Modelldiagnostik und Residuenanalyse

by Woche 10

```
import numpy as np
import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import scipy.stats as stats
from scipy.stats import levene
import statsmodels.api as sm
import statsmodels.formula.api as smf
from statsmodels.stats.diagnostic import het_breuschpagan
from statsmodels.stats.stattools import jarque_bera
from statsmodels.graphics.gofplots import qqplot
import seaborn as sns

np.random.seed(42) # für reproduzierbare Ergebnisse
```

Warum Modelldiagnostik wichtig ist

Die statistische Modellierung ist ein mächtiges Werkzeug, um Zusammenhänge in Daten zu verstehen und daraus Schlüsse zu ziehen. Allerdings basieren alle statistischen Modelle auf bestimmten Annahmen. Wenn diese Annahmen verletzt werden, können die Ergebnisse und Schlussfolgerungen irreführend oder sogar falsch sein.

Deshalb ist die Modelldiagnostik ein entscheidender Schritt in der statistischen Analyse. Sie hilft uns zu verstehen, ob unsere Modelle die Daten angemessen beschreiben und ob die Annahmen, die wir treffen, gerechtfertigt sind. In diesem Kapitel werden wir verschiedene Methoden der Modelldiagnostik kennenlernen, mit besonderem Fokus auf die Überprüfung der Annahmen linearer Modelle.

Die Annahmen linearer Modelle

Bevor wir mit der Diagnose beginnen, sollten wir verstehen, welche Annahmen lineare Modelle (einschließlich linearer Regression und ANOVA) treffen. Diese Annahmen können unter dem Akronym “LINE” zusammengefasst werden:

- **L**inearity (Linearität): Die Beziehung zwischen den Prädiktoren und der Zielvariable ist linear.
- **I**ndependenz (Unabhängigkeit): Die Beobachtungen sind voneinander unabhängig.
- **N**ormality (Normalverteilung): Die Residuen (Fehler) sind normalverteilt.
- **E**qual Variance (Varianzhomogenität): Die Varianz der Residuen ist konstant über alle Werte der Prädiktoren.

Es gilt also prinzipiell immer zu prüfen, ob es gerechtfertigt ist , ein lineares Modell zu verwenden. Wenn wir nämlich z.B. offensichtlich nicht normalverteilte Residuen haben, ist es nicht sinnvoll, ein lineares Modell zu verwenden. Solch eine Prüfung geschieht in der Regel durch eine Kombination aus grafischen und statistischen Tests - wie in den folgenden Abschnitten gezeigt.

ℹ Besonderheit Linearitätsannahme

Interessanterweise wird die Linearitätsannahme bei verschiedenen statistischen Modellen unterschiedlich gehandhabt:

Aspekt	Einfache lineare Regression	Multiple lineare Regression	Polynomregression	ANOVA
Linearität in Parametern	Ja	Ja	Ja	Ja
Linearität in Variablen	Ja (empirisch zu prüfen)	Ja (empirisch zu prüfen)	Nein (bewusst nicht-linear)	Nicht relevant (kategorisch)
Typische Prüfungen	Residualanalyse, Streudiagramm	Partielle Residualplots, Streudiagrammatrix	-	-

Bei ANOVA ist die Linearitätsannahme in Bezug auf Variablen nicht relevant, da wir mit kategorialen Prädiktoren arbeiten und lediglich Gruppenmittelwerte vergleichen. Deshalb konzentrieren sich ANOVA-Diagnosen hauptsächlich auf Varianzhomogenität und Normalverteilung.

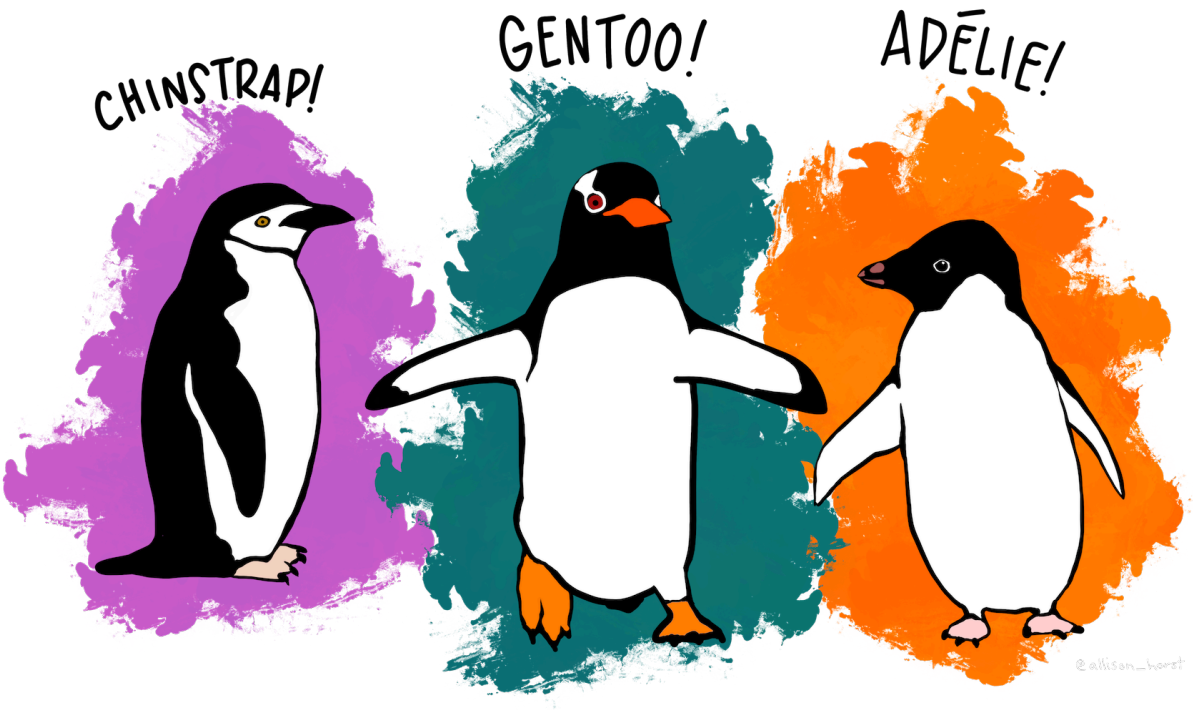
Bei der einfachen und multiplen linearen Regression müssen wir hingegen prüfen, ob die Beziehung zwischen den einzelnen Prädiktoren und der Zielvariable tatsächlich linear ist. Dies ist ein wesentlicher Teil der Diagnose.

Die Polynomregression ist zwar linear in den Parametern (wie alle genannten Modelle), modelliert aber bewusst nicht-lineare Beziehungen in den Variablen durch Hinzufügen transformierter Terme (x^2, x^3, etc.). Die Linearitätsprüfung für die ursprüngliche x-y-Beziehung entfällt, stattdessen prüfen wir, ob die gewählte Polynomordnung die Datenstruktur angemessen abbildet.

