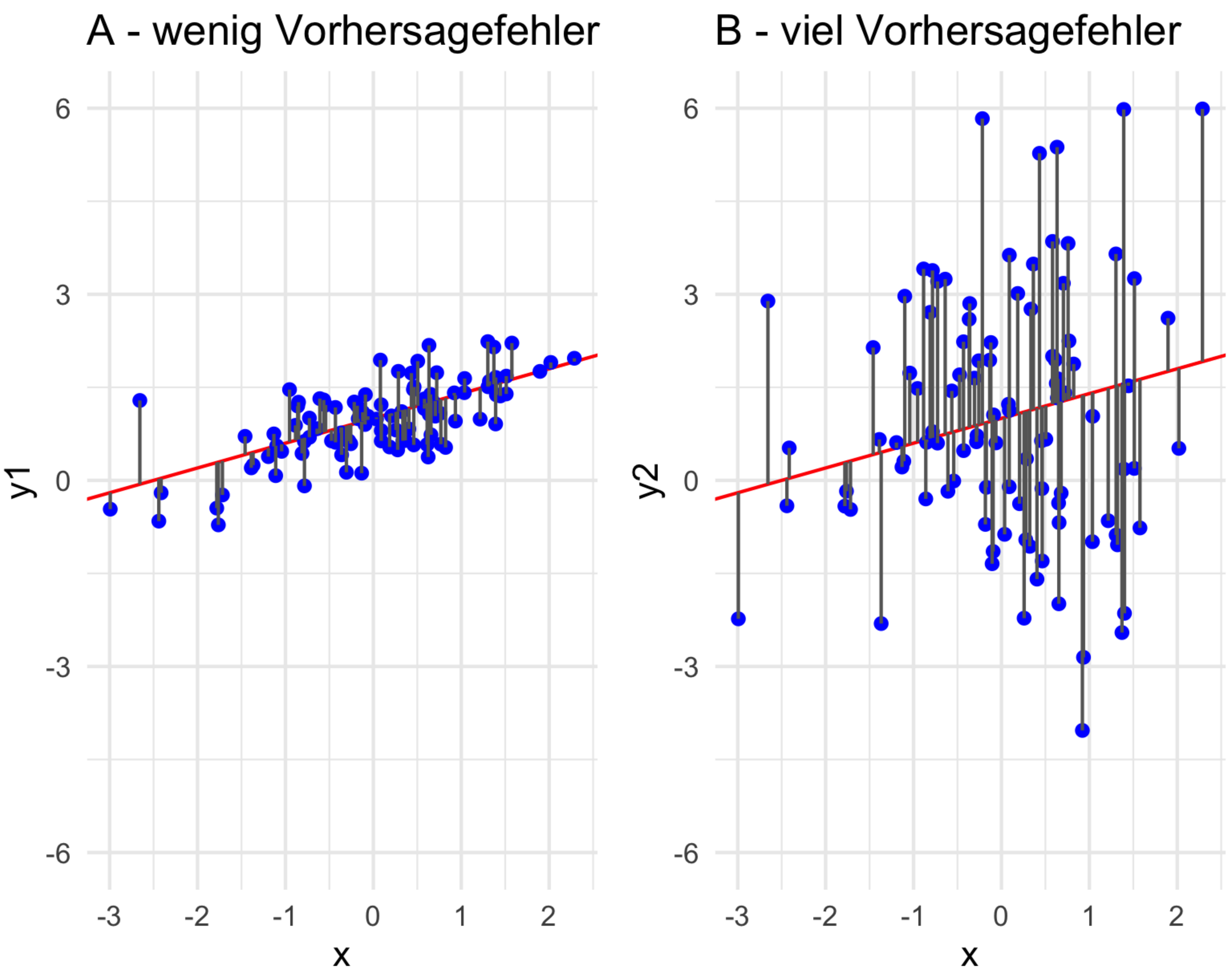
Regressionsgerade

y = 31 - 0.07x



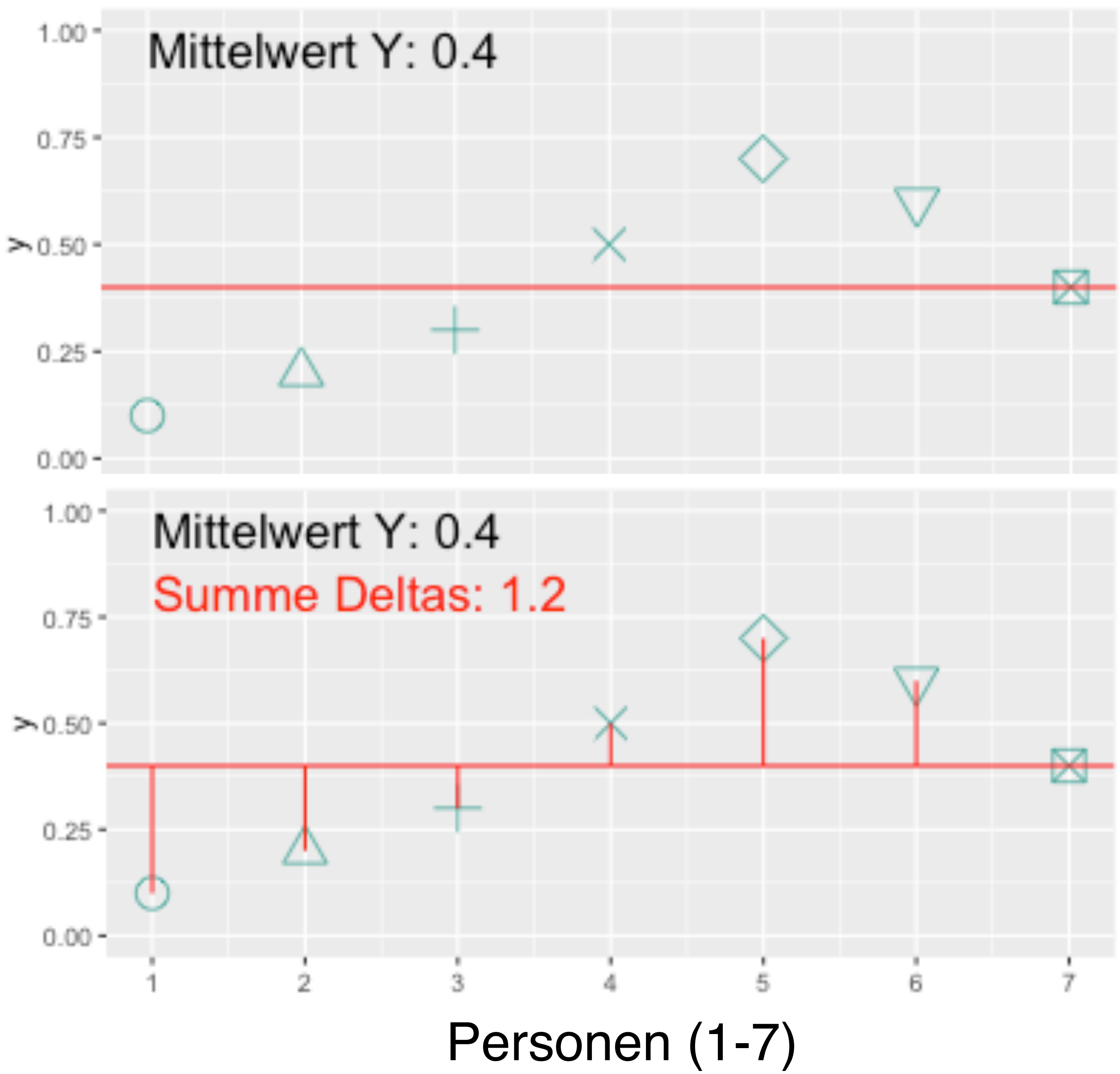
Modellgüte

Die Größe der Residuen zeigt die Modellgüte



Mittelwert als Referenzwert

Eine Vorhersage hat nur dann Wert, wenn die Güte der Vorhersage (bzw. der Vorhersagefehler) bekannt ist/ bestimmt werden kann.

