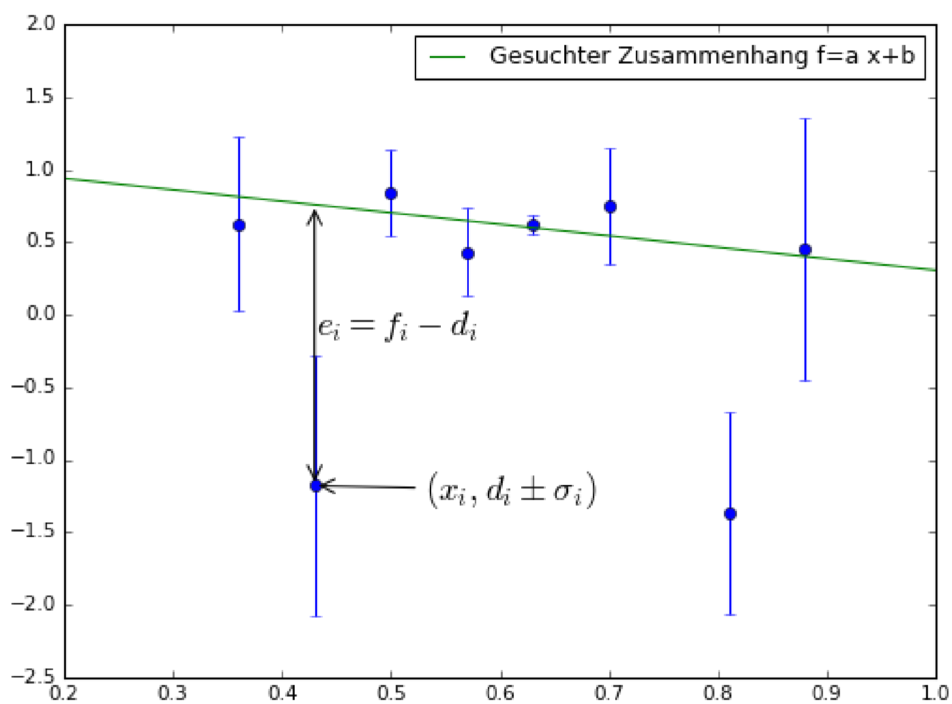
Lineare Regression

April 25, 2016

1 Lineare Regression

```
In [5]: from IPython.display import Image
        Image(filename=('Linreg_Beispiel.png'))
```

Out[5]:



1.1 Problemstellung:

Für gegebene Daten $d_i \pm \sigma_i$ an den Stellen x_i $(i = 1..N)$ ist die lineare Funktion f ("Ausgleichsgerade")

$$f = ax + b$$

zu bestimmen, die die Daten "möglichst gut" repräsentiert. Dabei soll die Kenntnis über die Fehler berücksichtigt werden, d.h. "schlechtere" Daten weniger berücksichtigt werden.

Der Fehler e_i für die einzelnen Datenpunkte d_i ist gegeben durch die Abweichung zur Modellgeraden

$$e_i = f_i - d_i$$

Es liegt ein überbestimmtes Gleichungssystem vor mit den zwei unbekannten Parametern a und b und $N > 2$ bekannten Variablen.

1.2 Formalisierung des Problems (Least-Squares Methode):

Die Methode der Summe der quadratischen Abweichungen (Least-Squares-Methode) ist eine mathematische Optimierung. Bei einer Optimierung geht es um das Finden von Minima oder Maxima von Zielfunktionen. Die Zielfunktion wird auch als Fehlerfunktion oder Kostenfunktion bezeichnet.

Die Güte eines Fits (die Fehlerfunktion F) ergibt sich aus der Summe der quadratischen Abweichungen zwischen den Daten und der zu optimierenden Funktion

$$F(a, b) = \sum_{i=1}^{N} \frac{e_i^2}{\sigma_i^2}$$

1.2.1 Ziel

Gesucht sind die speziellen Parameter $\hat{a}, \hat{b}$ für die die Fehlerfunktion $F(\hat{a}, \hat{b})$ minimal wird. Diese gesuchten Parameter führen zu einer optimalen Anpassung an die Daten.

