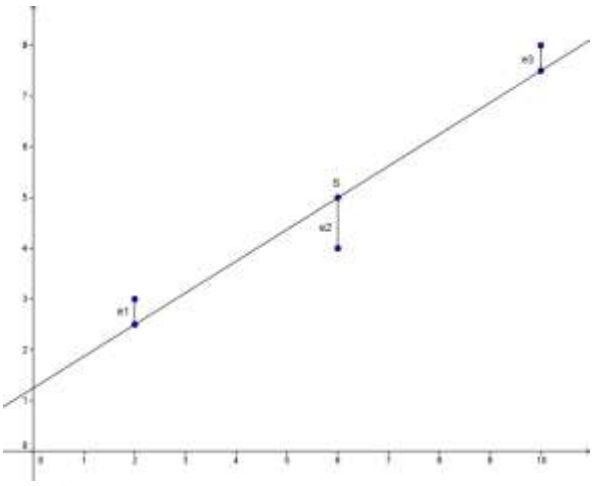
Ein Extremalproblem aus der Statistik: Lineare Regression

Messungen haben die n Wertepaare (x_i, y_i) i = 1 ... n ergeben. Liegen die Punkte angenähert auf einer Geraden, so kann man rechnerisch eine Ausgleichsgerade (to fit) bestimmen, die von den n Punkten "möglichst wenig" abweicht.

Einführendes Beispiel: (2,3), (6,4), (10,8)



i	x_i	y_i	$x_i y_i$	x_i^2
1	2	3	6	4
2	6	4	24	36
3	10	8	80	100
Σ	18	15	110	140

Mittelwert der x-Koordinaten: $\bar{x} = 6$
Mittelwert der y-Koordinaten $\bar{y} = 5$

Die Abbildung liefert als vermutete Ausgleichsgerade
g: $y = 0.6x + 1.2$

Die vertikal gemessenen Abweichungen der Punkte von der Ausgleichsgeraden heissen Residuen e_i
Wir machen die plausible Annahme, dass die Ausgleichsgerade durch den Schwerpunkt S($\bar{x}$, $\bar{y}$) der Punkte geht und setzen die Gleichung der Ausgleichsgeraden in der folgenden Form an: $y = mx + q$
S liegt auf der Ausgleichsgeraden $q = \bar{y} - m\bar{x}$ $y = m \cdot (x - \bar{x}) + \bar{y}$
Als Mass für die Abweichungen der Punkte von der Ausgleichsgeraden wird auf Vorschlag von C.F. Gauss die Summe D der Residuenquadrate e_i^2 verwendet. Diese Summe ist von der Steigung m der Geraden abhängig, d.h. D ist eine Funktion von m.

$$D(m) = \sum e_i^2 = \left(m \cdot (x_i - \bar{x}) + \bar{y} - y_i\right)^2$$

i	x_i	y_i	$x_i - 6$	$m \cdot (x_i - 6)$	$5 - y_i$	$e_i = m \cdot (x_i - 6) + 5 - y_i$	e_i^2
1	2	3	-4	-4m	2	-4m + 2	$(-4m + 2)^2$
2	6	4	0	0	1	1	0
3	10	8	4	4m	-3	4m - 3	$(4m - 3)^2$

$$D(m) = (-4m + 2)^2 + 1^2 + (4m - 3)^2 = 32m^2 - 40m + 14$$

Der Graph dieser quadratischen Funktion ist eine nach oben geöffnete Parabel. Die Bedingung D'(m) = 0 liefert 64m - 40 = 0 und daraus $m = \frac{5}{8}$.
Die Ausgleichsgerade hat damit die Gleichung
$y = \frac{5}{8}x + \frac{5}{4}$

Allgemeiner Fall:

Mit dem folgenden Ansatz für die Gleichung der Ausgleichsgeraden
$y = m \cdot (x - \bar{x}) + \bar{y}$ erhalten wir

$$D(m) = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(m(x_i - \bar{x}) + \bar{y} - y_i \right)^2$$

Der Graph der Funktion D ist eine nach oben geöffnete Parabel. D ist genau dann minimal, wenn D'(m) = 0 ist.

$$D'(m) = 2\sum_{i=1}^{n} \left(m(x_i - \bar{x}) - (y_i - \bar{y}) \right) \cdot (x_i - \bar{x}) = 0$$

Die Gleichung wird durch 2dividiert und die Summe unterteilt.

$$m \cdot \sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y}) \cdot (x_i - \bar{x})$$

$$m = \frac{\sum_{i=1}^{n} (y_i - \bar{y}) \cdot (x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}$$

$$\frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \sum_{i=1}^{n} \bar{x} y_i - \sum_{i=1}^{n} x_i \bar{y} + \sum_{i=1}^{n} \bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2\sum_{i=1}^{n} x_i \bar{x} + \sum_{i=1}^{n} \bar{x}^2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x}\bar{y} - n\bar{x}\bar{y} + n\bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2n\bar{x}\bar{x} + n\bar{x}^2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

denn

$$\sum_{i=1}^{n} \bar{x} y_i = \bar{x} \sum_{i=1}^{n} y_i = \bar{x}\, n\bar{y} = n\bar{x}\,\bar{y} \qquad \sum_{i=1}^{n} x_i \bar{y} = \bar{y} \sum_{i=1}^{n} x_i = \bar{y}\, n\bar{x} = n\bar{x}\,\bar{y}$$

$$\sum_{i=1}^{n} \bar{x}\,\bar{y} = n\,\bar{x}\,\bar{y} \qquad \text{bzw.} \quad \sum_{i=1}^{n} \bar{x}^2 = n\bar{x}^2$$

Damit gilt:

$$m = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\,\bar{x}\,\bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2}$$

Die Formel kann auch wie folgt geschrieben werden:

$$m = \frac{s_{xy}}{s_x^2}$$

Der Term im Zähler heisst Kovarianz der Stichprobe, der im Nenner Varianz der x-Werte.

Für das einführende Beispiel ergibt sich erneut mit $\bar{x} = 6 \quad \bar{y} = 5$

$$m = \frac{110 - 3 \cdot 6 \cdot 5}{140 - 3 \cdot 36} = \frac{5}{8}$$

Übungsaufgaben:

a)

x_i	y_i	$x_i y_i$	x_i^2
-1	1	- 1	1
2	2	4	4
3	3	9	9
6	4	24	36
8	5	40	64
18	15	76	114

Als Gleichung für die Ausgleichsgerade ergibt sich grafisch y = 0.45x + 1.4

$m = \frac{76 - 54}{114 - 64.8} = 0.447$ und in die Geradengleichung eingesetzt y = 0.447x + 1.39.

b)

x_i	y_i	$x_i y_i$	x_i^2
1	3	3	1
2	6	12	4
3	7	21	9
4	11	44	16
10	27	80	30

Als Gleichung für die Ausgleichsgerade ergibt sich y = 2.5x + 0.5