Modellbeispiele laden

Für unsere Diagnostik verwenden wir den Palmer Penguins Datensatz und erstellen daraus zwei verschiedene Modelle. In beiden Fällen ist `body_mass_g` die Zielvariable, die wir vorhersagen möchten. Wir verwenden `flipper_length_mm` als Prädiktor für das lineare Regressionsmodell und `species` für das ANOVA-Modell.

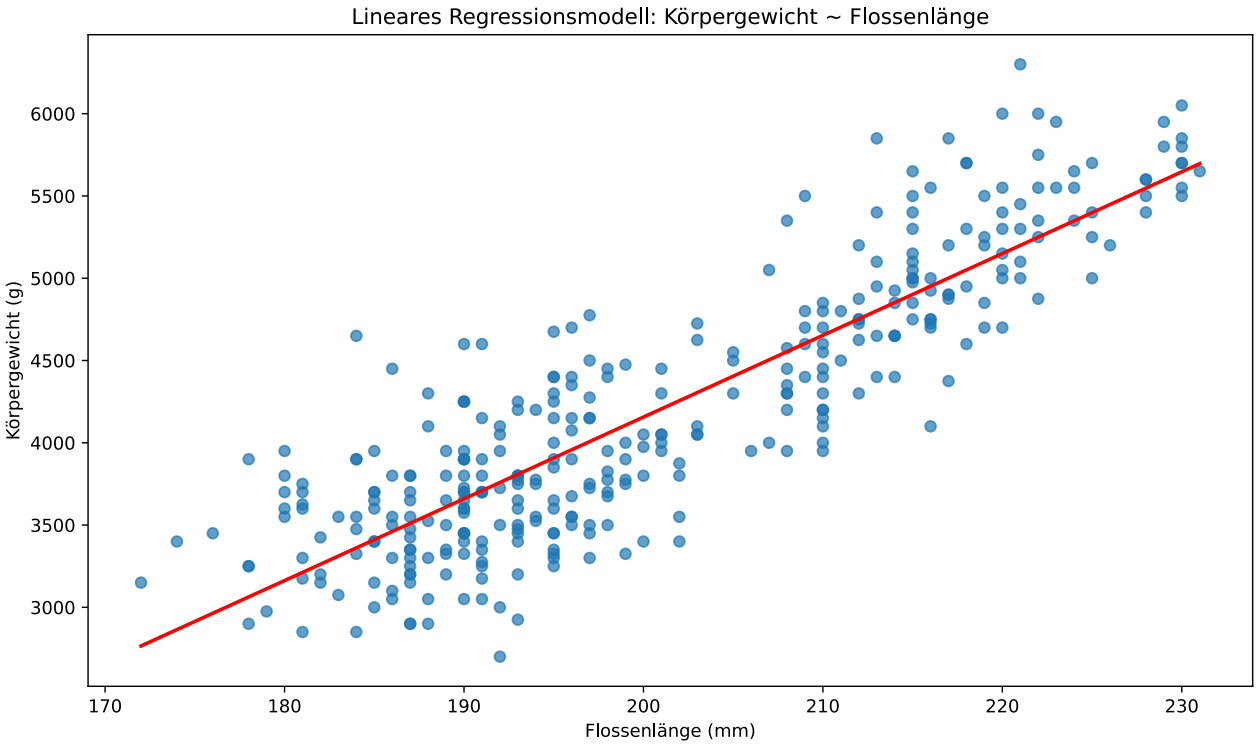
```
# Palmer Penguins Datensatz laden und reduzieren
csv_url = 'https://raw.githubusercontent.com/SchmidtPaul/ExampleData/refs/heads/main/palmer_penguins/palmer_penguins.csv'
penguins = pd.read_csv(csv_url)
penguins_clean = penguins[['body_mass_g', 'flipper_length_mm', 'species']].dropna()

# Definiere Farben für die Pinguinarten
colors = {'Adelie': '#FF8C00', 'Chinstrap': '#A034F0', 'Gentoo': '#159090'}
```



Lineares Regressionsmodell

Hier fokussieren wir uns auf die zwei Variablen `flipper_length_mm` und `body_mass_g`.

```
# Lineares Regressionsmodell
lm_model = smf.ols(formula='body_mass_g ~ flipper_length_mm',
data=penguins_clean).fit()

# Visualisierung des Modells mit Regressionsgerade
fig, ax = plt.subplots(figsize=(10, 6), layout='tight')
ax.scatter(penguins_clean['flipper_length_mm'], penguins_clean['body_mass_g'],
alpha=0.7)

# Regressionsgerade hinzufügen
x_range = np.linspace(penguins_clean['flipper_length_mm'].min(),
                      penguins_clean['flipper_length_mm'].max(), 100)
y_pred = lm_model.params[0] + lm_model.params[1] * x_range
ax.plot(x_range, y_pred, color='red', linestyle='-', linewidth=2)

ax.set_xlabel('Flossenlänge (mm)')
ax.set_ylabel('Körpergewicht (g)')
ax.set_title('Lineares Regressionsmodell: Körpergewicht ~ Flossenlänge')
plt.show()

print(lm_model.summary())
```




```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:            body_mass_g   R-squared:                       0.759
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.758
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     1071.
Date:                Di, 19 Aug 2025   Prob (F-statistic):          4.37e-107
Time:                        11:41:34   Log-Likelihood:                -2528.4
No. Observations:                 342   AIC:                             5061.
Df Residuals:                     340   BIC:                             5069.
Df Model:                           1
Covariance Type:            nonrobust
=====================================================================================
                        coef    std err          t      P>|t|      [0.025      0.975]
-------------------------------------------------------------------------------------
Intercept         -5780.8314    305.815    -18.903      0.000   -6382.358   -5179.305
flipper_length_mm    49.6856      1.518     32.722      0.000      46.699      52.672
==============================================================================
Omnibus:                        5.634   Durbin-Watson:                   2.190
Prob(Omnibus):                  0.060   Jarque-Bera (JB):                5.585
Skew:                           0.313   Prob(JB):                       0.0613
Kurtosis:                       3.019   Cond. No.                     2.89e+03
==============================================================================

Notes:
[1] Standard Errors assume that the covariance matrix of the errors is correctly
specified.
[2] The condition number is large, 2.89e+03. This might indicate that there are
strong multicollinearity or other numerical problems.
```