1.2.2 Methode

Im Minimum von F muss gelten:

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 0$$

$$\frac{\partial F}{\partial b} = 0$$

$$F(a, b) = \sum_{i=1}^{N} \frac{e_i^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{(ax_i + b - d_i)^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2}(a^2x_i^2 + 2abx_i - 2ad_ix_i + b^2 - 2bd_i + d_i^2)$$

1.2.3 Bestimmungsgleichungen für Minimum der quadratischen Abweichung (optimaler Fit)

Aus den Ableitungen folgen die Gleichungen für die Bestimmung der optimalen Ausgleichsgeraden $f = \hat{a}x + \hat{b}$

$$\frac{\partial F}{\partial a} = 0 = \underbrace{(\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i^2}{\sigma_i^2})}_{\alpha} \hat{a} + \underbrace{(\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\sigma_i^2})}_{\beta} \hat{b} - \underbrace{(\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i d_i}{\sigma_i^2})}_{\gamma}$$

$$\frac{\partial F}{\partial b} = 0 = \underbrace{(\sum_{i=1}^{N} \frac{x_i}{\sigma_i^2})}_{\beta} \hat{a} + \underbrace{(\sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2})}_{\epsilon} \hat{b} - \underbrace{(\sum_{i=1}^{N} \frac{d_i}{\sigma_i^2})}_{\delta}$$

Vereinfachen wir mit $\alpha = \sum \frac{x_i^2}{\sigma_i^2}$, $\beta = \sum \frac{x_i}{\sigma_i^2}$, $\gamma = \sum \frac{x_i d_i}{\sigma_i^2}$, $\delta = \sum \frac{d_i}{\sigma_i^2}$ und $\epsilon = \sum \frac{1}{\sigma_i^2}$, so folgt

$$\alpha\hat{a} + \beta\hat{b} = \gamma$$

$$\beta\hat{a} + \epsilon\hat{b} = \delta$$

Durch Umformen und Einsetzen erhalten wir die Berechnungsformeln für $\hat{a}$ und $\hat{b}$

$$\hat{b} = \frac{\alpha\delta - \beta\gamma}{\alpha\epsilon - \beta^2}$$

$$\hat{a} = \frac{\gamma - \beta\hat{b}}{\alpha}$$

2 Aufgabe lineare Regression

Gegeben sind die folgenden Datenpunkte $d_i \pm \sigma_i$ an den Stellen x_i $(i = 1..8)$

Programmieren Sie eine Funktion ausgleichsgerade(x,d,sigma), welche die Regressionsparameter $\hat{a}$ und $\hat{b}$ berechnet.

```
In [2]: %pylab inline
        from ausgleichsgerade import ausgleichsgerade

        # Zufällige Beispieldaten
        x=array([ 0.63,  0.81,  0.36,  0.43,  0.70, 0.57 ,  0.50,  0.88])
        d=array([ 0.62, -1.37,  0.62, -1.18,  0.75, 0.43 ,  0.84,  0.45])
        sigma=array([0.06,  0.7,  0.6,  0.9,  0.4, 0.3,  0.3 ,  0.9])

        # Diese Funktion gilt es zu programmieren
        a,b=ausgleichsgerade(x,d,sigma)

        # Erzeuge neue X und Y Werte zum Plotten der Ausgleichsgerade
        X=linspace(0.2,1)
        Y=a*X+b

        # Graphische Ausgabe, siehe oben
        figure(figsize=(8,6))
        errorbar(x,d,yerr=sigma,fmt='o')
        plot(X,a*X+b,'g-',label='Gesuchter Zusammenhang f=a x+b')
        i=3
        annotate('$(x_i,d_i\pm \sigma_i)$',xy=(x[i], d[i]), \
                 arrowprops=dict(arrowstyle='->'), xytext=(x[i]+0.1, d[i]-0.1),fontsize=18)
        annotate('',xy=(x[i], d[i]), arrowprops=dict(arrowstyle='<->'), \
                 xytext=(x[i], x[i]*a+b),fontsize=18)
        text(x[i], x[i]*a+b-sigma[i],'$e_i=f_i-d_i$',fontsize=18)
        axis([0.2,1.0,-2.5,2.0])
        legend()
        savefig('Linreg_Beispiel.png',dpi=75) # Speichern als Bild
        close()
```

```
Populating the interactive namespace from numpy and matplotlib
```

