Wilfried Rohm

Ausgleichsfunktionen - Varianten zur Berechnung

Zur Auswahl stehen folgende Möglichkeiten:

- **Computerunterstütze Suche nach einer symbolischen Lösung**
- **Numerische Lösung des Optimierungsproblems über Normalgleichungen**
- **Numerische Lösung des Optimierungsproblems über den Befehl "minfehl"**
- **Möglichkeiten zur direkten Berechnung der Regressionsgeraden**
- **Zurück zur Beispielübersicht "Wirtschaftsmathematik"**

Computerunterstützte Suche nach einer symbolischen Lösung nach dem Prinzip der kleinsten Quadrate

-> Menü

Zunächst wird die Zielfunktion in Abhängigkeit von k und d definiert (2 Arten)

$$g(x,k,d) := k \cdot x + d$$

$$f(k,d) := \sum_i \left[y_i - \left(k \cdot x_i + d\right)\right]^2 \qquad f(k,d) := \sum_i \left(y_i - g\left(x_i, k, d\right)\right)^2$$

Die partiellen Ableitungen nach den Unbekannten müssen gebildet und 0 gesetzt werden

Vorgabe

$$\frac{\partial}{\partial k} f(k,d) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial d} f(k,d) = 0$$

$$\text{Suchen}(k,d) \rightarrow$$

Eine symbolische Lösung wird hier (leider) nicht gefunden. Daher versuchen wir "nachzuhelfen":

Die partiellen Ableitungen nach den Unbekannten müssen gebildet und 0 gesetzt werden

$$\frac{d}{dk} f(k,d) \rightarrow \sum_i -2 \cdot \left(y_i - k \cdot x_i - d\right) \cdot x_i \qquad \sum_i \left[-2 \cdot \left(y_i - k \cdot x_i - d\right) \cdot x_i\right] = 0$$

$$\frac{d}{dd} f(k,d) \rightarrow \sum_i \left(-2 \cdot y_i + 2 \cdot k \cdot x_i + 2 \cdot d\right) \qquad \sum_i \left(-2 \cdot y_i + 2 \cdot k \cdot x_i + 2 \cdot d\right) = 0$$

Nun wird versucht, das Gleichungssystem symbolisch zu lösen (in Matrizenschreibweise)

$$\sum_i \left[-2\cdot\left(y_i - k\cdot x_i - d\right)\cdot x_i\right] = 0 \quad \text{umformen zu} \quad k\cdot 2\cdot\sum_i \left(x_i\right)^2 + d\cdot\left[\sum_i \left(2\, x_i\cdot d\right)\right] = \sum_i \left(2\cdot x_i\cdot y_i\right)$$

$$\sum_i \left(-2\cdot y_i + 2\cdot k\cdot x_i + 2\cdot d\right) = 0 \qquad k\cdot 2\cdot\sum_i x_i + d\cdot\sum_i 2 = \sum_i \left(2\cdot y_i\right)$$

Daraus erhält man Koeffizientenmatrix A und Ergebnisvektor B des Gleichungssystems $A\cdot\begin{pmatrix} k \\ d \end{pmatrix} = B$

$$A := \begin{bmatrix} 2\cdot\sum_i \left(x_i\right)^2 & \sum_i \left(2\cdot x_i\right) \\ 2\cdot\sum_i x_i & \sum_i 2 \end{bmatrix} \qquad B := \begin{bmatrix} \sum_i \left(2\cdot x_i\cdot y_i\right) \\ \sum_i \left(2\cdot y_i\right) \end{bmatrix}$$

Wir versuchen eine symbolische Lösung des Gleichungssystems:

$$A^{-1}\cdot B \rightarrow \begin{bmatrix} \dfrac{i}{2\cdot\sum_i \left(x_i\right)^2\cdot i - \sum_i 2\cdot x_i\cdot\sum_i x_i}\cdot\sum_i 2\cdot x_i\cdot y_i - \dfrac{1}{2}\cdot\dfrac{\sum_i 2\cdot x_i}{2\cdot\sum_i \left(x_i\right)^2\cdot i - \sum_i 2\cdot x_i\cdot\sum_i x_i}\cdot\sum_i 2\cdot y_i \\ \dfrac{-\sum_i x_i}{2\cdot\sum_i \left(x_i\right)^2\cdot i - \sum_i 2\cdot x_i\cdot\sum_i x_i}\cdot\sum_i 2\cdot x_i\cdot y_i + \dfrac{\sum_i \left(x_i\right)^2}{2\cdot\sum_i \left(x_i\right)^2\cdot i - \sum_i 2\cdot x_i\cdot\sum_i x_i}\cdot\sum_i 2\cdot y_i \end{bmatrix}$$

