

Mathematik I für Biologen, Geowissenschaftler und Geoökologen  
Lineare Regression

Stefan Keppeler

1. Februar 2010

## Problemstellung

Beispiel

## Lineare Regression

Maß für Abweichung

Trick

Berechnung

Minimum?

"Kochrezept"

## Anhang: Regression anderer Zusammenhänge

Exponentialfunktionen

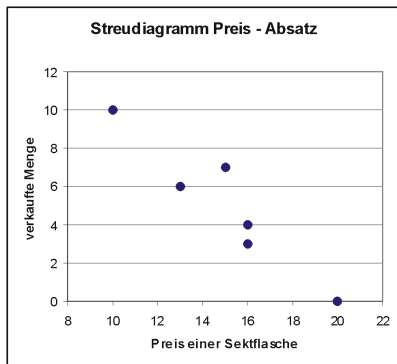
Potenzfunktionen

## Problemstellung:

- ▶ Gegeben seien  $n$  Punkte  $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$ ,  $i \in \{1, \dots, n\}$ ,  $n \geq 2$ , 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](https://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  $v \in \mathbb{R}^n$ , mit Einträgen  $v_i = g(x_i)$ ,  
 beim Vektor  $y \in \mathbb{R}^n$ , mit Einträgen  $y_i$ , liegt.
- ▶ Betrachte den Abstand der beiden im  $\mathbb{R}^n$ ,

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



**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

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



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



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

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

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

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

$$n b + \left( \sum_i x_i \right) m = \sum_i y_i \quad (1)$$

$$\left( \sum_i x_i \right) b + \left( \sum_i x_i^2 \right) m = \sum_i x_i y_i \quad (2)$$

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





Definiere

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

und schreibe LGS in Kurzform

$$\left( \begin{array}{cc|c} n & n\bar{x} & n\bar{y} \\ n\bar{x} & \sum_i x_i^2 & \sum_i x_i y_i \end{array} \right) \begin{array}{l} \left[ \begin{array}{l} -\bar{x} \\ + \end{array} \right] \cdot 1/n \end{array}$$


---


$$\left( \begin{array}{cc|c} 1 & \bar{x} & \bar{y} \\ 0 & \sum_i x_i^2 - n\bar{x}^2 & \sum_i x_i y_i - n\bar{x}\bar{y} \end{array} \right)$$

$$\begin{aligned} \sum_i x_i y_i - n\bar{x}\bar{y} &= \text{pencil} \\ &= \sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \end{aligned}$$

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


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

Damit lesen wir die **eindeutige Lösung** ab,

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

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

### Bemerkungen:

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

### Noch zu klären:

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

Hesse-Matrix:


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

wobei

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

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

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

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



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


$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_i x_i \quad \text{und} \quad \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_i y_i.$$

- ▶ Bestimme die **Steigung** der Regressionsgeraden,

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

- ▶ Bestimme den **Achsenabschnitt** der Regressionsgeraden

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

**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**<sup>1</sup> 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  $c = e^b$ ,  $\lambda = m$ .

---

<sup>1</sup>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**<sup>2</sup> 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  $\alpha = e^b$ ,  $\beta = m$ .

---

<sup>2</sup>vgl. log-log-Plot, Vorlesung 5