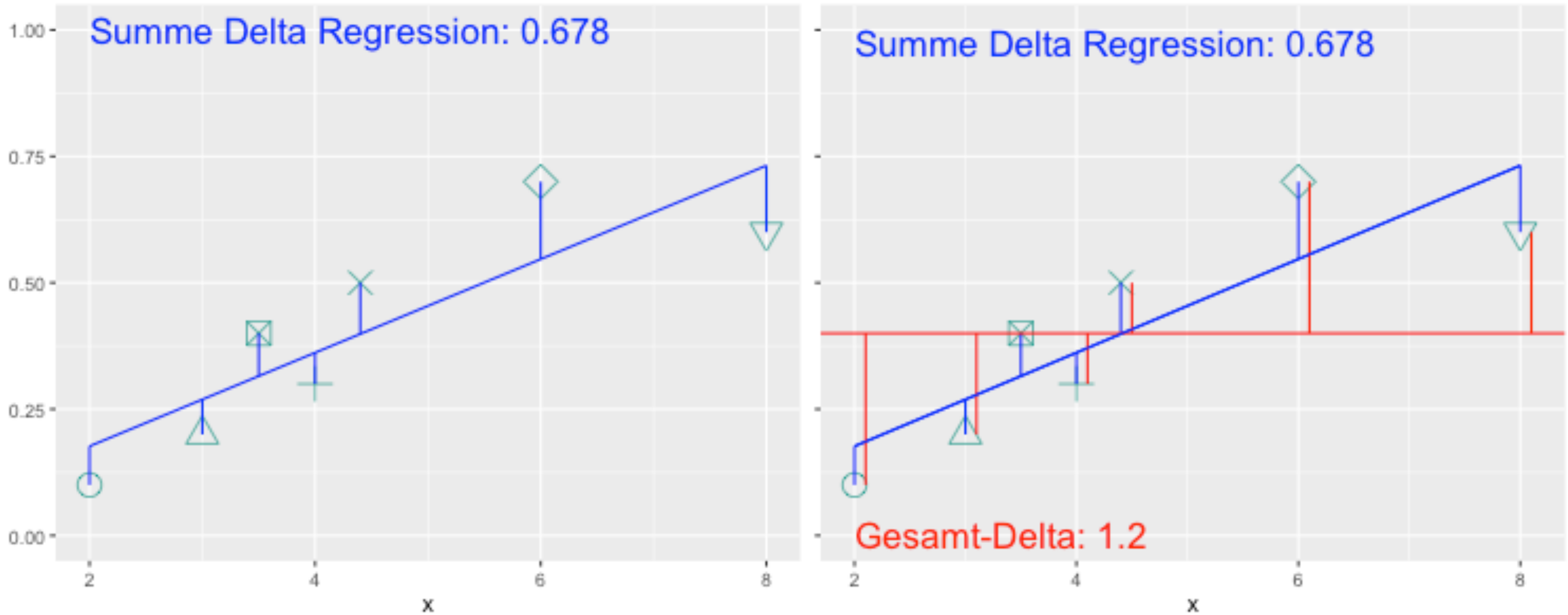


Ist Alberts Zufriedenheit (Y) *unbekannt*, so kann an den Mittelwert von Y ($\bar{Y}$) als Schätzer für ein bestimmtes Y_i (z.B. von Albert) nehmen, damit liegt man oft ganz gut. Dieses Verfahren besteht in einer Vorhersage von Y ohne Kenntnis eines Prädiktors (X).

Die roten „Stecken" zeigen die Größe des Vorhersagefehlers an; der mittlere „Quadratstecken" ist die Varianz. Die roten Stecken sind also ein Maß für die Güte der Vorhersage!

Wir legen eine „gut sitzende“ Gerade in die Daten

Und siehe da: die Summe der „Abweichungs-Stecken“ (Residuen, e) wird kürzer!



