Multiple lineare Regression

Beispiel 1

In einer Umfrage wurden Körpergrösse, Gewicht und Schuhgrösse von erwachsenen Männern ermittelt:

Grösse (cm)	Gewicht (kg)	Schuhgrösse (EU)
183	68	45
171	76	42
196	93	45
175	58	38

Ziel: Ein Modell, das es erlaubt, bei erwachsenen Männern die Schuhgrösse aus ihrer Grösse und ihrem Gewicht zu schätzen.

Begriffe

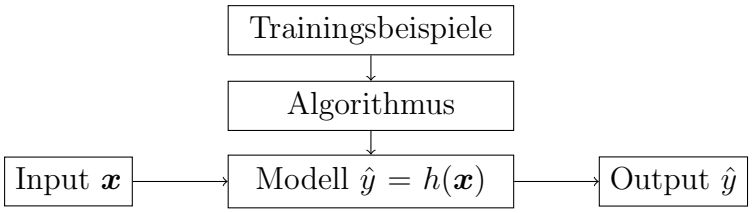
Jede Tabellenzeile stellt ein *Trainingsbeispiel* dar.

Ein Trainingsbeispiel besteht aus den *Inputvariablen Körpergrösse* und *Gewicht* sowie der *Output-* oder *Zielvariable Schuhgrösse*.

Das i-te Trainingsbeispiel wird durch das Paar $(\boldsymbol{x}^{(i)}, y^{(i)})$ dargestellt, wobei $\boldsymbol{x}^{(i)} = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)})$ der Zeilenvektor mit der Körpergrösse $x_1^{(i)}$, und dem Gewicht $x_2^{(i)}$ des i-ten Mannes ist.

Beachte:

- Variablen in fetter Schrift bezeichnen Vektoren.
- Der Index $^{(i)}$ ist kein Exponent sondern eine Variable, mit der man die Trainingsbeispiele durchnummeriert.
- $\big(x^{(2)}, y^{(2)}\big) = \big((171, 76), 42\big)$
- $y^{(4)} = 38$
- $x_1^{(1)} = 183$
- $x_2^{(3)} = 93$



Ein Dach über einer Variable bedeutet, dass der jeweilige Wert eine *Schätzung* des „wahren“ Werts darstellt.

Der Input $\boldsymbol{x}$ erhält hier keinen Index, da es sich in der Regel um neue Inputdaten handelt, für die man den jeweiligen Outputwert $\hat{y}$ schätzen möchte.

Bei der multiplen linearen Regression besteht das Modell aus einer Linearkombination der Inputvariablen. Wenn eine Problemstellung d Inputvariablen hat, so gilt

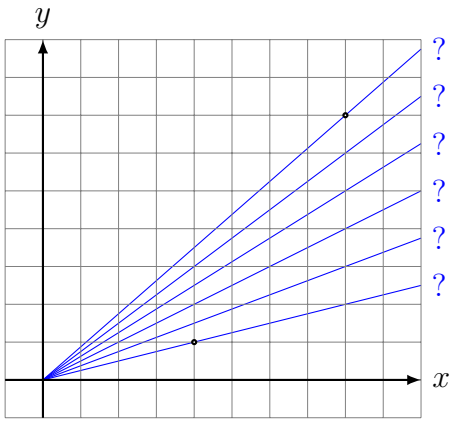
$$\hat{y} = h(\boldsymbol{x}) = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \cdots + \beta_d x_d = \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x} \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \cdots \\ \beta_d \end{pmatrix}$$

Die Zahlen β_1, β_2, …, β_d sind die gesuchten *Modellparameter*.

Um anschaulich zeigen zu können, wie der Vektor $\boldsymbol{\beta}$ bestimmt wird, verwenden wir ein sehr einfaches Beispiel und kehren danach wieder zum Beispiel 1 zurück.

Beispiel 2

Welche Ursprungsgerade $y = \beta x$ passt am besten durch die Punkte $(8, 7)$ und $(4, 1)$?