Dies gelingt zwar, doch ist das Ergebnis nicht annähernd so übersichtlich bzw. "schön", wie wir es - dank trickreichem Einsetzen von x-quer und y-quer (Mittelwerte) händisch erzielen können und daher im Formelheft finden! Allerdings kann (manchmal!) Mathcad mit "Vereinfachen" so wie hier vernünftige bzw. lesbare Ergebnisse liefern.

$$A^{-1}\cdot B \text{ vereinfachen } \rightarrow \begin{bmatrix} \dfrac{i\cdot\sum_i x_i\cdot y_i - \sum_i x_i\cdot\sum_i y_i}{\sum_i \left(x_i\right)^2\cdot i - \left(\sum_i x_i\right)^2} \\ \dfrac{-\left[\sum_i x_i\cdot\sum_i x_i\cdot y_i - \sum_i \left(x_i\right)^2\cdot\sum_i y_i\right]}{\sum_i \left(x_i\right)^2\cdot i - \left(\sum_i x_i\right)^2} \end{bmatrix}$$

Hinweis : In der Version Mathcad 14 funktioniert diese symbolische Berechnung leider nicht!

Nun noch eine numerische Lösung mit speziellen Werten:

$$x := \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 8 \\ 10 \\ 15 \end{pmatrix} \qquad y := \begin{pmatrix} 100 \\ 170 \\ 220 \\ 398 \\ 509 \end{pmatrix} \qquad n := \text{länge}(x) \qquad i := 0..n-1$$

länge = length

$$A := \begin{bmatrix} 2\cdot\sum_i (x_i)^2 & \sum_i (2\cdot x_i) \\ 2\cdot\sum_i x_i & \sum_i 2 \end{bmatrix} \qquad B := \begin{bmatrix} \sum_i (2\cdot x_i\cdot y_i) \\ \sum_i (2\cdot y_i) \end{bmatrix}$$

Matrizen von oben übernommen!

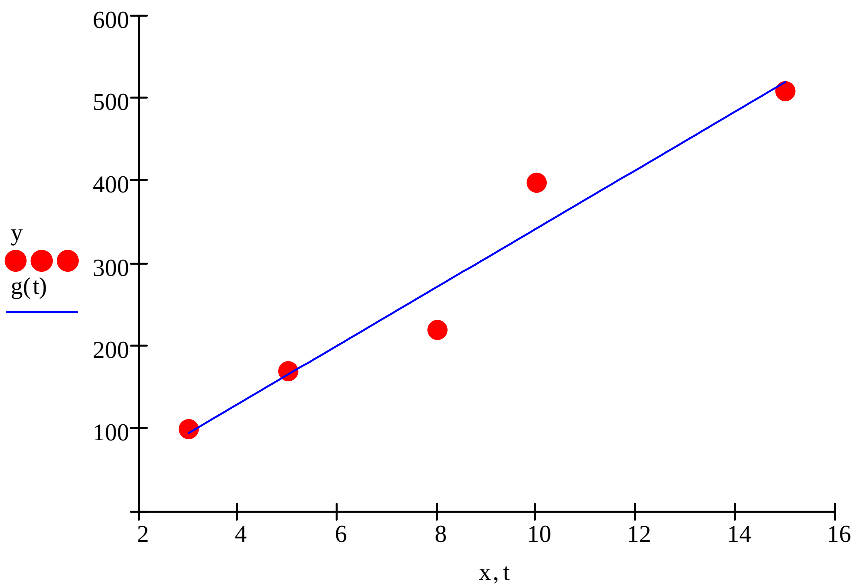
$$\begin{pmatrix} k \\ d \end{pmatrix} := A^{-1}\cdot B \qquad \begin{pmatrix} k \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 35.364 \\ -10.585 \end{pmatrix}$$

Numerische Lösung des Gleichungssystems (wieder mit Matrizenrechnung)

Grafische Darstellung

$$g(t) := k\cdot t + d \qquad t := \min(x), \min(x) + \frac{(\max(x) - \min(x))}{100} .. \max(x)$$

ACHTUNG : Grafik unabhängig von den Werten machen!!