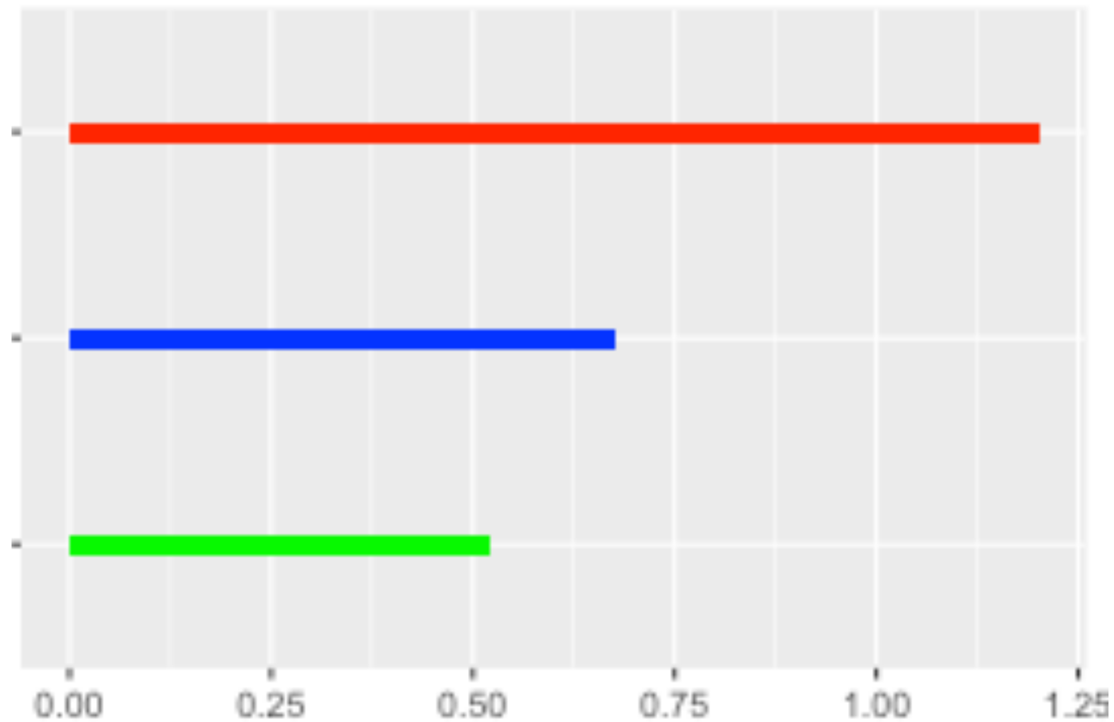
Die blauen Abweichungen (Deltas) sind in Summe kleiner als die roten (in Summe). Damit werden die Y_i-Werte durch die Regression insgesamt genauer geschätzt als bei Vorhersage duch $\bar{Y}$; der Vorhersagefehler wird kleiner.