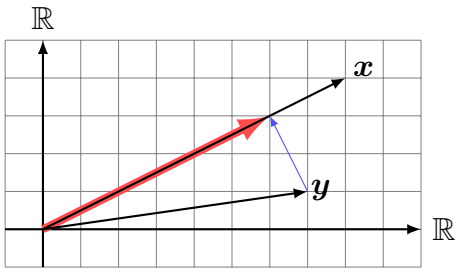


Gesucht wird eine Zahl β mit der Eigenschaft

$$\begin{aligned} \beta \cdot 8 &= 7 \\ \beta \cdot 4 &= 1 \end{aligned} \quad \Leftrightarrow \quad \beta \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} 8 \\ 4 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{x}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 7 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\boldsymbol{y}}$$

Dieses „Gleichungssystem“ ist nicht erfüllbar. Wir können aber eine Zahl $\hat{\beta}$ suchen, die eine möglichst gute Näherung für die Lösung darstellt; d. h. für die $\hat{\beta} \cdot \boldsymbol{x}$ möglichst nahe bei $\boldsymbol{y}$ liegt.

Zur Veranschaulichung stellen wir den Vektor $\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 8 & 4 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$ mit den x-Koordinaten und den Vektor $\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 7 & 1 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}$ mit den y-Koordinaten in einem gemeinsamen Koordinatensystem dar.



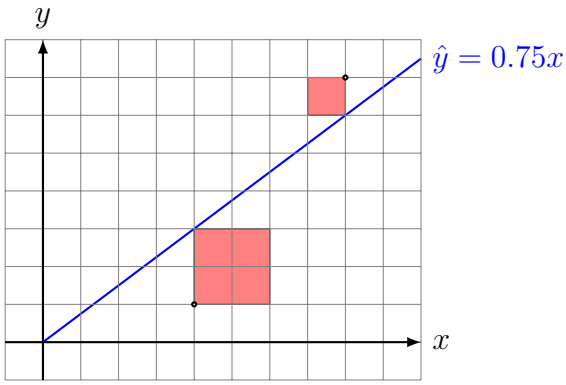
Wir suchen jetzt ein $\hat{\beta}$, für das $\hat{\beta}\boldsymbol{x}$ möglichst nahe bei $\boldsymbol{y}$ liegt.

$\hat{\beta}\boldsymbol{x}$ ist die orthogonale Projektion von $\boldsymbol{y}$ auf $\boldsymbol{x}$.
Den Faktor $\hat{\beta}$ berechnet man bekanntlich mit folgender Formel:

$$\hat{\beta} = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}} = \left(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\right)^{-1}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

Konkret: $\beta = \left[\begin{pmatrix}8 & 4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}8\\4\end{pmatrix}\right]^{-1}\begin{pmatrix}8 & 4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}7\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{80}\cdot 60 = \frac{3}{4}$

Im Streudiagramm erhält man folgendes Bild:



Beispiel 1 (Fortsetzung)

Modell: $\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$

Die Werte der Inputvariablen x_1 und x_2 werden in einer Matrix zusammengefasst:

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix}183 & 68\\171 & 76\\196 & 93\\175 & 58\end{pmatrix}$$

Ebenso die Werte der Outputvariablen:

$$\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix}45\\42\\45\\38\end{pmatrix}$$

Die Matrixform der Projektionsformel

Um die folgende Formel herleiten zu können, müssten weitere mathematische Voraussetzungen erarbeitet werden, für die uns im Rahmen dieses Kapitels jedoch die Zeit fehlt.

$$\boldsymbol{\beta} = \left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\right)^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

Wie man aber sehen kann, handelt es sich um eine Verallgemeinerung der Formel, die wir zur Lösung von Beispiel 2 verwendet haben.

Damit erhält man für die Daten von Beispiel 1:

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} 0.2097 \\ 0.06036 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \hat{y} = 0.2097x_1 + 0.06036x_2$$

Prognosen

Das Bestimmtheitsmass

Ohne Herleitung:

$$R^2 = \frac{\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}}{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}}$$

mit $G = I_n - \frac{1}{n}(J_n J_n^{\mathrm{T}})$

wobei $I_n = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$ und $J = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$

Die Grösse R^2 drückt aus, wie gut Daten und Modell übereinstimmen.

