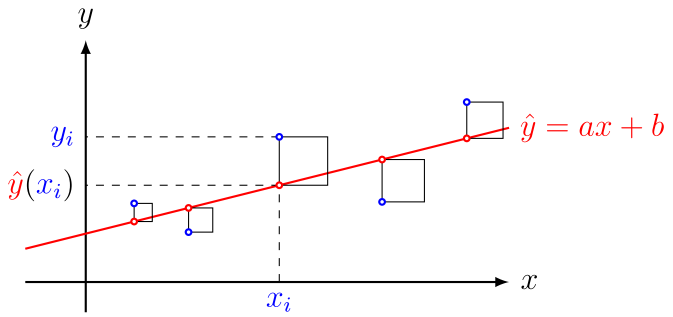
Das Modell

Gegeben: n Datenpaare (x_i, y_i) mit $i = 1, \dots, n$

Gesucht: Funktion $\hat{y}(x) = ax + b$, so dass die Summe der quadrierten Abweichungen

$$d(a,b) = \sum_{i=1}^{n} \big(y_i - \hat{y}(x_i)\big)^2 = \sum_{i=1}^{n} \big(y_i - (ax_i + b)\big)^2$$

minimal wird.



Ein paar Rechenregeln für Summen

(S1) $$\sum_{i=1}^{n} x_i + \sum_{i=1}^{n} y_i = \sum_{i=1}^{n} (x_i + y_i)$$

$$\begin{aligned}\sum_{i=1}^{3} x_i + \sum_{i=1}^{3} y_i &= (x_1 + x_2 + x_3) + (y_1 + y_2 + y_3) \\ &= (x_1 + y_1) + (x_2 + y_2) + (x_3 + y_3) = \sum_{i=1}^{3} (x_i + y_i)\end{aligned}$$

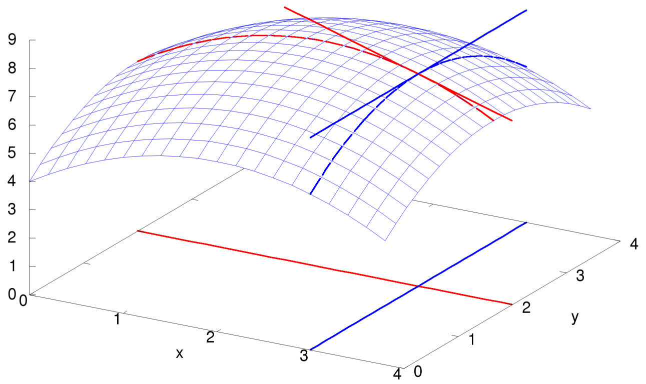
(S2) $$\sum_{i=1}^{n} ax_i = a \sum_{i=1}^{n} x_i$$

$$\sum_{i=1}^{3} ax_i = ax_1 + ax_2 + ax_3 = a(x_1 + x_2 + x_3) = a \sum_{i=1}^{3} x_i$$

(S3) $$\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i \quad \Leftrightarrow \quad n\overline{x} = \sum_{i=1}^{n} x_i$$

Partielles Differenzieren

Gegeben: reellwertige Funktion $z = f(x, y)$



$\dfrac{\partial f(x,y)}{\partial x}$: partielle Ableitung von $z = f(x, y)$ in x-Richtung

$\dfrac{\partial f(x,y)}{\partial y}$: partielle Ableitung von $z = f(x, y)$ in y-Richtung

Beispiel

$f(x, y) = 3x^2 + y^2 + 4xy - 2x + 2y + 5$

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial x} = 6x + 4y - 2$$

$$\frac{\partial f(x,y)}{\partial y} = 2y + 4x + 2$$

In welchen Punkten hat der Graph (*Hyperfläche*) eine horizontale Tangentialebene?

$$\begin{array}{l} 6x + 4y - 2 = 0 \\ 2y + 4x + 2 = 0 \end{array} \quad \Rightarrow \quad \begin{array}{l} x = -3 \\ y = 5 \end{array} \quad \Rightarrow \quad P(-3, 5)$$

Die Frage, ob es sich um einen Hoch- oder um einen Tiefpunkt handelt ist in der mehrdimensionalen Fall etwas komplizierter zu beantworten und wird hier nicht behandelt.

Ausmultiplizieren der Quadrate

Kann weggelassen werden, wenn unten mit der Kettenregel differenziert wird.

$$\begin{aligned}
d(a,b) &\overset{(1)}{=} \sum_{i=1}^{n} \big(y_i - (ax_i + b)\big)^2 \quad \text{[2. binomische Formel]} \\
&= \sum_{i=1}^{n} \big(y_i^2 - 2y_i(ax_i + b) + (ax_i + b)^2\big) \\
&= \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \sum_{i=1}^{n} 2y_i(ax_i + b) + \sum_{i=1}^{n}(ax_i + b)^2 \quad \text{[1. binom. Formel]} \\
&= \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - 2\sum_{i=1}^{n}(ax_iy_i + by_i) + \sum_{i=1}^{n}(a^2x_i^2 + 2abx_i + b^2) \\
&= \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - 2\sum_{i=1}^{n} ax_iy_i - 2\sum_{i=1}^{n} by_i + \sum_{i=1}^{n} a^2x_i^2 + \sum_{i=1}^{n} 2abx_i + \sum_{i=1}^{n} b^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - 2a\sum_{i=1}^{n} x_iy_i - 2b\sum_{i=1}^{n} y_i + a^2\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + 2ab\sum_{i=1}^{n} x_i + nb^2
\end{aligned}$$

