Berechnung der Kandidaten für Extremwerte durch Auswerten der notwendigen Bedingungen:

Die partiellen Ableitungen dieser Funktion

$$L_{x_i} \qquad (i=1,\dots,n)$$

$$L_{\lambda_j} \qquad (j=1,\dots,k)$$

also insgesamt $n+k$ Stück, erfüllen die Gleichungen $L_{x_i}(x,\lambda)=0$ und $L_{\lambda_j}(x,\lambda)=0$

Man hat also ein Gleichungssystem mit $n+k$ Unbekannten, dessen Lösungen

$$x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$$

Kandidaten für Minima oder Maxima der Funktion unter den k Nebenbedingungen darstellen können.

$$L_{x_i}(x,\lambda) = f_{x_i}(x) + \sum_{j=1}^{k} \lambda_j \, g_{jx_i}(x) = 0 \quad i=1,\dots,n$$

$$L_{\lambda_j}(x,\lambda) = g_j(x) = 0 \quad j=1,\dots,k$$

Bem.: die Ableitungen nach λ_j $(j=1,\dots,k)$ liefern die n Nebenbedingungen.

In der Regel geht man davon aus, dass der Wert, den man über die Auswertung der notwendigen Bedingungen erhält, auch einen Extremwert liefert.

Im Folgenden sollen jedoch einmal die hinreichenden Bedingungen für die Existenz von Minima und Maxima für eine Funktion mit n Variablen und einer Nebenbedingung formuliert werden.

Geg: $f: D \to \mathbb{R}$, $D \subseteq \mathbb{R}^n$ Funktion mit n unabhängigen Variablen

f besitze stetige partielle Ableitungen erster und zweiter Ordnung.

$g(x_1, \ldots x_n) = 0$ Nebenbedingung

$x = (x_1, \ldots \ldots x_n)$

$L(x, \lambda) = f(x) + \lambda g(x)$ Lagrange-Funktion

$x^* = (x_1^*, \ldots \ldots x_n^*)$

Es gelte $L_{x_1}(x^*) = L_{x_2}(x^*) = \ldots = L_{x_n}(x^*) = 0$

x^* ist also ein Kandidat für einen Extremwert.

1) x^* ist lokales Maximum, falls

$G_2 > 0$, $G_3 < 0$, …. $G_n \begin{cases} > 0 & n \text{ gerade} \\ < 0 & n \text{ ungerade} \end{cases}$

2) x^* ist lokales Minimum, falls

$G_2 < 0$, $G_3 < 0$, …. $G_n < 0$ für alle n

$$\text{mit } G_n = \begin{vmatrix} L_{x_1x_1} & L_{x_1x_2} & \cdots & L_{x_1x_n} & \overset{L_{\lambda x_1}}{g_{x_1}} \\ L_{x_2x_1} & L_{x_2x_2} & \cdots & & \vdots \\ \vdots & & & & \vdots \\ L_{x_nx_1} & & & & \overset{L_{\lambda x_n}}{g_{x_n}} \\ \underset{L_{\lambda x_1}}{g_{x_1}} & \cdots & & & 0 \end{vmatrix}$$

$\vdots$

$$G_2 = \begin{vmatrix} L_{x_1x_1} & L_{x_1x_2} & g_{x_1} \\ L_{x_2x_1} & L_{x_2x_2} & g_{x_2} \\ g_{x_1} & g_{x_2} & 0 \end{vmatrix}$$

$G_2, G_3, \dots G_n$ Determinanten der 2. partiellen Ableitungen. (vgl. Hauptunterdeterminanten H_i (41))
Vergleichen Sie diese Determinanten mit den Hauptunterdeterminanten auf Blatt (42) als Kriterium für die Entscheidung zwischen Minimum bzw. Maximum.

Beispiel:

$f(x,y,z) = \ln(2x) + 2\ln y + 4\ln z$

$g(x,y,z) = x+y+2z-7 = 0$

Aufstellen der Lagrange-Funktion:

$L(x,y,z,\lambda) = \ln(2x) + 2\ln y + 4\ln z + \lambda(x+y+2z-7)$

Notwendige Bedingungen auswerten:

I: $L_x(x,y,z,\lambda) = \frac{1}{2x}\cdot 2 + \lambda = 0 \Leftrightarrow \frac{1}{x}+\lambda = 0$

