Udledning af formlen for b ved lineær regression

Vi kigger på lineær regression en gang til og skal denne gang vise følgende sætning

# Sætning

Givet et datasæt med n punkter $\left(x\_{1},y\_{1}\right), …, \left(x\_{n},y\_{n}\right)$. Konstanten $b$ i den rette linje $y=ax+b$, der bedst beskriver datasættet kan beregnes ved formlen

$$b=\overbar{y}-a·\overbar{x}$$

Hvor $\overbar{x}$ er gennemsnittet af $x$-værdierne og $\overbar{y}$ er gennemsnittet af $y$-værdierne.

## En kommentar til beviset

Til eksamen skal man nøjes med at skrive selve udregningerne. Ellers bliver det urimeligt langt. Resten forklares mundtligt og gerne kort.

Argumentet for at det stationære punkt er et minimum fylder næste lige så meget som udledningen af formlen for $b$. Man må gerne skrive mindre end jeg har gjort her, eller nøjes med at forklare principperne i det, men det er en god idé at kunne lave udregningerne.

# Bevis

Den bedste rette linje defineres som den linje, der minimerer summen af kvadraterne på residualerne.
Residualerne er den lodrette afstand mellem datapunkt og model, dvs.

$r\_{i}=y\_{i}-f\left(x\_{i}\right)=y\_{i}-\left(a·x\_{i}+b\right)=y\_{i}-a·x\_{i}-b$.

Summen betegnes her med $S$:

$$S=\sum\_{i=1}^{n}r\_{i}^{2}=\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-a·x\_{i}-b\right)^{2}$$

Vi betragter nu $S$ som en funktion af de to variable $a$ og $b$, og finde b-værdien i minimum for denne funktion.

Man finder generelt de stationære punkter ved at løse de to ligninger $\frac{∂S}{∂a}=0$ og $\frac{∂S}{∂b}=0$. Da vi kun er interesserede i værdien af $b$, nøjes vi med at løse den sidste.

Dermed skal vi starte med at differentiere $S$ mht. $b$.

|  |  |
| --- | --- |
| $$\frac{∂S}{∂b}=\frac{∂}{∂b}\left(\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-a·x\_{i}-b\right)^{2}\right)$$ | $S$ indsættes. |
| $$=\sum\_{i=1}^{n}\frac{∂}{∂b}\left(\left(y\_{i}-a·x\_{i}-b\right)^{2}\right)$$ | Reglen om ledvis differentiation bruges (når jeg differentiere en sum kan jeg differentiere først og så lægge sammen bagefter). |
| $$=\sum\_{i=1}^{n}\left(-1·2·\left(y\_{i}-a·x\_{i}-b\right)\right)$$ | Kædereglen bruges. $\frac{∂}{∂b}\left(y\_{i}-a·x\_{i}-b\right)=-1$. Den ydre funktion er $x^{2}$. |
| $$=\sum\_{i=1}^{n}\left(-2y\_{i}+2a·x\_{i}+2b\right)$$ | -2 ganges ind i parentesen. |

Nu omskrives summen så det bliver lettere at løse ligningen:

$$\sum\_{i=1}^{n}-2y\_{i}+2ax\_{i}+2b=\sum\_{i=1}^{n}-2y\_{i}+\sum\_{i=1}^{n}2ax\_{i}+\sum\_{i=1}^{n}2b= -2·\sum\_{i=1}^{n}y\_{i}+2a·\sum\_{i=1}^{n}x\_{i}+2b·n$$

Første omskrivning svarer til at samle alle ensbenævnte led (så først alle led med $y$, så dem med $ax$ og til sidst dem med $b$. Anden omskrivning svarer til at sætte fælles faktorer uden for parentes i de første to summer. Den sidste sum indeholder ikke $x\_{i}$ eller $y\_{i}$ og kan derfor udregnes.