Partielle Ableitungen

Leite (1) jeweils partiell nach a und nach b ab.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial d(a,b)}{\partial a} &\overset{(2)}{=} -2\sum_{i=1}^{n} x_iy_i + 2a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + 2b\sum_{i=1}^{n} x_i \\
\frac{\partial d(a,b)}{\partial b} &\overset{(3)}{=} -2\sum_{i=1}^{n} y_i + 2a\sum_{i=1}^{n} x_i + 2nb
\end{aligned}$$

Minimierung

(2) und (3) müssen 0 werden.

$$\begin{aligned}
-2\sum_{i=1}^{n} x_iy_i + 2a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + 2b\sum_{i=1}^{n} x_i &\overset{(4)}{=} 0 \\
-2\sum_{i=1}^{n} y_i + 2a\sum_{i=1}^{n} x_i + 2nb &\overset{(5)}{=} 0
\end{aligned}$$

Dividiere in (4) und (5) beide Seiten durch 2 und bringe die nicht von a und b abhängigen Summanden auf die rechte Seite.

$$\begin{aligned}
a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i &\overset{(6)}{=} \sum_{i=1}^{n} x_iy_i \\
a\sum_{i=1}^{n} x_i + nb &\overset{(7)}{=} \sum_{i=1}^{n} y_i
\end{aligned}$$

Lösen des Gleichungssystems

$$a\sum_{i=1}^{n} x_i + nb \overset{(7)}{=} \sum_{i=1}^{n} y_i \quad \overset{(S3)}{\Rightarrow} \quad na\overline{x} + nb = n\overline{y}$$
$$a\overline{x} + b = \overline{y} \quad \Rightarrow \quad b \overset{(8)}{=} \overline{y} - a\overline{x}$$

setze (8) in (6) ein und löse nach a auf:

$$\begin{aligned}
a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + (\overline{y} - a\overline{x})\sum_{i=1}^{n} x_i &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + \overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i - a\overline{x}\sum_{i=1}^{n} x_i &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - a\overline{x}\sum_{i=1}^{n} x_i &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i \\
a\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - a\overline{x}\sum_{i=1}^{n} x_i\right) &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i \\
a \overset{(9)}{=} \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \overline{x}\sum_{i=1}^{n} x_i} &= \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - n\,\overline{x}\,\overline{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\,\overline{x}^2}
\end{aligned}$$

Wir werden das Resultat dem Verschiebungsatz noch anders darstellen.

Verschiebungssatz

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2 &= \sum_{i=1}^{n}(x_i^2 - 2\overline{x}x + \overline{x}^2) \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} 2\overline{x}x_i + \sum_{i=1}^{n} \overline{x}^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2\overline{x}\sum_{i=1}^{n} x_i + \sum_{i=1}^{n} \overline{x}^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2\overline{x}\,n\overline{x} + n\overline{x}^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2n\overline{x}^2 + n\overline{x}^2 \\
&\overset{\text{V1}}{=} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\overline{x}^2
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})(y_i-\overline{y}) &= \sum_{i=1}^{n}(x_iy_i - x_i\overline{y} - \overline{x}y_i + \overline{x}\,\overline{y}) \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_iy_i - \sum_{i=1}^{n} x_i\overline{y} - \sum_{i=1}^{n} \overline{x}y_i + \sum_{i=1}^{n} \overline{x}\,\overline{y} \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_iy_i - \overline{y}\sum_{i=1}^{n} x_i - \overline{x}\sum_{i=1}^{n} y_i + n\,\overline{x}\,\overline{y} \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_iy_i - \overline{y}\,n\overline{x} - \overline{x}\,n\overline{y} + n\,\overline{x}\,\overline{y} \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_iy_i - 2\,\overline{xy} + n\,\overline{x}\,\overline{y} \\
&\overset{\text{V2}}{=} \sum_{i=1}^{n} x_iy_i - n\,\overline{xy}
\end{aligned}
$$

Setze V1 und V2 in den Nenner und Zähler von (9) ein:

$$
a \overset{(9)}{=} \frac{\sum\limits_{i=1}^{n} x_iy_i - n\,\overline{x}\,\overline{y}}{\sum\limits_{i=1}^{n} x_i^2 - n\,\overline{x}^2} = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})(y_i-\overline{y})}{\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2}
$$

Zusammenfassung

Die Koeffizienten a und b der Funktion

$\hat{y}(x) = ax + b$

welche die Summe der quadratischen Abweichungen minimieren, haben die folgende Form:

$$
a = \frac{\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})(y_i-\overline{y})}{\sum\limits_{i=1}^{n}(x_i-\overline{x})^2}
$$

$b = \overline{y} - a\overline{x}$

wobei $\overline{x}$ und $\overline{y}$ die Mittelwerte der Koordinaten der gegebenen Datenpunkte sind.