II: $L_y(x,y,z,\lambda) = \frac{2}{y} + \lambda = 0$

III: $L_z(x,y,z,\lambda) = \frac{4}{z} + 2\lambda = 0$

IV: $L_\lambda(x,y,z,\lambda) = x+y+2z-7 = 0$

$$\left.\begin{array}{l}\text{Aus I}: \lambda = -\frac{1}{x} \\ \text{Aus II}: \lambda = -\frac{2}{y}\end{array}\right\} \Rightarrow -\frac{1}{x} = -\frac{2}{y} \Leftrightarrow -y = -2x \Leftrightarrow \underset{*}{y=2x}$$

Aus III: $4+2\lambda z = 0 \Leftrightarrow 2+\lambda z = 0 \Leftrightarrow \lambda z = -2 \Leftrightarrow z = -\frac{2}{\lambda}$

mit $\lambda = -\frac{1}{x}$: $z = -\frac{2}{-\frac{1}{x}} = 2x$, also $\underset{**}{z=2x}$

$*$ und $**$ in IV: $x+2x+4x-7=0$

$\Leftrightarrow 7x = 7$

$\Leftrightarrow x = 1$

Damit: $x=1$, $y=2$, $z=2$ Kandidat für Extremwert

Berechnung der partiellen Ableitungen zweiter Ordnung, um über die Art des Extremwertes zu entscheiden.

$L_{xx} = -x^{-2}$ $L_{xy} = 0$ $L_{xz} = 0$ $g_x = 1$

$L_{yx} = 0$ $L_{yy} = -2y^{-2}$ $L_{yz} = 0$ $g_y = 1$

$L_{zx} = 0$ $L_{zy} = 0$ $L_{zz} = -4z^{-2}$ $g_z = 2$

Man setzt in diese partiellen Ableitungen zweiter Ordnung $x = 1$, $y = 2$ und $z = 2$ ein:

$$G_3 = \begin{vmatrix} -x^{-2} & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -2y^{-2} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -4z^{-2} & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 0 \end{vmatrix} \qquad G_3 = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 0 \end{vmatrix}$$

$$G_2 = \begin{vmatrix} -x^{-2} & 0 & 1 \\ 0 & -2y^{-2} & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix} \qquad G_2 = \begin{vmatrix} -1 & 0 & 1 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{vmatrix}$$

Berechnung von G_3 (Entwicklung nach der 1. Zeile):

$$-1 \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 2 \\ 1 & 2 & 0 \end{vmatrix} - 1 \begin{vmatrix} 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 2 \end{vmatrix}$$

⇓ Entw. 1. Zeile ⇓ Entw. 1. Spalte

$$= -1\left(-\frac{1}{2}\begin{vmatrix} -1 & 2 \\ 2 & 0 \end{vmatrix} + 1 \cdot \begin{vmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 2 \end{vmatrix}\right) - 1 \cdot 1 \begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}$$

$$= -1\left(-\frac{1}{2}\cdot(-4)+1\right) - \left(\frac{1}{2}\right)$$

$$= -3 - \frac{1}{2} = -\frac{7}{2} \qquad G_3 < 0$$

Berechnung von G_2 (Entwicklung nach 1. Zeile):

$$-1\begin{vmatrix} -\frac{1}{2} & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} + 1\begin{vmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = -1\cdot(-1) + 1\cdot\frac{1}{2}$$

$$= 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

$$G_2 > 0$$

Damit gilt $G_2 > 0$, $G_3 < 0$ und es folgt (Blatt 57):

$x = 1, y = 2, z = 2$ sind die Werte für ein lokales Maximum.

Als Einführung in das Thema: Extremwerte mit Nebenbedingungen, wurde auf Blatt 46, 47 eine Aufgabe formuliert, die eine Zielfunktion mit drei unabhängigen Variablen und zwei gleichzeitig geltenden Nebenbedingungen beschrieben hat. Diese soll im Folgenden gelöst werden. Der Nachweis, ob es sich um ein Minimum oder ein Maximum handelt, wird hier nicht gemacht (und kann auch mit den hinreichend formulierten Kriterien nicht erbracht werden.