2.1 Lösungshilfe Python

Ergänzen Sie die fehlenden Berechnungsvorschriften ...

```
In [12]: %%file ausgleichsgerade.py
         from numpy import sum

         def ausgleichsgerade(x,d,s):
             """Berechne die Ausgleichsgerade f = a * x + b fuer Datenpunkte, die durch die Vektoren
```

```
            x_i, d_i +- s_i gegeben sind.

            Eingabe:
                x X-Achsenabschnitt
                d Y-Achsenabschnitt
                s Fehler
            Ausgabe:
                a_fit, b_fit
        """
        alpha=sum(x**2/s**2)
        ...
        ...
        b_fit=...
        a_fit=...
        return a_fit, b_fit
```

2.2 Lösungshilfe Matlab/Octave

In [3]:
```
x=[ 0.63,  0.81,  0.36,  0.43,  0.70, 0.57 ,  0.50,  0.88];
d=[ 0.62, -1.37,  0.62, -1.18,  0.75, 0.43 ,  0.84,  0.45];
sigma=[0.06,  0.7,  0.6,  0.9,  0.4, 0.3,  0.3 ,  0.9];
```

In [16]:
```
%%file ausgleichsgerade.m

function [a_fit, b_fit]=ausgleichsgerade(x,d,s)
    alpha=sum(x.^2./s.^2);
    ...
end
```

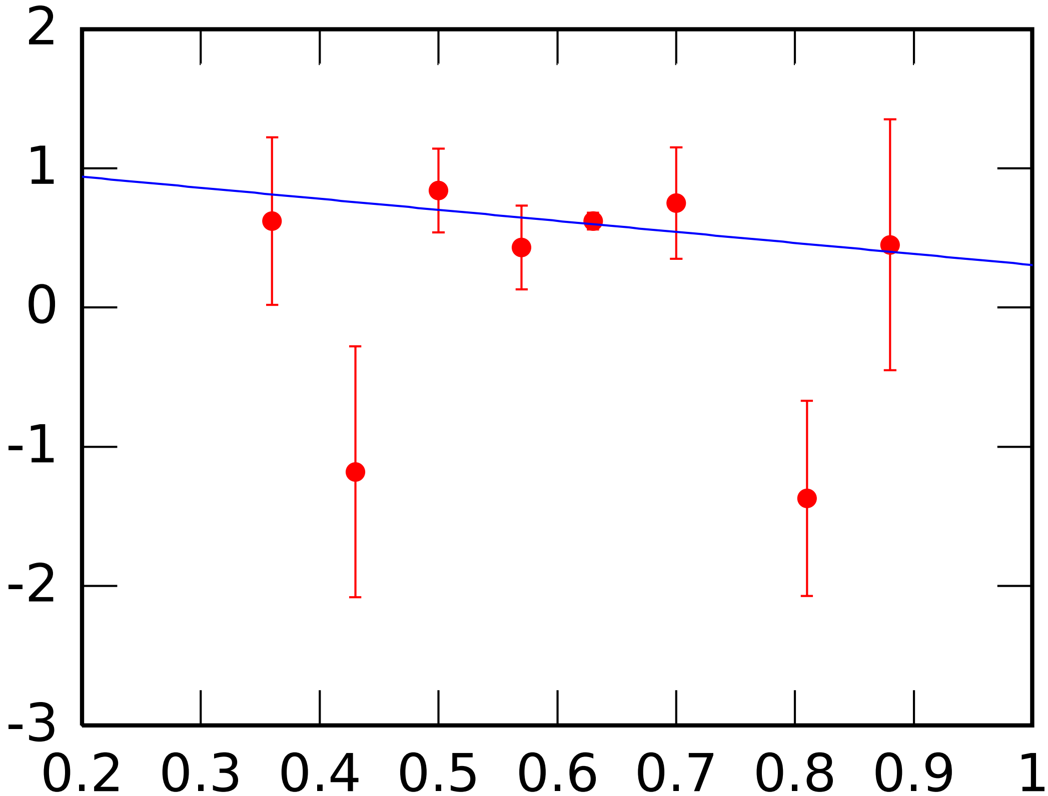
Created file '/home/lars/sync/Zeitserien/Zeitreihenanalyse/stunde3/ausgleichsgerade.m'.

In [21]:
```
[a,b]=ausgleichsgerade(x,d,sigma)
```

Out[21]:
```
a = -0.79157
b =  1.0966
```

In [28]:
```
X=linspace(0.2,1);
Y=a*X+b;

errorbar(x,d,sigma,".r")
hold()
plot(X,a*X+b)
```


2
1
0
-1
-2
-3
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1