Jeg sætter nu $\frac{∂S}{∂b}=0$ og isolerer $b$:

$$-2·\sum\_{i=1}^{n}y\_{i}+2a·\sum\_{i=1}^{n}x\_{i}+2b·n=0$$

$$⇔ 2b·n=2·\sum\_{i=1}^{n}y\_{i}-2a·\sum\_{i=1}^{n}x\_{i}$$

$$⇔ b=\frac{1}{n}·\sum\_{i=1}^{n}y\_{i}-a·\frac{1}{n}·\sum\_{i=1}^{n}x\_{i}$$

$$⇔ b=\overbar{y}-a·\overbar{x}$$

hvor $\overbar{y}$ betegner gennemsnittet af $y$-værdierne og $\overbar{x}$ betegner gennemsnittet af $x$-værdierne.

Dermed er formlen for $b$ bevist.

For at argumentere for at det stationære punkt er et minimum, skal vi kigge på de andenordens afledede.

Først findes den partielt afledede mht. $a$ på samme måde som vi ovenfor differentierede mht. $b$.

|  |  |
| --- | --- |
| $$\frac{∂S}{∂a}=\frac{∂}{∂a}\left(\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-a·x\_{i}-b\right)^{2}\right)$$ | $S$ indsættes. |
| $$=\sum\_{i=1}^{n}\frac{∂}{∂a}\left(\left(y\_{i}-a·x\_{i}-b\right)^{2}\right)$$ | Reglen om ledvis differentiation bruges. |
| $$=\sum\_{i=1}^{n}-x\_{i}·2·\left(y\_{i}-a·x\_{i}-b\right)$$ | Kædereglen bruges. |
| $$=\sum\_{i=1}^{n}-2x\_{i}y\_{i}+2ax\_{i}^{2}+2bx\_{i}$$ | Parentesen ophæves. |

Derefter findes de dobbeltafledede:

$$\frac{∂^{2}S}{∂a^{2}}=\frac{∂}{∂a}\left(\sum\_{i=1}^{n}-2x\_{i}y\_{i}+2x\_{i}^{2}·a+2x\_{i}·b\right)=\sum\_{i=1}^{n}\frac{∂}{∂a}\left(-2x\_{i}y\_{i}+2x\_{i}^{2}·a+2x\_{i}·b\right)=\sum\_{i=1}^{n}2x\_{i}^{2}$$

$$\frac{∂^{2}S}{∂b^{2}}=\frac{∂}{∂b}\left(\sum\_{i=1}^{n}-2y\_{i}+2x\_{i}·a+2b\right)=\sum\_{i=1}^{n}\frac{∂}{∂b}\left(-2y\_{i}+2x\_{i}·a+2b\right)=\sum\_{i=1}^{n}2=2n$$

For at finde den blandede afledede i en form, hvor det er muligt at komme videre, er man nødt til at indsætte at $b=\overbar{y}-a·\overbar{x}$ i $S$ og derefter differentiere først mht. $a$ og så mht. $b$.

Det bliver for meget at gøre i detaljer her, men pointen er at man faktisk eliminerer $b$ når man indsætter. Når man så senere differentiere mht. $b$, indeholder udtrykket ikke $b$, og derfor giver den blandede andenordens afledede 0:

$$\frac{∂^{2}S}{∂a∂b}=0$$

Nu kan arten bestemmes:

$$\frac{∂^{2}S}{∂a^{2}}·\frac{∂^{2}S}{∂b^{2}}-\left(\frac{∂^{2}S}{∂a∂b}\right)^{2}=\sum\_{i=1}^{n}2x\_{i}^{2}·2n-0^{2}$$

$\sum\_{i=1}^{n}2x\_{i}^{2}$ er positiv da $x\_{i}^{2}$ er et kvadrat og dermed positiv, og en sum af positive led er positiv. Og $2n$ er også positiv da $n$ er positiv. Dermed er ovenstående udtryk positivt.

Desuden er de dobbeltafledede positive, så ethvert stationært punkt for $S$ er et minimumspunkt.