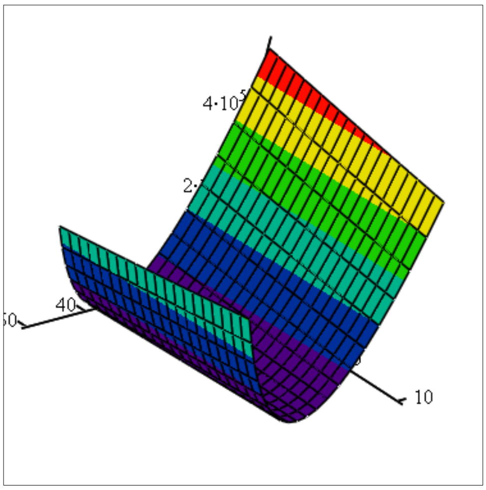
Numerische Lösung des Optimierungsproblems über die Normalgleichungen

> Menü

Nach dem Prinzip der kleinsten Quadrate wird zunächst die Zielfunktion aufgestellt:

$$\mathrm{SumQ}(k,d) := \sum_i \left[y_i - (k \cdot x_i + d)\right]^2$$

Wenn wir diese Funktion wie nebenstehend gezeichnet in einem 3-D-Diagramm darstellen, kann man erkennen, dass wir das Minimum mit der notwendigen Bedingung suchen können, die partiellen Ableitungen gleich 0 zu setzen.



SumQ

$k := 0 \qquad d := 0$

Vorgabe

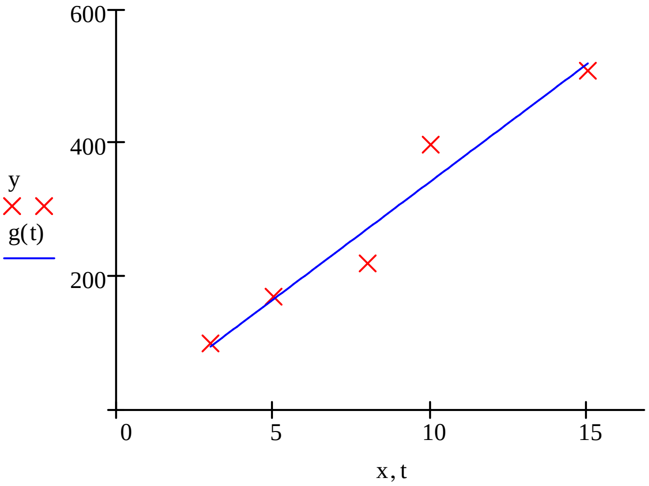
$$\frac{\partial}{\partial k}\mathrm{SumQ}(k,d) = 0$$

$$\frac{\partial}{\partial d}\mathrm{SumQ}(k,d) = 0$$

$$\begin{pmatrix} k \\ d \end{pmatrix} := \mathrm{Suchen}(k,d) \qquad \begin{pmatrix} k \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 35.364 \\ -10.585 \end{pmatrix}$$

Ob eine (brauchbare) Lösung gefunden wird, hängt von mehreren Faktoren ab:

* Wahl der "Startwerte"
* Komplexität der Ausgfeichsfunktion (die Gerade ist kein Problem!)
* Wahl des numerischen Verfahrens (über die rechte Maustaste)



Numerische Lösung des Optimierungsproblems mit Hilfe des minfehl-Befehls

-> Menü

Wie übernehmen von oben zunächst die Zielfunktion nach dem Prinzip der kleinsten Quadrate