ANOVA-Modell

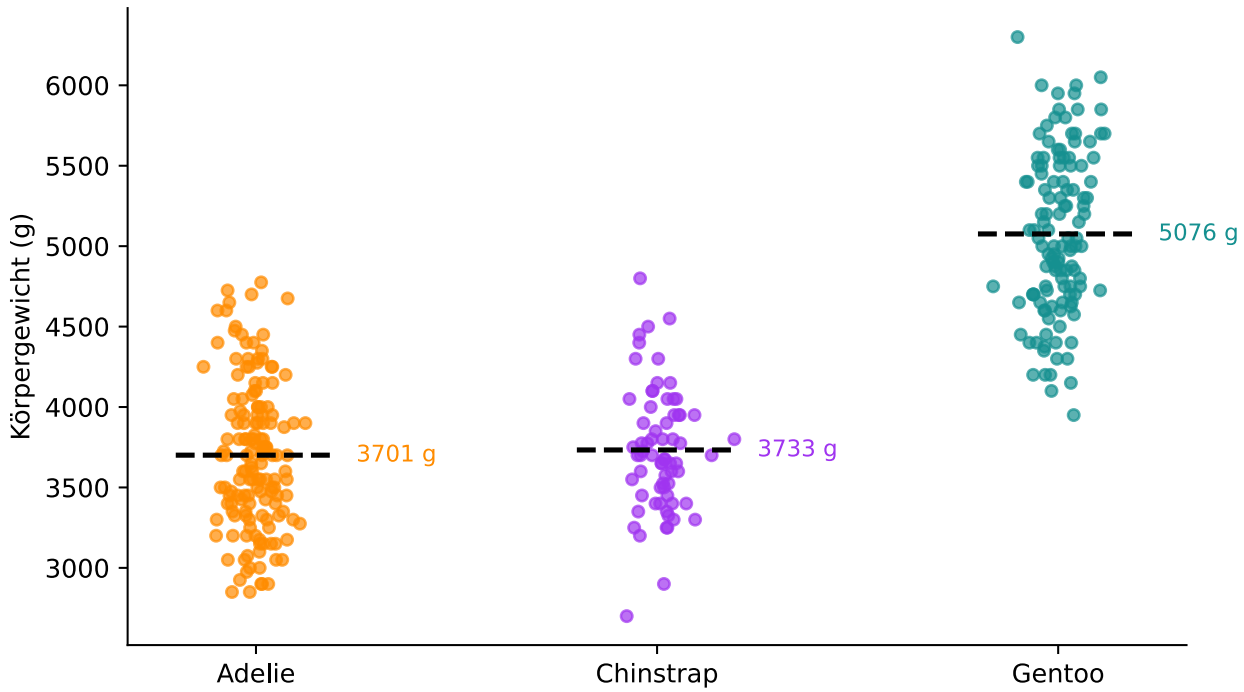
Hier fokussieren wir uns wieder auf die zwei Variablen `species` und `body_mass_g`.

```
# Funktion aus dem letzten Kapitel wiederverwenden
def plot_species(df, species_list, ref_value=None):
```

```
    """
    Erstellt einen Jitter-Plot des Körpergewichts (body_mass_g) für eine oder mehrere
Pinguinarten.
    """
    # Plot-Setup
    fig, ax = plt.subplots(figsize=(7, 4), layout='tight')

    # Filtere nur relevante Arten und entferne NA-Werte in 'body_mass_g'
    df_plot = df[df['species'].isin(species_list)].dropna(subset=['body_mass_g'])

    # x-Positionen auf der Achse für jede Art
    x_positions = {sp: i for i, sp in enumerate(species_list)}

    # Durchlaufe alle gewünschten Arten
    for species in species_list:
        # Wähle Daten für die aktuelle Art
        data = df_plot[df_plot['species'] == species]['body_mass_g']

        # Erzeuge leicht gestreute x-Werte (Jitter), damit sich Punkte nicht überlappen
        x_jitter = np.random.normal(loc=x_positions[species], scale=0.05,
size=len(data))

        # Streudiagramm der Einzelbeobachtungen
        ax.scatter(x_jitter, data, alpha=0.7, s=20, color=colors[species])

        # Berechne und plotte den Mittelwert als gestrichelte Linie
        mean_val = data.mean()
        ax.hlines(y=mean_val, xmin=x_positions[species]-0.2,
xmax=x_positions[species]+0.2,
                  colors="black", linestyles='--', linewidth=2)

        # Textbeschriftung für den Mittelwert
        ax.text(x_positions[species]+0.25, mean_val, f"{mean_val:.0f} g",
                va='center', ha='left', fontsize=9, color=colors[species])

    # Optional: Referenzwert für Ein-Stichproben-Test (nur bei einer Art)
    if ref_value is not None and len(species_list) == 1:
        ax.hlines(y=ref_value, xmin=-0.2, xmax=0.2, colors='red', linestyles='-',
linewidth=2)
        ax.text(0.25, ref_value, f"{ref_value} g (Referenzwert)", va='center',
ha='left',
                fontsize=9, color='red')

    # Achsenbeschriftungen und kosmetische Einstellungen
    ax.set_ylabel('Körpergewicht (g)')
    ax.set_xticks(list(x_positions.values()))
    ax.set_xticklabels(species_list)
    ax.spines['right'].set_visible(False)
    ax.spines['top'].set_visible(False)

    # Plot anzeigen
    plt.show()
```

```
# Alle drei Pinguinarten vergleichen
plot_species(penguins, ['Adelie', 'Chinstrap', 'Gentoo'])

# ANOVA-Modell
anova_model = smf.ols('body_mass_g ~ C(species)', data=penguins_clean).fit()
print(anova_model.summary())
```

```
# ANOVA-Tabelle
anova_table = sm.stats.anova_lm(anova_model, typ=2)
print("\nANOVA-Tabelle:")
print(anova_table)
```




```
                            OLS Regression Results
==============================================================================
Dep. Variable:            body_mass_g   R-squared:                       0.670
Model:                            OLS   Adj. R-squared:                  0.668
Method:                 Least Squares   F-statistic:                     343.6
Date:                Di, 19 Aug 2025   Prob (F-statistic):           2.89e-82
Time:                        11:41:34   Log-Likelihood:                -2582.3
No. Observations:                 342   AIC:                             5171.
Df Residuals:                     339   BIC:                             5182.
Df Model:                           2
Covariance Type:            nonrobust
================================================================================================
                                 coef    std err          t      P>|t|      [0.025
0.975]
------------------------------------------------------------------------------------------------
Intercept                3700.6623     37.619     98.371      0.000    3626.665
3774.659
C(species)[T.Chinstrap]    32.4260     67.512      0.480      0.631    -100.369
165.221
C(species)[T.Gentoo]     1375.3540     56.148     24.495      0.000    1264.912
1485.796
==============================================================================
Omnibus:                        7.340   Durbin-Watson:                   3.036
Prob(Omnibus):                  0.025   Jarque-Bera (JB):                5.331
Skew:                           0.182   Prob(JB):                       0.0696
Kurtosis:                       2.508   Cond. No.                         3.45
==============================================================================

Notes:
[1] Standard Errors assume that the covariance matrix of the errors is correctly
```

```
specified.

ANOVA-Tabelle:
                  sum_sq     df           F        PR(>F)
C(species)  1.468642e+08    2.0  343.626275  2.892368e-82
Residual    7.244348e+07  339.0         NaN           NaN
```

Residuendiagnostik für die Normalverteilungsannahme

Die Normalverteilungsannahme besagt, dass die Residuen (die Unterschiede zwischen beobachteten und vorhergesagten Werten) normalverteilt sein sollten. Diese Annahme ist wichtig für inferenzstatistische Zwecke wie Hypothesentests und Konfidenzintervalle.