Nochmals Formulierung des Problems:

Zielfunktion $f(x,y,z) = \sqrt{x^2+y^2}$ (Abstandsfunktion)

Nebenbedingungen: $g_1(x,y,z) = x^2+y^2+z^2-1 = 0$

$g_2(x,y,z) = x+y+z = 0$

Aufstellen der Lagrange-Funktion:

$$L(x,y,z,\lambda_1,\lambda_2) = f(x,y,z) + \lambda_1 \cdot g_1 + \lambda_2 g_2$$
$$= \sqrt{x^2+y^2} + \lambda_1(x^2+y^2+z^2-1) + \lambda_2(x+y+z)$$

Auswerten der notwendigen Bedingungen:

$$L_x = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} + 2\lambda_1 x + \lambda_2 = 0 \quad \text{I}$$
$$L_y = \frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} + 2\lambda_1 y + \lambda_2 = 0 \quad \text{II}$$
$$L_z = 2\lambda_1 z + \lambda_2 = 0 \quad \text{III}$$
$$L_{\lambda_1} = x^2+y^2+z^2-1 = 0 \quad \text{IV}$$
$$L_{\lambda_2} = x+y+z = 0 \quad \text{V}$$

Die Lösung dieses Gleichungssystems ist nicht ganz einfach.

Aus Gl. I : $\lambda_2 = -\left(\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}} + 2\lambda_1 x\right)$

Aus Gl. II : $\lambda_2 = -\left(\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}} + 2\lambda_1 y\right)$

Heraus kann man folgern, dass entweder $x=y$ oder $\lambda_2 = 0$ gilt

Fall: $x = y$ *   * in V: $2x + z = 0 \Rightarrow \underset{**}{z = -2x}$

** in IV $x^2 + x^2 + 4x^2 = 1 \Leftrightarrow 6x^2 = 1 \Leftrightarrow x^2 = \frac{1}{6}$

$\Rightarrow x_{1,2} = \pm\sqrt{\frac{1}{6}} = \pm\frac{1}{6}\sqrt{6}$

Die ersten Kandidaten:

P_1 : $x_1 = +\frac{1}{6}\sqrt{6}$ $y_1 = +\frac{1}{6}\sqrt{6}$, $z_1 = -\frac{1}{3}\sqrt{6}$

P_2 : $x_2 = -\frac{1}{6}\sqrt{6}$ $y_2 = -\frac{1}{6}\sqrt{6}$ $z_2 = \frac{1}{3}\sqrt{6}$

Fall: $\lambda_2 = 0$

Aus Gl. $\underline{III}$: $2\lambda_1 \cdot z = 0$

$\Rightarrow z = 0$ oder $\lambda_1 = 0$

$z = 0 \underset{Gl. V}{\Rightarrow} \underset{*}{x = -y}$

$*$ in $\underline{IV}$: $x^2 + x^2 + 0^2 = 1 \Leftrightarrow 2x^2 = 1$

$\Rightarrow x_{3,4} = \pm\sqrt{\frac{1}{2}} = \pm \frac{1}{2}\sqrt{2}$

$x_3 = \frac{1}{2}\sqrt{2} \underset{*}{\Rightarrow} y_3 = -\frac{1}{2}\sqrt{2}$

$x_4 = -\frac{1}{2}\sqrt{2} \underset{*}{\Rightarrow} y_4 = \frac{1}{2}\sqrt{2}$

Weitere Kandidaten

P_3: $x_3 = \frac{1}{2}\sqrt{2}$, $y_3 = -\frac{1}{2}\sqrt{2}$, $z_3 = 0$

P_4: $x_4 = -\frac{1}{2}\sqrt{2}$, $y_4 = \frac{1}{2}\sqrt{2}$, $z_4 = 0$

Ist $\lambda_1 = 0$, so liefert Gl. $\underline{I}$ und $\underline{II}$: $x = y = 0$ und mit Gl. $\underline{V}$ $z = 0$, das ist ein Widerspruch zu Gl. $\underline{IV}$, d.h. dieser Fall tritt nicht ein.

λ_1 und λ_2 könnten nun auch berechnet werden, was aber bei dieser Aufgabenstellung nicht notwendig ist. Auf die Interpretation des Lagrange-Multiplikators gehen wir später noch kurz ein.