Für R^2 gilt: $0 \leq R^2 \leq 1$

Im Gegensatz zur einfachen linearen Regression gibt es bei der multiplen linearen Regression kein Vorzeichen, das angibt, ob der lineare Zusammenhang fallender oder wachsender Natur ist.

Werte von R^2, die nahe bei 1 liegen, bedeuten einen guten Zusammenhang; Werte, die Nahe bei 0 liegen, bedeuten einen schlechten Zusammenhang.

Im Beispiel 1: $R^2 = 0.8267$

Das folgende Programm nimmt uns die mühsame Eingabe der obigen Formeln ab.

Da uns der TI-84+ für Matrizen nur die Variablen [A]–[J] zur Verfügung stellt, können wir nicht die in der Literatur üblichen Bezeichnungen gebrauchen und verwenden statt dessen:

$\boldsymbol{X} \rightarrow$ [A], $\boldsymbol{y} \rightarrow$ [B], $\boldsymbol{\beta} \rightarrow$ [C]

Das Programm setzt also voraus, dass die Werte der Inputvariablen in der Matrix [A] und die Werte der Outputvariablen in der Matrix [B] gespeichert sind. Der Vektor $\boldsymbol{\beta}$ mit den berechnete Modellparametern heisst dann [C].

Ein Programm für den TI-84+

```
PROGRAM:LSQM
:([A]^T*[A])^-1*[A]^T*[B]→[C]
:dim([A])→L3
:L3(1)→N
:{N,1}→dim([J])
:Fill(1,[J])
:identity(N)-1/N*[J]*[J]^T→[G]
:[C]^T*[A]^T*[G]*[A]*[C]→[D]
:[B]^T*[G]*[B]→[E]
:[D](1,1)/[E](1,1)→R
:Disp [C]
:Disp "R²:",R
```

Beispiel 1 (Revisited)

Das Modell $\hat{y} = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$ kann mit einer Konstanten β_0 zu

$\hat{y} = \beta_0 \cdot 1 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2$

erweitert werden. In diesem Fall ist

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} 1 & 183 & 68 \\ 1 & 171 & 76 \\ 1 & 196 & 93 \\ 1 & 175 & 58 \end{pmatrix}$$

und damit: $\hat{y} = 15.44x_0 + 0.1087x_1 + 0.09979x_2$

Wegen $R^2 = 0.5583$ bringt die Aufnahme eines zusätzlichen Parameters keine Verbesserung.

Beispiel 3

Sophie möchte untersuchen, ob und wie einige ihrer Lebensgewohnheiten ihren Notenerfolg beeinflussen. Deshalb sammelt sie Daten über sich.

Kaffee (#)	Frühstück (0/1)	Lernzeit (h)	Note
2	0	1	4.5
1	1	2	5
0	1	3	5
1	0	2	5.5
2	0	0	3

Lineares Modell: $\hat{y} = \beta_0 \cdot 1 + \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_2 + \beta_3 \cdot x_3$

$$\boldsymbol{X} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 0 & 2 \\ 1 & 2 & 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow [\mathsf{A}]; \; \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 4.5 \\ 5 \\ 5 \\ 5.5 \\ 3 \end{pmatrix} \rightarrow [\mathsf{B}]$$

Welche Modellparameter erhalten wir jetzt mit der Methode der kleinsten Quadrate?

$\hat{y} = 0.5 + 1.25 \cdot x_1 - 0.5 \cdot x_2 + 1.75 \cdot x_3$

$R^2 = 0.932$ (gut)

Die Note 0.5 gibt's umsonst (nicht ganz realistisch)

Die Anzahl Kaffees beeinflusst die Note positiv.

Das Frühstück beeinflusst die Note negativ.

Die Lerndauer beeinflusst die Note positiv.

Prognosen erstellen

Welche Note y könnte man bei $x = (2, 0, 2)$ erwarten?

