Mathematik I für Biologen, Geowissenschaftler und Geoökologen

Lineare Regression

Stefan Keppeler

16. Januar 2012

EBERHARD KARLS UNIVERSITÄT TÜBINGEN

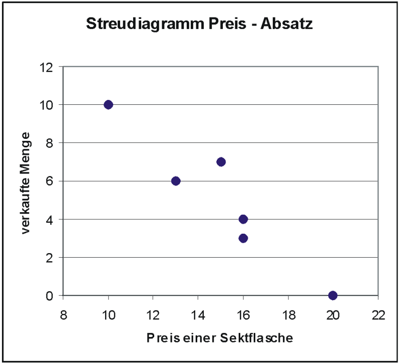
EBERHARD KARLS UNIVERSITÄT TÜBINGEN

Problemstellung:

- Gegeben seien n Punkte $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$, $i \in \{1, \ldots, n\}$, $n \geq 2$, die näherungsweise auf einer Geraden liegen.
- Man bestimme die Gerade, die am nächsten an diesen Punkten liegt.
- Diese Gerade heißt Ausgleichsgerade oder Regressionsgerade. Die Bestimmung dieser Geraden heißt lineare Regression.

Quelle: de.wikipedia.org/wiki/Regressionsanalyse

Eine renommierte Sektkellerei möchte einen hochwertigen Rieslingsekt auf den Markt bringen. Für die Festlegung des Abgabepreises soll zunächst eine Preis-Absatz-Funktion ermittelt werden. Dazu wurde in $n = 6$ Geschäften ein Testverkauf durchgeführt. Man erhielt sechs Wertepaare mit dem Ladenpreis x (in Euro) einer Flasche und die verkaufte Menge y an Flaschen:



Laden i	1	2	3	4	5	6
Preis einer Flasche x_i	20	16	15	16	13	10
verkaufte Menge y_i	0	3	7	4	6	10

- Wir benötigen: Maß für die Abweichung D einer Geraden g von den gegebenen Punkten.
- Suche dann g so, dass die Abweichung minimiert wird. Dabei ist g der Graph der Funktion

$$g(x) = mx + b.$$

- Die Gerade wird durch 2 Parameter, bestimmt: $m, b \in \mathbb{R}$, d.h. D ist eine Funktion von b und m.

Wie ist D sinnvoll zu wählen?

Wie ist D sinnvoll zu wählen?

x_1	x_2	$\dots$	x_n
y_1	y_2	$\dots$	y_n
$g(x_1)$	$g(x_2)$	$\dots$	$g(x_n)$

- D soll messen, wie nahe
  der Vektor $\vec{v} \in \mathbb{R}^n$, mit Einträgen $v_i = g(x_i)$,
  beim Vektor $\vec{y} \in \mathbb{R}^n$, mit Einträgen y_i, liegt.
- Betrachte den Abstand der beiden im $\mathbb{R}^n$,

$$D(b,m) = d(\vec{v},\vec{y}) = \|\vec{v} - \vec{y}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} (v_i - y_i)^2}.$$

Aufgabe: Finde b und m, die D minimieren!
Fordere also $\nabla D = 0$.

Trick: Statt $D(b,m)$ minimieren wir $f(b,m) = D(b,m)^2$, denn

$$f \text{ minimal} \quad \Leftrightarrow \quad D \text{ minimal},$$

da $f = h \circ D$ mit $h(x) = x^2$ streng monoton wachsend auf $[0,\infty)$ – d.h. wenn $D(b',m') < D(b,m)$, dann auch $f(b',m') < f(b,m)$.

Wir minimieren also

$$f(b,m) = \sum_{i=1}^{n} \big(g(x_i) - y_i\big)^2 = \sum_{i=1}^{n} (mx_i + b - y_i)^2.$$

Daher auch Bezeichnung
Methode der kleinsten (Fehler-)Quadrate;
geht auf C.F. Gauß (1777-1855) zurück.

EBERHARD KARLS UNIVERSITÄT TÜBINGEN

Gradient von $f = \sum_{i=1}^{n} (mx_i + b - y_i)^2$: $\quad \nabla f = \left(\frac{\partial f}{\partial b}, \frac{\partial f}{\partial m} \right)$

$$\frac{\partial f}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n} 2(mx_i + b - y_i)$$

$$\frac{\partial f}{\partial m} = \sum_{i=1}^{n} 2(mx_i + b - y_i)x_i$$

Am Minimum ist $\nabla f = 0$, also

$$n\,b + \Big(\sum_i x_i\Big) m = \sum_i y_i \qquad (1)$$

$$\Big(\sum_i x_i\Big) b + \Big(\sum_i x_i^2\Big) m = \sum_i x_i y_i \qquad (2)$$

Lineares Gleichungssystem mit 2 Gleichungen
für die 2 Unbekannten b und m.