Für die vier berechneten Kandidaten ergeben sich folgende Abstände:

$$f(P_1) = \sqrt{\frac{1}{36}\cdot 6 + \frac{1}{36}\cdot 6} = \sqrt{\frac{2}{6}} = \sqrt{\frac{1}{3}} = \frac{1}{3}\sqrt{3}$$

$$f(P_2) = \sqrt{\frac{1}{36}\cdot 6 + \frac{1}{36}\cdot 6} = \sqrt{\frac{2}{6}} = \sqrt{\frac{1}{3}} = \frac{1}{3}\sqrt{3}$$

$$f(P_3) = \sqrt{\frac{1}{4}\cdot 2 + \frac{1}{4}\cdot 2} = \sqrt{1} = 1$$

$$f(P_4) = \sqrt{\frac{1}{4}\cdot 2 + \frac{1}{4}\cdot 2} = \sqrt{1} = 1$$

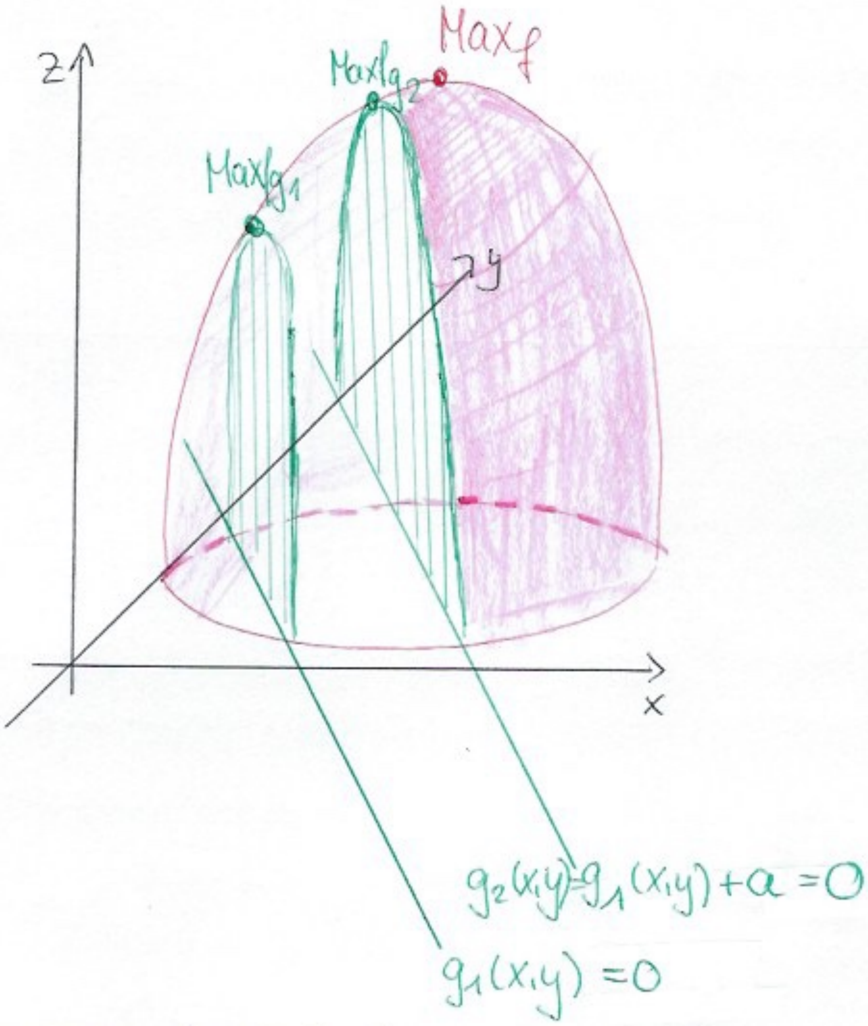
Da die Punkte sowohl auf der Kugel als auch auf der Ebene liegen, liegen sie auf der Schnittlinie, einem Kreis (s. Blatt 47), P_1 und P_2 haben den kürzesten Abstand, P_3 und P_4 den größten Abstand.

Interpretation des Lagrange-Multiplikators

Der Lagrange-Multiplikator λ ist die marginale (geringfügige) Änderungsrate der Funktion f relativ zur Nebenbedingung g.

Marginal bedeutet die Änderung des Funktionsverhaltens bei sehr kleinen Veränderungen der Nebenbedingung g.
Häufig bezeichnet man solche Betrachtungen zum Grenzverhalten als Grenzanalyse oder Marginalanalyse.
Geht man davon aus, dass in der Nebenbedingung eine Konstante c enthalten ist, also $g(x,y)-c=0$ die eigentliche Nebenbedingung ist. Ebenso wie der Differentialquotient einer Funktion als Änderungsrate der Funktion bei Änderung des Arguments aufgefaßt werden kann, kann λ interpretiert werden als infinitesimale Änderungsrate der Lagrangefunktion bei Variation der Nebenbedingung.
Die Lageänderung der Nebenbedingung, z.B. durch Parallelverschiebung, falls es sich um "lineare" Nebenbedingungen (= Geraden) handelt, verändert die Lage des Extremwertes der Zielfunktion. Der Wert von λ gibt dabei an, um wieviel sich der Zielfunktionswert näherungsweise ändert, wenn das Absolutglied der Nebenbedingung um eine Einheit variiert.