For fuldstændighedens skyld får I også udledningen af formlen for $a:$

# Sætning

Givet et datasæt med n punkter $\left(x\_{1},y\_{1}\right), …, \left(x\_{n},y\_{n}\right)$. Hældningen $a$ i den rette linje $y=ax+b$, der bedst beskriver datasættet kan beregnes ved formlen

$$a=\frac{\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(\overbar{y}-y\_{i}\right)}{\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2}}$$

hvor $\overbar{x}$ er gennemsnittet af $x$-værdierne og $\overbar{y}$ er gennemsnittet af $y$-værdierne.

# Bevis:

Vi skal nu løse ligningen $\frac{∂S}{∂a}=0$.

Fra ovenstående bevis har vi at $b=\overbar{y}-a·\overbar{x}$. Det indsætter jeg i $S$:

$$S=\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-a·x\_{i}-b\right)^{2}=\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-a·x\_{i}-\left(\overbar{y}-a·\overbar{x}\right)\right)^{2}=\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-a·x\_{i}-\overbar{y}+a·\overbar{x}\right)^{2}$$

$$=\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-\overbar{y}+a·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)\right)^{2}$$

Derefter differentierer vi mht. $a$. Igen bruges reglen for ledvis differentiation og kædereglen.

$$\frac{∂S}{∂a}=\frac{∂}{∂a}\left(\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-\overbar{y}+a·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)\right)^{2}\right)$$

$$= \sum\_{i=1}^{n}\frac{∂}{∂a}\left(\left(y\_{i}-\overbar{y}+a·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)\right)^{2}\right)$$

$$=\sum\_{i=1}^{n}(\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·2·(y\_{i}-\overbar{y}+a·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right))) $$

Nu sættes $\frac{∂S}{∂a}=0$ og ligningen løses ved at $a$ isoleres:

$$\sum\_{i=1}^{n}(\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·2·(y\_{i}-\overbar{y}+a·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)))=0$$

$$\sum\_{i=1}^{n}(2·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)+2·a·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)\left(\overbar{x}-x\_{i}\right))=0$$

$$\sum\_{i=1}^{n}(2·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)+2·a·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2})=0$$

$$\sum\_{i=1}^{n}\left(2·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)+2·a·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2}\right)=0$$

$$\sum\_{i=1}^{n}2·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)+\sum\_{i=1}^{n}2·a·\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2}=0$$

$$2·\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)+2a·\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2}=0$$

$$\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)+a·\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2}=0$$

$$a·\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2}=-\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)$$

$$a·\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2}=\sum\_{i=1}^{n}-\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)$$

$$a·\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2}=\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(\overbar{y}-y\_{i}\right)$$

$$a=\frac{\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)·\left(\overbar{y}-y\_{i}\right)}{\sum\_{i=1}^{n}\left(\overbar{x}-x\_{i}\right)^{2}}$$

Dermed er det ønskede vist.

I forhold til om det er et minimum, så har vi allerede argumenteret for det ovenfor. Læg mærke til at vi i dette bevis kommer frem til et udtryk for $\frac{∂S}{∂a}$, som ikke indeholder $b$. Derfor kan vi konkludere at den blandede andenordens afledede er 0.

I øvrigt er formlen for forklaringsgraden $r^{2}$:

$$r^{2}=1-\frac{SS\_{res}}{SS\_{total}}=1-\frac{\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-\left(ax\_{i}-b\right)\right)^{2}}{\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)^{2}}=1-\frac{\sum\_{i=1}^{n}\left(r\_{i}\right)^{2}}{\sum\_{i=1}^{n}\left(y\_{i}-\overbar{y}\right)^{2}} $$

Summen $SS\_{res}=\sum\_{i=1}^{n}\left(r\_{i}\right)^{2}$ er den, vi har kaldt $S$ i beviserne ovenfor. Når den er minimeret, vil brøken også blive minimeret, og derfor vil $r^{2}$ være tættest muligt på 1.