$$SumQ(k,d) := \sum_i \left[y_i - \left(k \cdot x_i + d\right)\right]^2$$

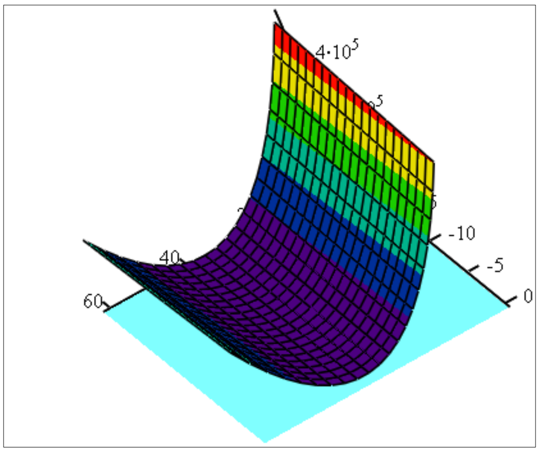
Es kann passieren, dass bei komplizierteren Funktionen über die Normalgleichungen keine Lösung gefunden wird. Dann kann man es mit der "Minfehl"-Funktion versuchen, die nach gleichen Verfahren wie der SOLVER in Excel arbeitet und gut geeignet ist zum Lösen von komplexeren Optimierungsproblemen (z.b. auch Lineare Optimierung, ...)

$d := 0 \qquad k := -10$

Vorgabe

$SumQ(k,d) = 0$

$$\begin{pmatrix} k \\ d \end{pmatrix} := Minfehl(k,d) \qquad \begin{pmatrix} k \\ d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 35.364 \\ -10.585 \end{pmatrix}$$



SumQ

Hier wird die gleiche Lösung wie über die Normalgleichungen gefunden

Man kann sich übrigens natürlich auch über das Einsetzen verschiedener Werte für die Parameter k und d (verifizierend) davon überzeugen, dass ein Minimum gefunden wurde.

$SumQ(k,d) = 5.91 \times 10^3$

$SumQ(k,0) = 6.47 \times 10^3 \qquad SumQ(40,d) = 1.5 \times 10^4 \qquad SumQ(20,0) = 9.299 \times 10^4$

$SumQ(k,-20) = 6.353 \times 10^3 \qquad SumQ(20,d) = 1.058 \times 10^5 \qquad SumQ(35,-11) = 5.979 \times 10^3$

Einige Möglichkeiten zur direkten Berechnung der Regressionsgeraden

-> Menü

Zur Berechnung der Regressionsgeraden gibt es natürlich auch Standardbefehle

$k := \mathrm{neigung}(x,y)$ $\quad d = -10.585$

$d := \mathrm{achsenabschn}(x,y)$ $\quad d = -10.585$ $\quad \mathrm{korr}(x,y) = 0.974$ Perason´scher Korrelationskoeffizient

Die Funktionen heißen englisch:

slope = neigung

intercept = achsenabschn

Im Fall der AusgleichsGERADE kann auch die line-Funktion (dt: linie) verwendet werden:

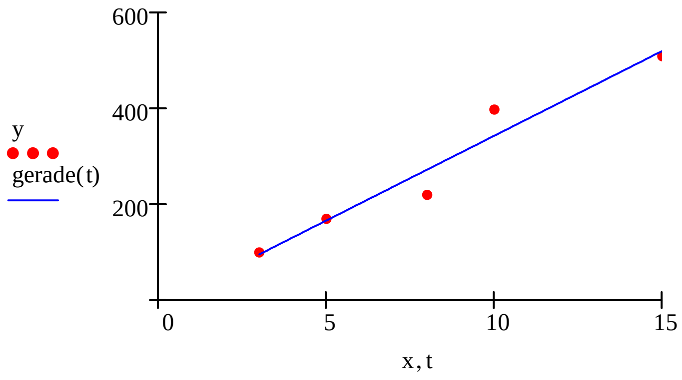
$$\begin{pmatrix} d \\ k \end{pmatrix} := \mathrm{linie}(x,y) \qquad \begin{pmatrix} d \\ k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -10.585 \\ 35.364 \end{pmatrix}$$

x und y sind wiederum die Datenvektoren!

$$\mathrm{linie}(x,y) = \begin{pmatrix} -10.585 \\ 35.364 \end{pmatrix}$$

Verwendung der Funktion "linanp(x,y,F)", welche recht universell verwendbar ist, wenn man eine Funktion modellieren möchte, welche sich als Linearkombination verschiedener anderer Funktionen darstellen lässt. (siehe Musterbeispiel bei den Quicksheets)

$$Ff(t) := \begin{pmatrix} 1 \\ t \end{pmatrix} \qquad S := \mathrm{linanp}(x,y,Ff) \qquad S = \begin{pmatrix} -10.585 \\ 35.364 \end{pmatrix} \qquad \mathrm{gerade}(t) := Ff(t) \cdot S$$



Darüber hinaus gibt es spezielle Anpassungsfunktionen

-> Menü