Skizze:



Die Änderung der Nebenbedingung von g_1 nach g_2 bewirkt eine Änderung des Maximums von Max f_{g_1} nach Max f_{g_2}.

$$L(x,y,\lambda) = f(x,y) + \lambda\, g_1(x,y)$$

Mit $g_2(x,y) = g_1(x,y) + a \quad (a>0)$

ist $L(x,y,\lambda) = f(x,y) + \lambda\,(g_1(x,y) + a)$

und $\boxed{\dfrac{dL}{da} = \lambda}$ Die infinitesimale Änderung des Absolutgliedes der Nebenbedingung hat die λ-fache Wirkung auf die Zielfunktion.

Anwendung der Differentialrechnung für Funktionen mit mehreren unabhängigen Variablen:

Ausgleichsrechnung

Im Rahmen dieser Vorlesung kann nur ein kurzer Überblick über die Vorgehensweise gegeben werden.
Grob gesprochen hat die Ausgleichsrechnung das Ziel, Messungen, Messergebnisse und empirisch gewonnene Daten auf ihre Genauigkeit hin zu überprüfen, einen einzigen Wert, den Bestwert daraus zu berechnen und ein Maß für seine Güte anzugeben.
Von großer praktischer Bedeutung ist dabei häufig die Anpassung durch eine Gerade, wenn ein linearer Zusammenhang der Werte vermutet wird. Man bezeichnet diese Annäherung durch eine Gerade als lineare Regression. Die Gerade heißt dann Regressionsgerade. Als Anpassungsprinzip wird die Methode der kleinsten Quadrate verwendet, eine von C.F. Gauß entwickelte Methode, die nicht nur für einen vermuteten linearen Zusammenhang (der Berechnung einer Regressionsgeraden), sondern auch für andere vermutete Zusammenhänge (parabelförmig, exponential, etc.) verwendet werden kann.

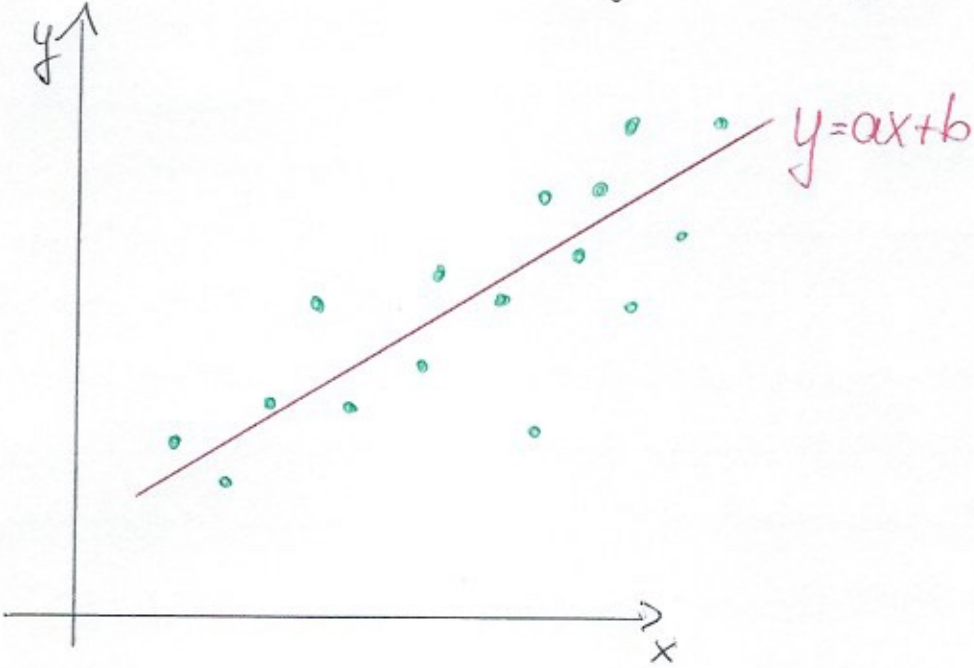
Lineare Anpassung

Zwischen zwei Größen x und y bestehe ein funktionaler Zusammenhang. Es sei experimentell nachgewiesen, dass die Größe x auf die Größe y einen Einfluß ausübt. Die Beobachtungswerte werden registriert und in Form einer Messwerttabelle dargestellt.
Lineare Anpassung bedeutet, diese vermutete

Abhängigkeit der Zielgröße y vom Merkmal x wird in Form einer linearen Funktion, einer Geradengleichung ausgedrückt. Diese Gerade soll sich optimal den Messwerten anpassen.