Unser Regressionsmodell verkürzt die Residuen

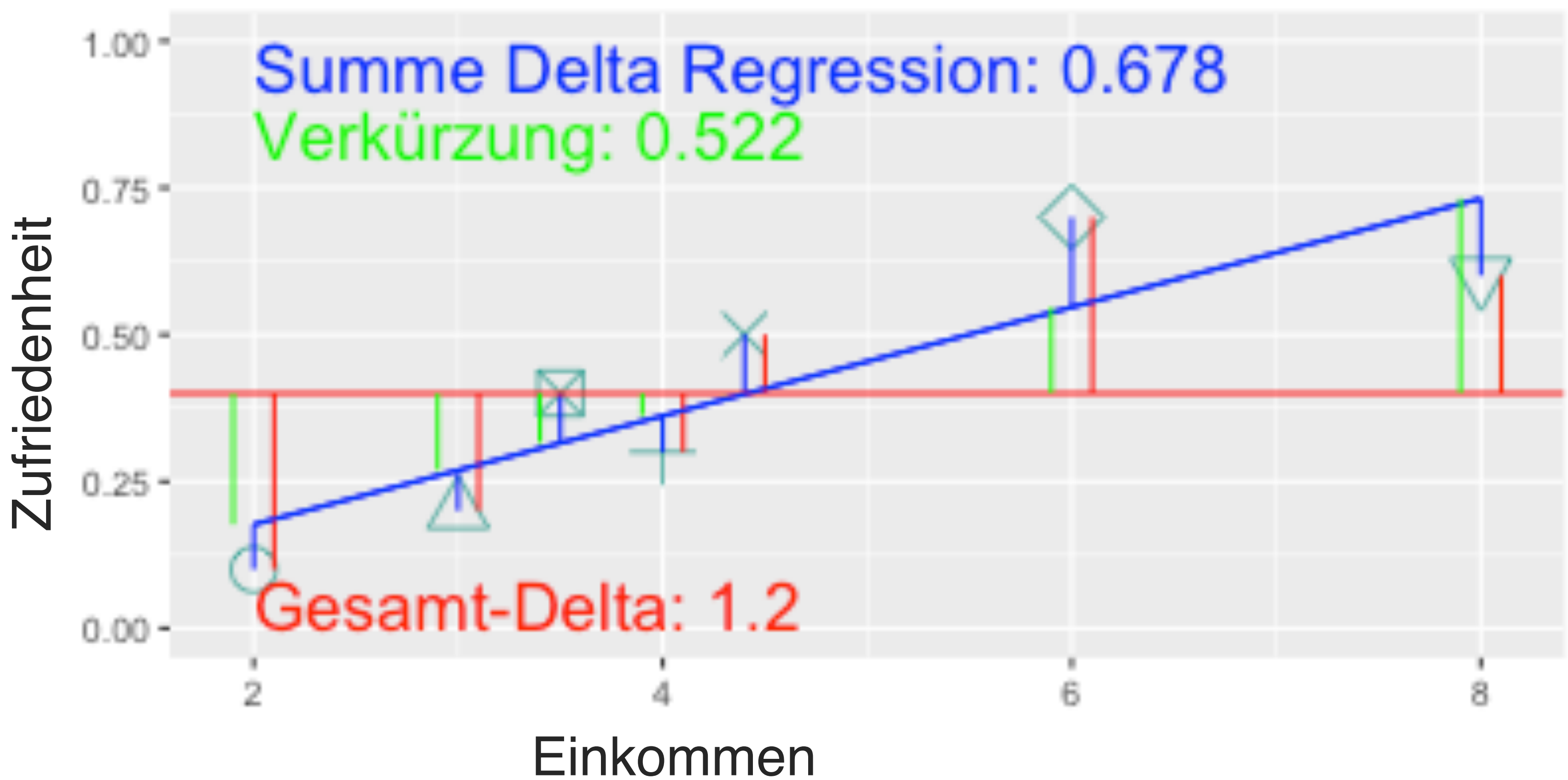
Abweichungen vom Mittelwert

Abweichungen von der Regressionsgeraden

Unterschied rot/blau



Die Abweichungen von der Regressionsgeraden (blau) sind in Summe kürzer als die Abweichungen von Mittelwert (rot); die Verbesserung lässt sich aus der Differenz dieser beiden Abweichungen bestimmen (grüner Balken).



Die Quadratsummen addieren sich

- Die einzelnen „Gesamt-Abweichungsbalken“ bezeichnet man als *Quadratsummen* (engl. Sum of Squares, *SS*).

"Deutsche Übersetzung"

SS_T :

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

die Summe der (quadrierten) Differenzen zwischen den erhobenen Daten und dem Mittelwert von Y (totale Varianz)

Gesamt-Varianz, maximale Streuung, totale Fehlerstreuung

SS_E :

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

Die Summe der der (quadrierten) Differenzen (Residuen, Error) zwischen den erhobenen Daten und der Regressionsgeraden

Gesamt-Vorhersage-Fehler, Summe der Abweichung von der Regressionsgeraden, Fehlerstreuung der Regression

SS_M :

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

Die Summe der der (quadrierten) Differenzen zwischen dem Mittelwert von Y und der Regressionsgeraden (dem Modell)

Verbesserung durch das Modell, erklärte Varianz, Verringerung des Vorhersage-fehlers durch die Regression

Wie gut ist mein Modell?