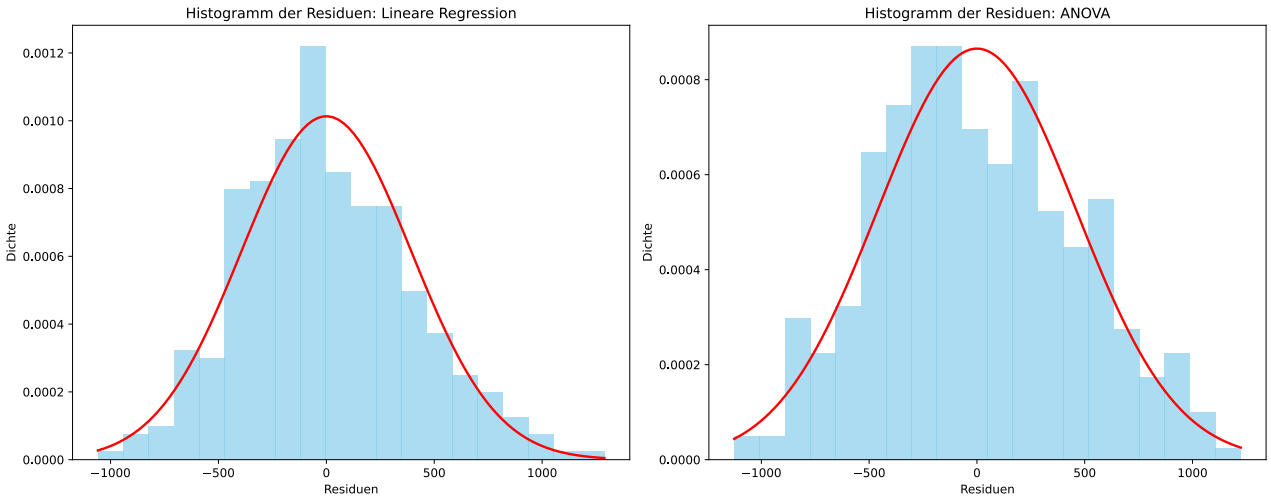
Was genau sollte normalverteilt sein?

Es ist wichtig zu betonen, dass **nicht unbedingt die Daten selbst** normalverteilt sein müssen, sondern die **Residuen des Modells**. Dies ist ein häufiges Missverständnis. Wir interessieren uns also nicht unbedingt dafür, ob z.B. die Körpergewichte normalverteilt sind, sondern ob die Abweichungen unseres Modells von den tatsächlichen Werten normalverteilt sind.

Option 1: Verteilung der Residuen als Histogramm

Eine einfache Methode, um die Normalverteilungsannahme zu überprüfen, ist das Zeichnen eines Histogramms der Residuen und der Vergleich mit einer Normalverteilungskurve. Die Normalverteilungskurve benötigt ja wie gesagt zwei Parameter: den Mittelwert und die Standardabweichung. Diese können wir aber auch direkt aus den Residuen berechnen, sodass wir die entsprechende Normalverteilungskurve einfach über das Histogramm legen können.

```python
# Residuen für beide Modelle berechnen
lm_residuals = lm_model.resid
anova_residuals = anova_model.resid

# Histogramme mit Normalverteilungskurve
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(15, 6), layout='tight')

# Histogramm für das lineare Regressionsmodell
axes[0].hist(lm_residuals, bins=20, density=True, alpha=0.7, color='skyblue')
x = np.linspace(lm_residuals.min(), lm_residuals.max(), 100)
axes[0].plot(x, stats.norm.pdf(x, lm_residuals.mean(), lm_residuals.std()), 'r-', lw=2)
axes[0].set_title('Histogramm der Residuen: Lineare Regression')
axes[0].set_xlabel('Residuen')
axes[0].set_ylabel('Dichte')

# Histogramm für das ANOVA-Modell
axes[1].hist(anova_residuals, bins=20, density=True, alpha=0.7, color='skyblue')
x = np.linspace(anova_residuals.min(), anova_residuals.max(), 100)
axes[1].plot(x, stats.norm.pdf(x, anova_residuals.mean(), anova_residuals.std()), 'r-',
lw=2)
axes[1].set_title('Histogramm der Residuen: ANOVA')
axes[1].set_xlabel('Residuen')
axes[1].set_ylabel('Dichte')

plt.show()
```



Natürlich passt die Normalverteilungskurve nicht perfekt zu den Residuen - gerade wenn man nicht allzu viele Datenpunkte hat. Dennoch lässt sich so überprüfen, ob die Residuen eine Normalverteilung aufweisen. Wenn die Residuen stark von der Normalverteilung abweichen, könnte dies darauf hindeuten, dass das Modell nicht gut zu den Daten passt oder dass die Annahme der Normalverteilung verletzt ist. Hier sehen beide Histogramme ganz gut aus.