Messwerte können auch in Form von Punktepaaren in einem kartesischen Koordinatensystem dargestellt werden.

Skizze:



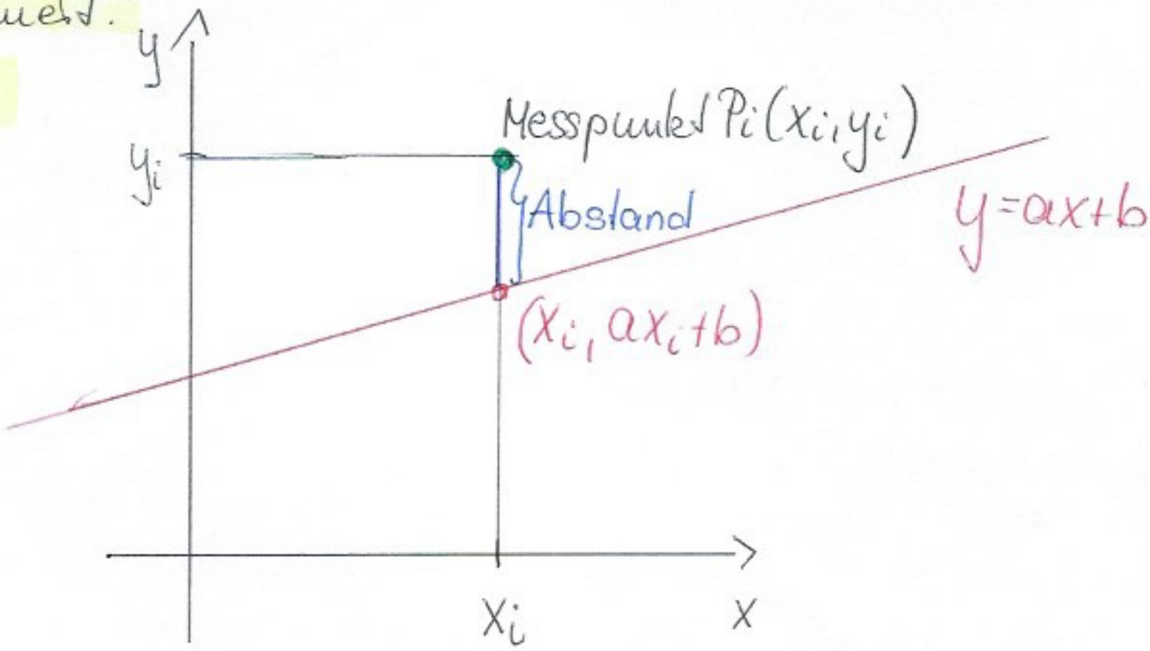
Steht die Vermutung fest, dass der Zusammenhang zwischen den Größen x und y linear ist, so könnte man nun "frei nach Augenmaß" eine Gerade zwischen die Messpunkte legen, von der man der Meinung ist, dass sie dem wahren linearen Zusammenhang am nächsten kommt. Das ist natürlich eine subjektive Entscheidung. Eine andere Person würde vielleicht eine ganz andere Gerade einzeichnen.

Die Methode der kleinsten Quadrate liefert ein Verfahren, die Parameter a und b der Geraden $y = ax + b$ so zu bestimmen, dass die Gerade möglichst wenig von den Messpunkten abweicht.

Die Methode der kleinsten Quadrate nach C. F. Gauß

Gauß schlug vor, als Maß für die Abweichung zwischen Meßpunkt und dem zugehörigen Punkt auf der Ausgleichskurve (hier Ausgleichsgerade) den vertikalen Abstand zu nehmen und diesen, damit Über- und Unterschreitungen sich nicht gegenseitig aufheben, diesen noch zu quadrieren, also die Abstandsquadrate den Berechnungen zugrundezulegen. Diese Abstandsquadrate werden aufsummiert.