- Stets ist es das Ziel, die Residuen so klein wie möglich zu halten.
- Um zu prüfen, wie gut ein Regressionsmodell im Schnitt das Kriterium vorhersagt, werden die Abweichungen von vorhergesagten $\hat{Y}_i$ und tatsächlichen Kriteriumswerten Yi berechnet (die „blauen Abweichungstecken“).
- Ist der Wert des SSM größer als Null, so kann die Kriteriumsvariable Y mithilfe von SSM besser vorhergesagt werden als durch das arithmetische Mittel $\bar{Y}$ allein.

$$\boxed{SS_T} = \boxed{SS_M} + \boxed{SS_E}$$

Der mittlere Vorhersagefehler als Maß der Modellgüte

Root Mean Square Error (RMSE)

1. Bestimme das Residuum e für die 1. Beobachtung als Differenz von beobachteten und (vom Modell) vorhergesagten Wert
2. Quadriere das Residuum e: Voilà, das Quadrat-Residuum
3. Wiederhole das für alle Residuen
4. Teile durch die Anzahl der Beobachtung, um das mittlere Quadrat-Residuum zu erhalten
5. Ziehe die Wurzel daraus, um wieder zu einer Größenordnung zu gelangen, die den ursprünglichen Werten entspricht

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i - y_i)^2}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}SS_T}$$

Das Bestimmtheitsmaß R^2

- Das Bestimmtheitsmaß R^2 gibt den Anteil der im Modell erklärten Variation von Y an.
- Es ist ein Maß der Modellgüte: Je größer , desto besser erklärt das Modell die Daten.
- Allerdings ist es, wie die Korrelation (nach Pearson) ein Maß der Modellgüte nur für lineare Modelle.
- Bei einer Regression mit einem Prädiktor ist R^2 gleich dem Quadrat der Pearson'schen Korrelation (r). Es ist damit ein Maß für ein lineares Muster, nicht (zwangsläufig) für geringe Residuen.
- Zu wie viel Prozent die Variation in der Kriteriums variable durch die Variation der X-Werte linear erklärt wird, wird durch R^2 (Bestimmtheitsmaß) ausgedrückt.

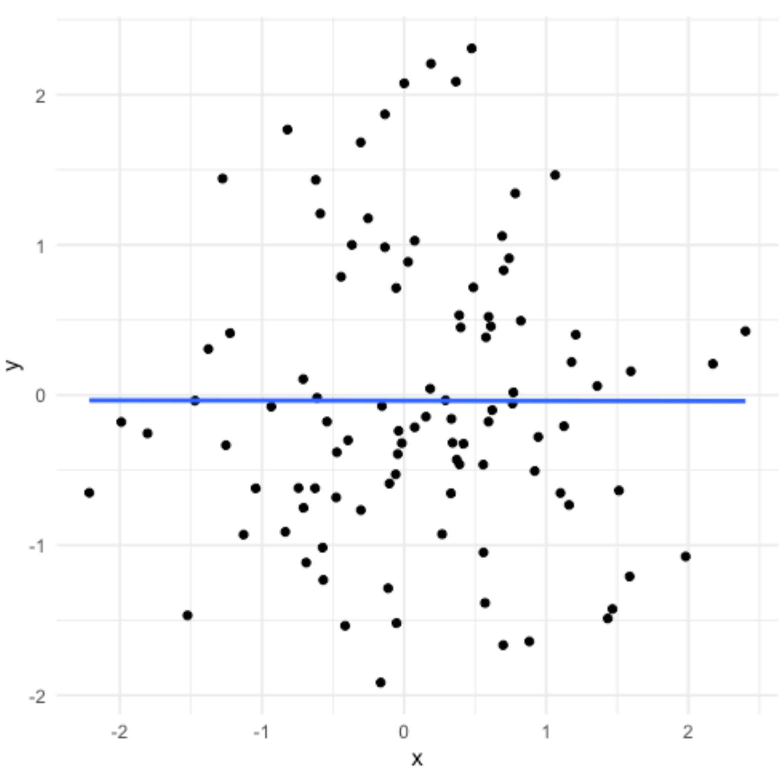
$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y})^2} = \frac{SS_M}{SS_T}$$