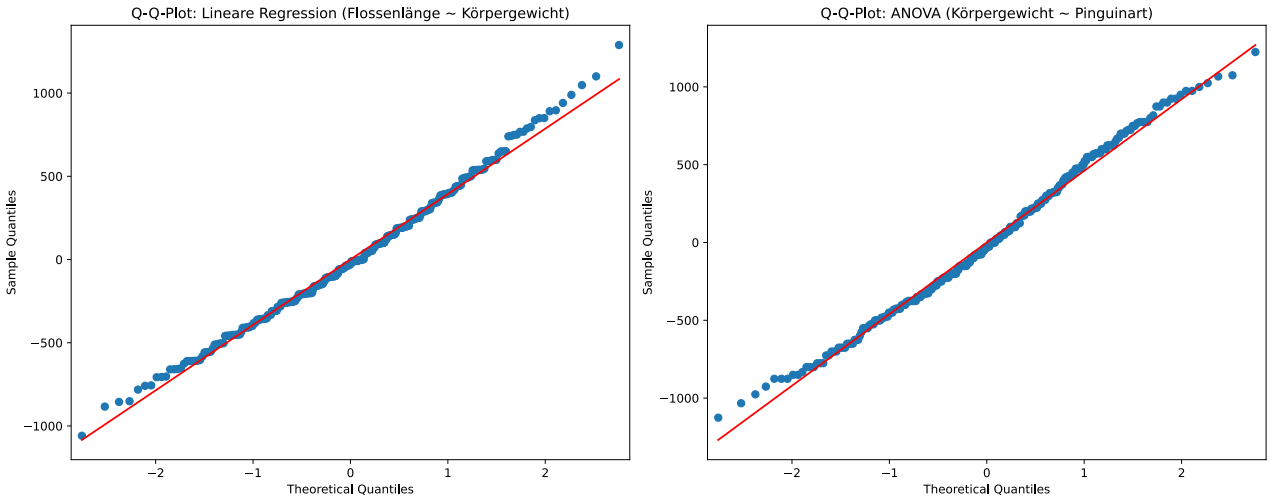
Option 2: Q-Q-Plots

Während Histogramme einen ersten Eindruck vermitteln, sind Q-Q-Plots (Quantil-Quantil-Plots) ein präziseres Werkzeug zur Überprüfung der Normalverteilungsannahme. Auch sie vergleichen die empirische Verteilung der Residuen mit einer theoretischen Normalverteilung.

Ein Q-Q-Plot funktioniert, indem er die empirischen Quantile der Residuen den theoretischen Quantilen einer Normalverteilung gegenüberstellt. Die Quantile teilen eine Verteilung in gleich große Abschnitte ein – zum Beispiel ist das untere Quartil der Wert, unter dem 25 % der Daten liegen. Für den Q-Q-Plot wird berechnet, an welcher Stelle in der Normalverteilung ein bestimmter Datenpunkt erwartet würde, wenn die Daten wirklich normalverteilt wären. Dann wird dieser theoretische Wert mit dem tatsächlich beobachteten Wert verglichen.

Wenn die Residuen normalverteilt sind, sollten die Punkte im Q-Q-Plot nahe an einer Geraden liegen. Abweichungen von dieser Geraden weisen auf Abweichungen von der Normalverteilung hin.

```
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(15, 6), layout='tight')

# Q-Q-Plot für das lineare Regressionsmodell
sm.qqplot(lm_residuals, line='s', ax=axes[0])
axes[0].set_title('Q-Q-Plot: Lineare Regression (Flossenlänge ~ Körpergewicht)')

# Q-Q-Plot für das ANOVA-Modell
sm.qqplot(anova_residuals, line='s', ax=axes[1])
axes[1].set_title('Q-Q-Plot: ANOVA (Körpergewicht ~ Pinguinart)')

plt.show()
```



Interpretation:

- Ein guter Q-Q-Plot sollte zeigen, dass die Punkte nahe der 45-Grad-Linie liegen.
- Abweichungen an den Enden (Tails) des Plots weisen auf “schwere Enden” (heavy tails) hin, was bedeutet, dass extreme Werte in den Daten häufiger auftreten als in einer Normalverteilung erwartet.
- S-förmige Muster können auf Schiefe hindeuten.

Bei unseren Modellen sehen beide Q-Q-Plots gut aus.

> ℹ Referenzlinien im Q-Q-Plot
>
> Um besser beurteilen zu können, ob die Punkte im Q-Q-Plot tatsächlich auf einer Linie liegen (was auf Normalverteilung hindeuten würde), kann man mit dem Argument line eine Referenzlinie hinzufügen. Wir verwenden hier `line='s'`, da diese Option eine Linie erzeugt, die speziell an die nicht-standardisierten Residuen angepasst ist - sie verläuft durch das erste und dritte Quartil der Daten. Weitere Optionen sind:
>
> - `line='r'`: Erzeugt eine robuste Regressionslinie, die weniger empfindlich auf Ausreißer reagiert
> - `line='45'`: Zeichnet eine 45°-Diagonale, die nur sinnvoll ist, wenn die Daten/Residuen bereits standardisiert sind
>
> Standardisierte Residuen erhält man, indem man jeden Residualwert durch (Wert - Mittelwert)/ Standardabweichung umrechnet, was zu einer Verteilung mit Mittelwert 0 und Standardabweichung 1 führt. Diese Standardisierung kann nützlich sein, weil Werte außerhalb des Bereichs ±2 direkt als statistisch auffällig interpretiert werden können. In diesem Workshop bleiben wir jedoch bei den ursprünglichen Residuen, um die tatsächliche Größenordnung der Abweichungen besser sichtbar zu machen.

Option 3: Statistische Tests für Normalverteilung

Neben visuellen Methoden können wir auch formale statistische Tests durchführen, um die Normalverteilungsannahme zu überprüfen. Der wohl gängigste Test ist der Shapiro-Wilk-Test. Eine weitere Möglichkeit ist der Jarque-Bera-Test. Beide Tests haben als Nullhypothese, dass die Daten normalverteilt sind. Demnach würde ein p-Wert < 0.05 bedeuten, dass die Nullhypothese abgelehnt wird und die Daten wahrscheinlich nicht normalverteilt sind.

```
# Shapiro-Wilk-Test
print('Shapiro-Wilk-Test p-Werte:')
print(f'Lineare Regression: p = {stats.shapiro(lm_residuals).pvalue:.3f}')
print(f'ANOVA: p = {stats.shapiro(anova_residuals).pvalue:.3f}')

# Jarque-Bera-Test
print('\nJarque-Bera-Test p-Werte:')
print(f'Lineare Regression: p = {jarque_bera(lm_residuals)[1]:.3f}')
print(f'ANOVA: p = {jarque_bera(anova_residuals)[1]:.3f}')
```

```
Shapiro-Wilk-Test p-Werte:
Lineare Regression: p = 0.112
ANOVA: p = 0.051

Jarque-Bera-Test p-Werte:
Lineare Regression: p = 0.061
ANOVA: p = 0.070
```

Interpretation:

- Keiner der Tests hat einen p-Wert < 0.05, sodass wir die Nullhypothese nicht ablehnen können. Das bedeutet, dass die Residuen der Modelle als normalverteilt betrachtet werden können.