Skizze:



Der Abstand zwischen dem Messpunkt P_i und dem Punkt auf der Geraden (Argument x_i) beträgt:

$$\left(y_i - (ax_i + b)\right)$$

Die Summe der Abstandsquadrate bei n Messwerten lautet nun:

$$Q(a,b) = \sum_{i=1}^{n} \left[y_i - (ax_i + b)\right]^2$$

Frage:

Wo sehen Sie hier einen Zusammenhang zum Thema: Funktionen mit mehreren unabhängigen Variablen?

Antwort:

$Q(a,b)$ ist eine Funktion mit den beiden unabhängigen Variablen a und b, a und b sind die Koeffizienten der Näherungsgeraden $y = ax+b$.

Ziel: Es wird für die Funktion der Summe der Abstandsquadrate ein Extremwert berechnet und dieser muss ein Minimum sein. Dieses so erhaltene a und b sind die Koeffizienten der Geraden, die die Messpunkte am besten annähert (die Summe der Abstandsquadrate ist minimal).

Es muss zunächst ein Kandidat für einen Extremwert für die Funktion

$$Q(a,b) = \sum_{i=1}^{n} [y_i - (ax_i+b)]^2$$

$$= \sum_{i=1}^{n} y_i^2 - 2(ax_i+b)\cdot y_i + (ax_i+b)^2$$

(x_i, y_i) $i = 1, \dots, n$ sind die Messdaten.

a, b sind die unabhängigen Variablen

1) Auswertung der notwendigen Bedingungen

$Q_a(a,b) = 0 \qquad Q_b(a,b) = 0$

$$\text{I} \quad Q_a(a,b) = -\sum_{i=1}^{n} 2x_i\,(y_i - (ax_i + b))$$
$$= 2\sum_{i=1}^{n}(-x_iy_i + ax_i^2 + bx_i) = 0$$

$$\text{II} \quad Q_b(a,b) = -\sum_{i=1}^{n} 2\,(y_i - (ax_i + b))$$
$$= 2\sum_{i=1}^{n}(-y_i + ax_i + b) = 0$$

Auflösen und Umformen von I und II ergibt die sogenannten Normalengleichungen:

Aus I: $-\sum_{i=1}^{n} x_iy_i + \sum_{i=1}^{n}(ax_i^2 + bx_i) = 0$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n}(ax_i^2 + bx_i) = \sum_{i=1}^{n} x_iy_i$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n} x_iy_i = a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + b\sum_{i=1}^{n} x_i$$

Aus II: $\sum_{i=1}^{n}(-y_i + ax_i + b) = 0$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n} y_i = \sum_{i=1}^{n}(ax_i + b)$$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n} y_i = a\sum_{i=1}^{n} x_i + n \cdot b \quad (*)$$

Bem: $\sum_{i=1}^{n} b = n \cdot b$

Es ist $\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i$ das arithmetische Mittel der Messwerte x_i

$\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$ das arithmetische Mittel der Messwerte y_i

(*) (Blatt 69): $\sum_{i=1}^{n} y_i = a\sum_{i=1}^{n} x_i + n \cdot b$

Division auf beiden Seiten durch n:

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i = \frac{1}{n}\left(a\sum_{i=1}^{n} x_i + n \cdot b\right)$$

$$\Leftrightarrow \quad \bar{y} = a \cdot \bar{x} + b$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{b = \bar{y} - a \cdot \bar{x}} \quad (**)$$

Man hat einen ersten Zusammenhang zwischen den Koeffizienten a und b der Regressionsgeraden und den arithmetischen Mittelwerten der Messwerte erhalten.

(**) in I: $\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i = a\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + (\bar{y} - a\bar{x}) \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i$

$$\Leftrightarrow \sum_{i=1}^{n} x_i y_i - \bar{y}\sum_{i=1}^{n} x_i = a\left[\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \bar{x}\sum_{i=1}^{n} x_i\right]$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{a = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i - n \cdot \bar{x} \cdot \bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n \cdot \bar{x}^2}}$$

Bei der letzten Umformung wurde aus $\bar{y}\sum_{i=1}^{n} x_i$ durch "Erweiterung mit n": $\bar{y} \cdot n \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i = \bar{y} \cdot n \cdot \bar{x}$

und aus $\bar{x}\sum_{i=1}^{n} x_i$: $\bar{x} \cdot n \cdot \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i = \bar{x}^2 \cdot n$

Damit werden die "Formeln" zur Berechnung von a und b "einfacher"!