$$R^2 = \frac{SS_M}{SS_T}$$

Einfachstes vs. bestes Modell

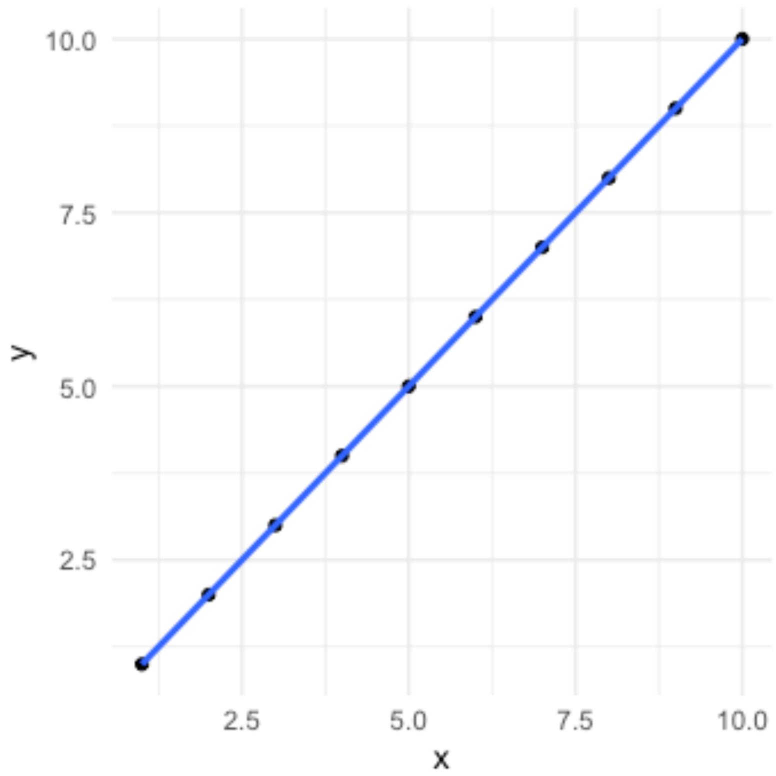
Einfachstes (oder einfaches) Modell:
Prognose durch Mittelwert.

