Herleitung Polynomielle Regression

Die erste Herleitung umfasst den Spezialfall eines quadratischen Polynoms (wie in Übungsaufgabe 22), während danach der allgemeine Fall hergeleitet wird. In jedem Fall sei der Datensatz mit

$$\Big((x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)\Big)$$

gegeben.

Spezialfall: Quadratisches Polynom

Das Polynom, welches die Daten approximieren soll, sei mit

$$y = g(x) = a + bx + cx^2$$

gegeben. Die entsprechende Fehlerfunktion mit

$$F(a, b, c) = \sum_{i=1}^{n} \Big(g(x_i) - y_i\Big)^2.$$

Um den Fehler zu minimieren, müssen die partiellen Ableitungen der Fehlerfunktion verschwinden:

$$\frac{\partial F}{\partial a} \overset{!}{=} 0 \qquad \frac{\partial F}{\partial b} \overset{!}{=} 0 \qquad \frac{\partial F}{\partial c} \overset{!}{=} 0$$

Ableitung nach a und Nullsetzen:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial a} &\overset{!}{=} 0 \\
2 \cdot \sum_{i=1}^{n} \Big(a + bx_i + cx_i^2 - y_i\Big) &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n} a + \sum_{i=1}^{n} bx_i + \sum_{i=1}^{n} cx_i^2 &= \sum_{i=1}^{n} y_i \\
na + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) b + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) c &= \sum_{i=1}^{n} y_i
\end{aligned}$$

Ableitung nach b und Nullsetzen:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial b} &\overset{!}{=} 0 \\
2 \cdot \sum_{i=1}^{n} \Big(a + bx_i + cx_i^2 - y_i\Big) x_i &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n} \Big(ax_i + bx_i^2 + cx_i^3 - x_i y_i\Big) &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n} ax_i + \sum_{i=1}^{n} bx_i^2 + \sum_{i=1}^{n} cx_i^3 &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) b + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^3\right) c &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i
\end{aligned}$$

Ableitung nach c und Nullsetzen:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial c} &\overset{!}{=} 0 \\
2 \cdot \sum_{i=1}^{n} \Big(a + bx_i + cx_i^2 - y_i\Big) x_i^2 &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n} \Big(ax_i^2 + bx_i^3 + cx_i^4 - x_i^2 y_i\Big) &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n} ax_i^2 + \sum_{i=1}^{n} bx_i^3 + \sum_{i=1}^{n} cx_i^4 &= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i \\
\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) a + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^3\right) b + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^4\right) c &= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i
\end{aligned}$$

Die jeweils letzten Zeilen der drei Ableitungen ergeben das zu lösende Gleichungssystem:

$$
\begin{array}{ccccccc}
na & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) b & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) c & = & \sum_{i=1}^{n} y_i \\
\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) b & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^3\right) c & = & \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) a & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^3\right) b & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^4\right) c & = & \sum_{i=1}^{n} x_i^2 y_i
\end{array}
$$

Allgemeiner Fall: Polynom m-ten Grades

Das Polynom, welches die Daten approximieren soll, sei mit

$$y = g(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_m x^m$$

gegeben. Die entsprechende Fehlerfunktion mit

$$F(a_0, \ldots, a_m) = \sum_{i=1}^{n} \Big(g(x_i) - y_i\Big)^2.$$

Um den Fehler zu minimieren, müssen die partiellen Ableitungen der Fehlerfunktion verschwinden:

$$\frac{\partial F}{\partial a_0} \stackrel{!}{=} 0, \qquad \frac{\partial F}{\partial a_1} \stackrel{!}{=} 0, \qquad \cdots \qquad \frac{\partial F}{\partial a_m} \stackrel{!}{=} 0$$

Ableitung nach a_j und Nullsetzen ($j = 0, \ldots, m$):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F}{\partial a_j} &\overset{!}{=} 0 \\
2 \cdot \sum_{i=1}^{n} \Big(a_0 + a_1 x_i + \cdots + a_m x_i^m - y_i\Big) x_i^j &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n} \Big(a_0 x_i^j + a_1 x_i^{j+1} + \cdots + a_m x_i^{m+j} - x_i^j y_i\Big) &= 0 \\
\sum_{i=1}^{n} a_0 x_i^j + \sum_{i=1}^{n} a_1 x_i^{j+1} + \cdots + \sum_{i=1}^{n} a_m x_i^{m+j} &= \sum_{i=1}^{n} x_i^j y_i \\
\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^j\right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^{j+1}\right) a_1 + \cdots + \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^{m+j}\right) a_m &= \sum_{i=1}^{n} x_i^j y_i
\end{aligned}$$

Die letzte Zeile für $j = 0, \ldots, m$ ergibt das zu lösende Gleichungssystem mit $m + 1$ Gleichungen:

$$\begin{array}{ccccccccc}
n a_0 & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_1 & + & \cdots & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^m\right) a_m & = & \sum_{i=1}^{n} y_i \\
\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right) a_0 & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) a_1 & + & \cdots & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1}\right) a_m & = & \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \\
 & \vdots & & & \vdots & & & \vdots & \\
\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^m\right) a_0 & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^{m+1}\right) a_1 & + & \cdots & + & \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^{2m}\right) a_m & = & \sum_{i=1}^{n} x_i^m y_i
\end{array}$$