EBERHARD KARLS UNIVERSITÄT TÜBINGEN

Definiere

$$\overline{x} := \frac{1}{n}\sum_i x_i \qquad \text{und} \qquad \overline{y} := \frac{1}{n}\sum_i y_i$$

und schreibe LGS in Kurzform

$$\begin{array}{l} \left(\begin{array}{cc|c} n & n\,\overline{x} & n\,\overline{y} \\ n\,\overline{x} & \sum_i x_i^2 & \sum_i x_i\,y_i \end{array}\right) \begin{array}{l} -\overline{x} \quad \Big| \cdot 1/n \\ + \end{array} \\ \hline \left(\begin{array}{cc|c} 1 & \overline{x} & \overline{y} \\ 0 & \sum_i x_i^2 - n\overline{x}^2 & \sum_i x_i\,y_i - n\,\overline{x}\,\overline{y} \end{array}\right) \end{array}$$

$$\sum_i x_i\,y_i - n\,\overline{x}\,\overline{y} = \sum_i (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})$$

...und mit $y \to x$ auch

$$\sum_i x_i^2 - n\overline{x}^2 = \sum_i (x_i - \overline{x})^2$$

Damit lesen wir die eindeutige Lösung ab,

$$m = \frac{\sum_i (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum_i (x_i - \overline{x})^2},$$

$$b = \overline{y} - m\overline{x}.$$

Bemerkungen:

- Nenner von m ungleich 0?
- Mit $g(x) = mx + b$ bedeutet die 2. Gleichung: $g(\overline{x}) = \overline{y}$.

Noch zu klären:

- Liegt an dieser Stelle ein Minimum von f?
  (also weder Maximum noch Sattel)
- Untersuche Hesse-Matrix $H = f''$.

EBERHARD KARLS
UNIVERSITÄT
TÜBINGEN

Hesse-Matrix:

$$f(m,b) = \sum_{i=1}^{n} (mx_i + b - y_i)^2 \,, \qquad H = f'' = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial b^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial b\,\partial m} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial m\,\partial b} & \frac{\partial^2 f}{\partial m^2} \end{pmatrix} \,,$$

wobei

$$\frac{\partial^2 f}{\partial b^2} = \frac{\partial}{\partial b} \sum_i 2(mx_i + b - y_i) = 2n \,,$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial m\,\partial b} = \frac{\partial}{\partial m} \sum_i 2(mx_i + b - y_i) = \sum_i 2x_i = 2n\overline{x} = \frac{\partial^2 f}{\partial b\,\partial m} \,,$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial m^2} = \frac{\partial}{\partial m} \sum_i 2(mx_i + b - y_i)x_i = 2\sum_i x_i^2 \,,$$

d.h. $H = \begin{pmatrix} 2n & 2n\overline{x} \\ 2n\overline{x} & 2\sum_i x_i^2 \end{pmatrix}$. Positiv definit?

- Datenpunkte $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$, $i \in \{1, \ldots, n\}$
- Berechne die Mittelwerte

$$\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_i x_i \qquad \text{und} \qquad \overline{y} = \frac{1}{n} \sum_i y_i \,.$$

- Bestimme die Steigung der Regressionsgeraden,

$$m = \frac{\sum_i (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum_i (x_i - \overline{x})^2} \,.$$

- Bestimme den Achsenabschnitt der Regressionsgeraden

$$b = \overline{y} - m\overline{x} \,.$$

Beispiel Sektpreise: oder MATLAB

Regression von Exponentialfunktionen:
Vermutet wird der Zusammenhang

$$z = ce^{\lambda x}$$

zwischen den Größen x und z, und aus Messwerten für (x_i, z_i) sollen die Konstanten $c, \lambda \in \mathbb{R}$ geschätzt werden.

Führe durch Logarithmieren[1] zurück auf lineare Regression:

$$y = \log z = \log c + \lambda x$$

Lineare Regression mit Daten $(x_i, y_i) = (x_i, \log z_i)$
liefert Ausgleichsgerade $y = mx + b$.
Daraus erhalten wir $c = \mathrm{e}^b$, $\lambda = m$.

[1] vgl. log-Plot, Vorlesung 5

Regression von Potenzfunktionen:
Vermutet wird der Zusammenhang

$$p = \alpha q^{\beta}$$

zwischen den Größen q und p, und aus Messwerten für q und p sollen die Konstanten $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ geschätzt werden.

Führe durch Logarithmieren[2] zurück auf lineare Regression:

$$y = \log p = \log \alpha + \beta \log q = \log \alpha + \beta x$$

Lineare Regression mit Daten $(x_i, y_i) = (\log q_i, \log p_i)$ liefert Ausgleichsgerade $y = mx + b$.
Daraus erhalten wir $\alpha = \mathrm{e}^{b}$, $\beta = m$.

[2] vgl. log-log-Plot, Vorlesung 5