> ℹ Vorsicht bei Tests zur Prüfung von Modellannahmen
>
> Es sei darauf hingewiesen, dass die Verwendug eines Tests zur Prüfung von einer Modellannahme natürlich komfortabel wirkt, da uns die Entscheidung ob die Annahme verletzt ist oder nicht, abgenommen wird. Anstatt einen Q-Q-Plot anzuschauen, der weder perfekt, noch schrecklich aussieht, könnten wir einfach einen Test durchführen und uns auf das Ergebnis verlassen. Ein Test mit seiner Grenze bei 0.05 gibt uns schließlich immer eine klare Ja-Nein-Entscheidung.
>
> Genau das ist allerdings auch das Problem: Die Realität ist nicht immer so schwarz-weiß. Ein p-Wert von 0.051 ist nicht unbedingt gleichbedeutend mit “nicht normalverteilt”, während ein p-Wert von 0.049 “normalverteilt” bedeutet. Tatsächlich ist der p-Wert ja nur eine Wahrscheinlichkeit, die angibt, wie wahrscheinlich es ist, dass wir die beobachteten Daten erhalten würden, wenn die Nullhypothese wahr wäre.
>
> Darüber hinaus sind solche Tests nicht immer zuverlässig, insbesondere bei kleinen Stichproben. Sie können auch empfindlich auf Ausreißer reagieren und in solchen Fällen falsche Ergebnisse liefern. Daher sollten sie immer in Verbindung mit visuellen Methoden interpretiert werden.
>
> Eine zitierbare Diskussion zu diesem Thema findet sich in der Publikation What’s normal anyway? Residual plots are more telling than significance tests when checking ANOVA assumptions (Kozak & Piepho, 2017; Diese Quelle kann, aber muss nicht gelesen werden!)
>
> Tendeziell sind also die visuellen Prüfungen mit den Residuenplots die erste Wahl, während die Tests eher als zusätzliche Information dienen sollten. Das gilt nicht nur für die Normalverteilungsannahme.

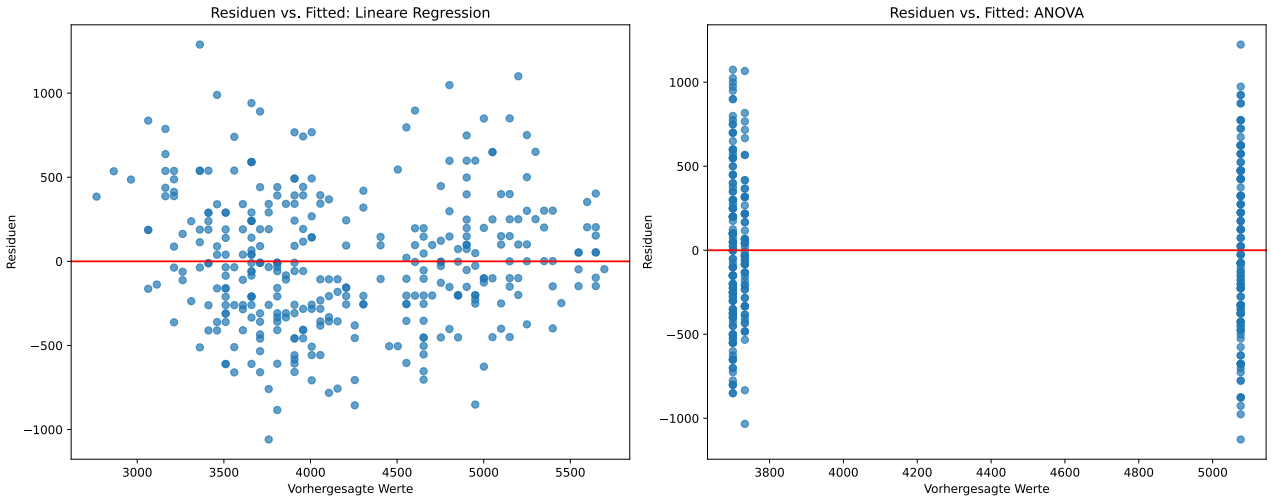
Residuendiagnostik für die Varianzhomogenitätsannahme

Die Annahme der Varianzhomogenität (auch Homoskedastizität genannt) besagt, dass die Varianz der Residuen für alle Werte der Prädiktoren konstant sein sollte. Wenn diese Annahme verletzt wird, spricht man von Varianzheterogenität oder Heteroskedastizität.

Residuen-vs-Fitted-Plots

Der grundlegende Plot zur Überprüfung der Varianzhomogenität ist der Residuen-vs-Fitted-Plot, der die Residuen gegen die vorhergesagten (Fitted) Werte aufträgt:

```
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(15, 6), layout='tight')

# Residuen-vs-Fitted-Plot für das lineare Regressionsmodell
axes[0].scatter(lm_model.fittedvalues, lm_model.resid, alpha=0.7)
axes[0].axhline(y=0, color='r', linestyle='-')
axes[0].set_title('Residuen vs. Fitted: Lineare Regression')
axes[0].set_xlabel('Vorhergesagte Werte')
axes[0].set_ylabel('Residuen')

# Residuen-vs-Fitted-Plot für das ANOVA-Modell
axes[1].scatter(anova_model.fittedvalues, anova_model.resid, alpha=0.7)
axes[1].axhline(y=0, color='r', linestyle='-')
axes[1].set_title('Residuen vs. Fitted: ANOVA')
axes[1].set_xlabel('Vorhergesagte Werte')
axes[1].set_ylabel('Residuen')

plt.show()
```



Interpretation:

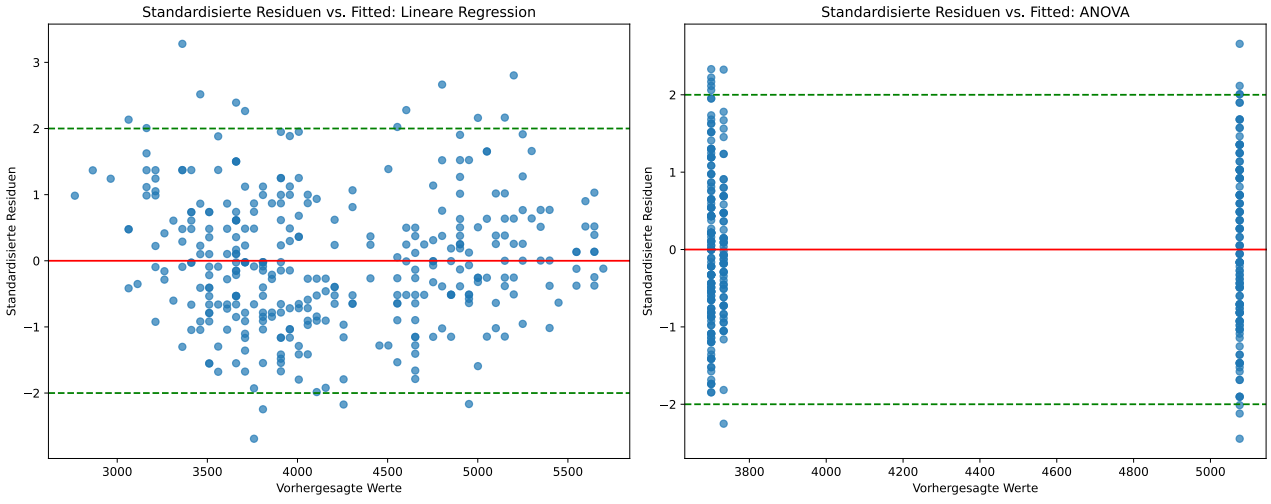
- In einem idealen Fall sollten die Residuen zufällig um die Nulllinie (rote Linie) verteilt sein, ohne erkennbares Muster.
- Die Streuung der Residuen sollte über den gesamten Bereich der vorhergesagten Werte etwa gleich sein.
- Beide Plots sehen gut aus - wir können von Varianzhomogenität ausgehen.