$$\hat{y}_i = \bar{y} : R^2 = 0$$



Bestes Modell:
Prognose entspricht der Beobachtung

$$\hat{y}_i = y_i : R^2 = 1$$

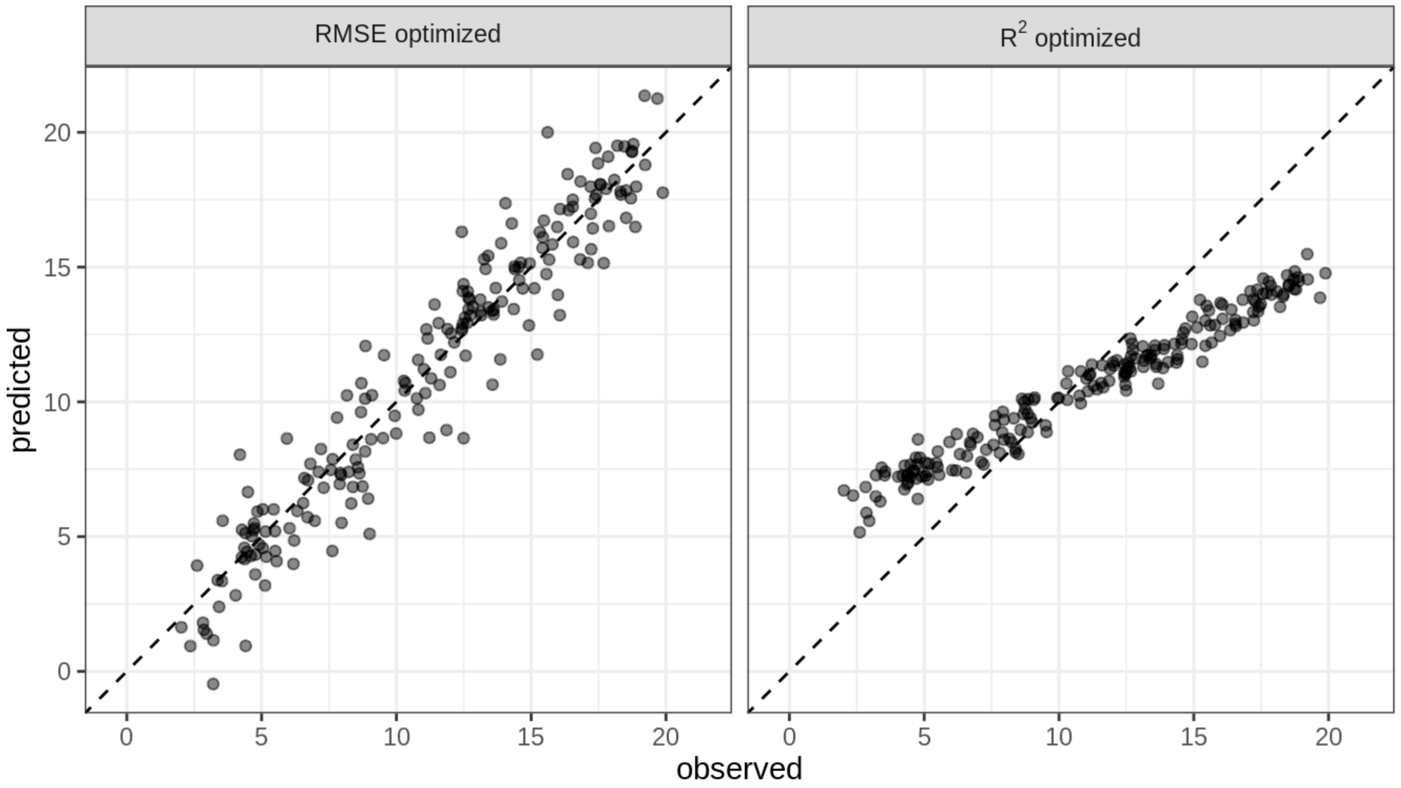


- Bei einer perfekten Korrelation ($R^2 = 1$) liegen die Punkte auf der Geraden; im schlimmsten Fall ($R^2 = 0$) ist die Vorhersage genauso gut wie wenn man für Y-Wert $\bar{Y}$ vorhersagen würde. R^2 ist also proportional zur Höhe der (linearen) Korrelation.

RMSE vs. R-Quadrat

RMSE misst die Kürze der Residuen; R-Quadrat misst die Korrelation

- RMSE und R2 werden oft ähnliche antworten, welches Modell gut ist (bzw. besser als ein anderes)
- RMSE und R2 können aber zu unterschiedlichen Antworten kommen, da sie nicht das gleiche messen
- Das linke Teilbild zeigt ein Modell mit
  - gutem Wert für RMSE
  - nicht so gutem Wert für R2
- Das rechte Teilbild zeigt ein Modell mit
  - gutem Wert für R2
  - nicht so gutem Wert für RMSE



Abschluss

Hinweise

- Dieses Dokument steht unter der Lizenz CC-BY 3.0.
- Autor: Sebastian Sauer
- Für externe Links kann keine Haftung übernommen werden.
- Dieses Dokument entstand mit reichlicher Unterstützung vieler Kolleginnen und Kollegen aus der FOM. Vielen Dank!
- Dieses Dokument baut in Teilen auf auf dem Skript zu quantitative Methoden des ifes-Instituts der FOM-Hochschule.