$\hat{y} = 0.5 + 1.25 \cdot 2 - 0.5 \cdot 0 + 1.75 \cdot 2 = 0.5 + 2.5 + 3.5 = 6.5$

Welche Note y könnte man bei $x = (4, 0, 0)$ erwarten?

$\hat{y} = 0.5 + 1.25 \cdot 4 - 0.5 \cdot 0 + 1.5 \cdot 0 = 6.5$

Achtung: Das Modell sollte nur innerhalb sinnvoller Grenzen verwendet werden.

Polynomielle Regression

Das oben beschriebene lineare Modell kann zusätzlich um Potenzen der unabhängigen Variablen erweitert werden. Die Gleichung

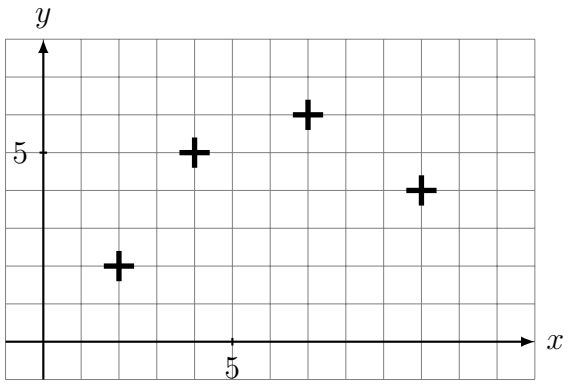
$\hat{y} = \beta_0 \cdot 1 + \beta_1 \cdot x_1 + \beta_2 \cdot x_1^2$

versucht, im Sinne der Methode der kleinsten Quadrate, eine Parabel durch die gegeben Punkte $(x^{(i)}, y^{(i)})$ zu legen.

Achtung: Auch wenn jetzt Quadrate in der Gleichung auftreten, ist das Modell immer noch *linear*, da es sich um eine *Linearkombination* der unabhängigen Variablen (und allfälliger Potenzen davon) handelt.

Beispiel 4

Stelle die Punkte $(2, 2)$, $(4, 5)$, $(7, 6)$, $(10, 4)$ in einem Streudigramm dar:



Modell: $y = \beta_0 \cdot 1 + \beta_1 \cdot x + \beta_2 \cdot x^2$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 \\ 1 & 4 & 16 \\ 1 & 7 & 49 \\ 1 & 10 & 100 \end{pmatrix} \rightarrow [A] \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \\ 6 \\ 4 \end{pmatrix} \rightarrow [B]$$

`LSQM`: $\hat{y} = -2.234 + 2.535x - 0.1916x^2$; $R^2 = 0.9946$ (gut)

Bemerkung

Je mehr Terme man in das Modell aufnimmt, desto besser kann sich die Kurve den gegebenen Werten anpassen.

Modell: $y = \beta_0 \cdot 1 + \beta_1 \cdot x + \beta_2 \cdot x^2 + \beta_3 \cdot x^3$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 4 & 8 \\ 1 & 4 & 16 & 64 \\ 1 & 7 & 49 & 343 \\ 1 & 10 & 100 & 1000 \end{pmatrix} \rightarrow [A] \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} 2 \\ 5 \\ 6 \\ 4 \end{pmatrix} \rightarrow [B]$$

`LSQM`: $\hat{y} = -3.33 + 3.32x - 0.341x^2 + 0.00833x^3$; $R^2 = 1$ (perfekt)

Achtung: viele Parameter → gute Anpassung aber schlechte Generalisierung (*Overfitting*)

Was schief gehen kann (Teil 1)

x_0	x_1	x_2	y
1	2	4	1
1	3	6	3
1	4	8	4
1	5	10	6

`LSQM`: Error: Singular Matrix – $X^T X$ ist nicht invertierbar

Grund: linear abhängige Spalten in X

Was schief gehen kann (Teil 2)

x_0	x_1	x_2	y
1	2	4	1
1	3	7	3

`LSQM`: Error: Singular Matrix – $X^T X$ ist nicht invertierbar

Grund: mehr Parameter als Beispiele