Standardisierte Residuen vs. Fitted Plot

Eine leistungsstärkere Variante des Residuen-vs-Fitted-Plots verwendet standardisierte Residuen anstelle der Rohresiduen. Diese Abwandlung bietet zwei Vorteile:

1. **Einheitliche Skala:** Standardisierte Residuen sind in Einheiten der Standardabweichung ausgedrückt, was die Interpretation vereinfacht und einen konsistenten Maßstab bietet - also auch über verschiedene Modelle und Datensätze hinweg.
2. **Statistische Beurteilung:** Werte außerhalb des Bereichs von ±2 oder ±3 Standardabweichungen könnten als statistische Ausreißer identifiziert werden, da wir wissen, dass bei normalverteilten Daten etwa 95% der Werte innerhalb von ±2 Standardabweichungen liegen sollten.

```
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(15, 6), layout='tight')

# Standardisierte Residuen vs. Fitted für das lineare Regressionsmodell
axes[0].scatter(lm_model.fittedvalues,
lm_model.get_influence().resid_studentized_internal, alpha=0.7)
axes[0].axhline(y=0, color='r', linestyle='-')
axes[0].axhline(y=2, color='g', linestyle='--')
axes[0].axhline(y=-2, color='g', linestyle='--')
axes[0].set_title('Standardisierte Residuen vs. Fitted: Lineare Regression')
axes[0].set_xlabel('Vorhergesagte Werte')
axes[0].set_ylabel('Standardisierte Residuen')

# Standardisierte Residuen vs. Fitted für das ANOVA-Modell
axes[1].scatter(anova_model.fittedvalues,
anova_model.get_influence().resid_studentized_internal, alpha=0.7)
axes[1].axhline(y=0, color='r', linestyle='-')
axes[1].axhline(y=2, color='g', linestyle='--')
axes[1].axhline(y=-2, color='g', linestyle='--')
axes[1].set_title('Standardisierte Residuen vs. Fitted: ANOVA')
axes[1].set_xlabel('Vorhergesagte Werte')
axes[1].set_ylabel('Standardisierte Residuen')

plt.show()
```



Interpretation:

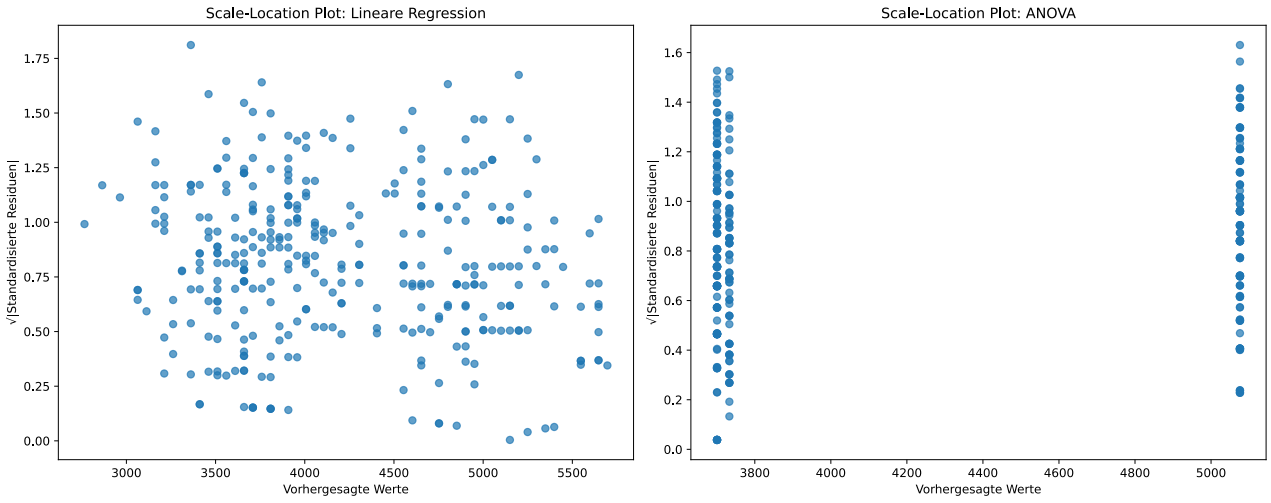
- Die grünen gestrichelten Linien bei +2 und −2 markieren den Bereich, in dem etwa 95% der standardisierten Residuen liegen sollten, wenn sie normalverteilt sind.
- Punkte außerhalb dieses Bereichs sind potenzielle Ausreißer, die genauer untersucht werden könnten.
- Ein Trichterförmiges Muster (zunehmende Streuung bei höheren vorhergesagten Werten, also von links nach rechts) würde auf Heteroskedastizität hindeuten, was hier nicht der Fall ist.

Scale-Location Plot

Der Scale-Location Plot (auch Spread-Location Plot genannt) ist eine weitere nützliche Variation des Residuenplots, der speziell für die Diagnose von Varianzheterogenität entwickelt wurde. Im Gegensatz zum standardisierten Residuenplot, der sowohl positive als auch negative Werte zeigt, fokussiert sich dieser Plot ausschließlich auf die Größe (Magnitude) der Abweichungen.

Die Besonderheit: Er trägt die Wurzel der absoluten standardisierten Residuen gegen die vorhergesagten Werte auf. Die Wurzeltransformation wird angewendet, um die Verteilung der Residuengrößen zu stabilisieren und Muster besser erkennbar zu machen. Dies macht den Plot besonders empfindlich für Veränderungen in der Streuung der Residuen über den Bereich der vorhergesagten Werte.

```
fig, axes = plt.subplots(1, 2, figsize=(15, 6), layout='tight')

# Scale-Location Plot für das lineare Regressionsmodell
std_resid = lm_model.get_influence().resid_studentized_internal
sqrt_abs_std_resid = np.sqrt(np.abs(std_resid))
axes[0].scatter(lm_model.fittedvalues, sqrt_abs_std_resid, alpha=0.7)
axes[0].set_title('Scale-Location Plot: Lineare Regression')
axes[0].set_xlabel('Vorhergesagte Werte')
axes[0].set_ylabel('√|Standardisierte Residuen|')

# Scale-Location Plot für das ANOVA-Modell
std_resid = anova_model.get_influence().resid_studentized_internal
sqrt_abs_std_resid = np.sqrt(np.abs(std_resid))
axes[1].scatter(anova_model.fittedvalues, sqrt_abs_std_resid, alpha=0.7)
axes[1].set_title('Scale-Location Plot: ANOVA')
axes[1].set_xlabel('Vorhergesagte Werte')
axes[1].set_ylabel('√|Standardisierte Residuen|')

plt.show()
```



Interpretation:

- In einem idealen Fall sollten die Punkte zufällig um eine horizontale Linie verteilt sein, ohne erkennbares Trend- oder Muster.
- Dieser Plot ist besonders gut darin, systematische Änderungen in der Residuenvarianz zu erkennen - beispielsweise einen ansteigenden oder abfallenden Trend, der auf Heteroskedastizität hindeuten würde.
- Bei beiden unserer Modelle sehen wir keinerlei Muster, die auf Heteroskedastizität hindeuten würden.

Statistische Tests für Varianzhomogenität

Neben visuellen Methoden gibt es auch statistische Tests zur Überprüfung der Varianzhomogenität. Allerdings soll hier nochmal betont werden, dass visuelle Diagnosen in der Regel aussagekräftiger und robuster sind als formale Tests, da sie Muster und Zusammenhänge aufzeigen können, die in p-Werten nicht erfasst werden. Dennoch können Tests in bestimmten Situationen hilfreich sein, um Entscheidungen zu objektivieren. Hier sind drei der gängigsten Tests:

1. **Breusch-Pagan-Test** (`statsmodels.stats.diagnostic.het_breuschpagan`):
   - Testet, ob die Varianz der Residuen mit den Prädiktoren zusammenhängt
   - Besonders geeignet für lineare Regressionsmodelle - nicht für ANOVA-Modelle
   - Die Nullhypothese ist Homoskedastizität (konstante Varianz)
2. **Levene-Test** (`scipy.stats.levene`):
   - Vergleicht die Varianz zwischen verschiedenen Gruppen
   - Robuster gegenüber Abweichungen von der Normalverteilung als andere Tests
   - Besonders geeignet für Gruppenvergleiche (ANOVA-Modelle)
3. **Brown-Forsythe-Test** (`scipy.stats.levene(center='median')`):
   - Eine Variante des Levene-Tests, die den Median statt des Mittelwerts verwendet
   - Noch robuster bei nicht-normalverteilten Daten
   - Wird in Python über den Levene-Test mit dem Parameter `center='median'` aufgerufen

Dabei ist anzumerken, dass der Breusch-Pagan-Test für ANOVA-Modelle oft weniger geeignet ist. In klassischen ANOVA-Modellen mit kategorialen Prädiktoren (z.B. Gruppenvergleichen) ist die Varianz innerhalb jeder Gruppe separat zu betrachten. Der BP-Test testet aber die Beziehung zwischen Residuen und Prädiktoren linear und global, was nicht ganz zur Gruppenstruktur passt. Für ANOVA-Modelle sind daher Levene- oder Brown-Forsythe-Test meistens die bessere Wahl.

Umgang mit Verletzungen der Annahmen

Wie wir gesehen haben, werden bei unseren Modellen einige Annahmen verletzt. Was können wir tun, wenn dies der Fall ist?

Datentransformationen

Eine häufige Lösung bei Verletzungen der Normalverteilungs- und Varianzhomogenitätsannahmen ist die Transformation der abhängigen Variable. Gängige Transformationen sind:

1. **Logarithmische Transformation**: log(y)
2. **Quadratwurzeltransformation**: sqrt(y)
3. **Box-Cox-Transformation**: Eine Verallgemeinerung, die den besten Transformationsparameter λ bestimmt

Man könnte die logarithmische Transformation für unser lineares Regressionsmodell also wie folgt ausprobieren:

```
# Logarithmische Transformation der abhängigen Variable
penguins_clean['log_body_mass'] = np.log(penguins_clean['body_mass_g'])
log_model = smf.ols(formula='log_body_mass ~ flipper_length_mm',
data=penguins_clean).fit()
```

Die Transformation der abhängigen Variable kann helfen, die Annahmen des linearen Modells besser zu erfüllen. In vielen Fällen kann eine einfache logarithmische Transformation Probleme mit schiefen Verteilungen oder Varianzheterogenität beheben. Die Quadratwurzeltransformation ist eine etwas mildere Alternative, die bei leichteren Problemen oft ausreicht.

Bei der Interpretation eines transformierten Modells müssen wir allerdings berücksichtigen, dass sich auch die Bedeutung der Koeffizienten ändert. Bei einer logarithmischen Transformation interpretieren wir die Koeffizienten als prozentuale Veränderungen statt als absolute Veränderungen.

Alternative Modelle und Ansätze

Wenn Datentransformationen nicht ausreichen, gibt es weitere Ansätze:

1. **Robuste Standardfehler**: Diese korrigieren für Heteroskedastizität ohne die Modellparameter zu ändern.
2. **Generalisierte Lineare Modelle (GLM)**: Diese erweitern lineare Modelle auf nicht-normalverteilte Zielvariablen und bieten spezielle Varianzstrukturen für verschiedene Verteilungsfamilien.
3. **Nicht-parametrische Methoden**: Diese machen weniger strenge Annahmen über die Datenverteilung und können bei starken Verletzungen der Annahmen eine gute Alternative sein.
4. **Quantilregression**: Diese Methode modelliert den Median oder andere Quantile statt des Mittelwerts und ist robuster gegenüber Ausreißern und Heteroskedastizität.
5. **Mixed-Effects-Modelle**: Bei gruppierten oder hierarchischen Daten können diese Modelle die Varianzstruktur besser abbilden.

Die Wahl der besten Methode hängt von der spezifischen Situation, den Daten und den Zielen der Analyse ab. In vielen Fällen ist es sinnvoll, mehrere Ansätze zu vergleichen und die Robustheit der Ergebnisse zu prüfen.

Schließlich sei noch klargestellt, dass die Prüfungen der Modellannahmen niemals perfekte Ergebnisse bzw. Entscheidungen liefern können. Es ist immer eine Frage des Abwägens und der Interpretation. In der Praxis ist es oft hilfreich, verschiedene Ansätze zu kombinieren und die Ergebnisse kritisch zu hinterfragen.

Weitere Ressourcen

- Simple Linear Regression: Diagnostics (part 4 of 4)
- Restplots interpretieren, um Ihre Regression zu verbessern}}

Optional:

- Chapter 13 Model Diagnostics in Applied Statistics with R
- What’s normal anyway? Residual plots are more telling than significance tests when checking ANOVA assumptions (Kozak & Piepho, 2017)