Nun muss gezeigt werden, dass es sich bei diesem Ergebnis auch tatsächlich um ein Minimum handelt. Es müssen die hinreichenden Bedingungen geprüft werden:

$$Q_{aa} = 2\sum_{i=1}^{n} x_i^2 > 0$$

$$Q_{bb} = \sum_{i=1}^{n} 2 = 2n > 0$$

$$Q_{ab} = 2\sum_{i=1}^{n} x_i$$

Bleibt nur noch zu zeigen: $\Delta > 0$

(Die Hesse'sche Determinante ist > 0)

$$\Delta = Q_{aa} \cdot Q_{bb} - (Q_{ab})^2$$

$$\Delta = \left(2\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) \cdot 2n - \left(2 \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2$$

$$= 4n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 4\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2 = 4\left[\left(n \cdot \sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2\right]$$

Setze $n = \frac{2n}{2}$

$$= 4\left[\left(\frac{2n}{2}\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2\right]$$

da $\frac{1}{2}$ ausgeklammert

$2n = n + n$

$$= 4\left[\frac{1}{2}\left(n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 + n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2\right)\right]$$

$$= 4\left[\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n}\left(n x_i^2 + n x_i^2 - \sum_{j=1}^{n} 2 x_i x_j\right)\right)\right]$$

$$= 4\left[\frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_i^2 + \sum_{j=1}^{n} x_j^2 - \sum_{j=1}^{n} 2 x_i x_j\right)\right]$$

Bem.:

$$\left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{i=1}^{n} x_i$$

vor die Klammer

Summationsvariable umbenannt

Bin. Formel

$$= 4\left[\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(\underbrace{x_i - x_j}_{>0})^2\right] \Rightarrow \Delta > 0$$

Mit $\Delta > 0$ und $Q_{aa} > 0$

handelt es sich in jedem Fall um ein Minimum.

Zusammenfassung:

Gegeben: n (Mess)-Wertepaare (x_i, y_i) $i = 1, \dots, n$

Die Steigung der Regressionsgeraden $y = ax + b$

berechnet sich aus folgender Formel:

$$a = \frac{\sum_{i=1}^{n} x_i \cdot y_i - n \cdot \bar{x} \cdot \bar{y}}{\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n \cdot \bar{x}^2} \qquad \bar{x}, \bar{y} \text{ arithm. Mittel}$$

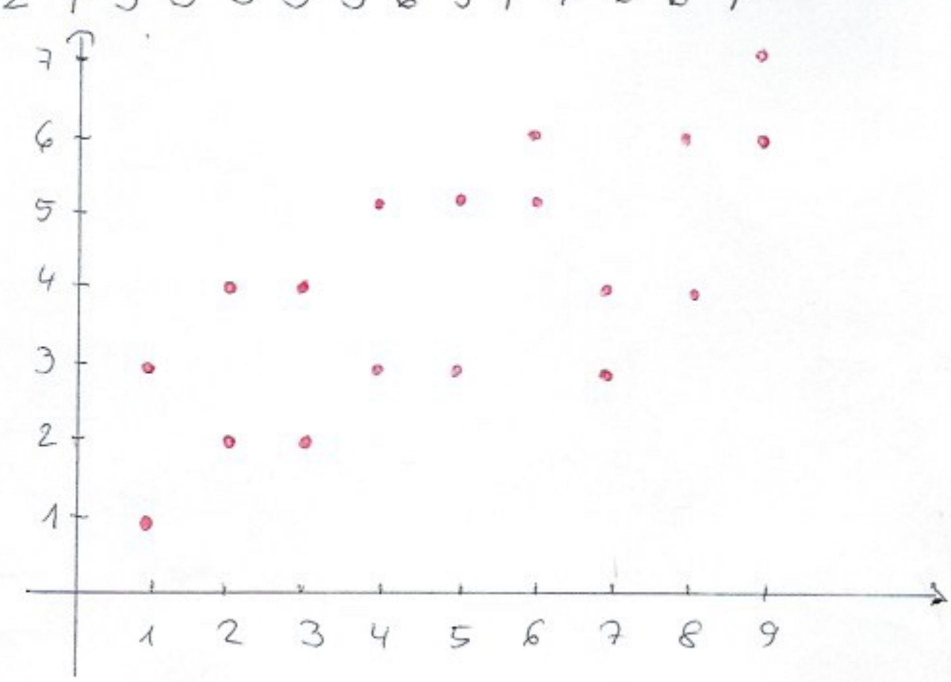
$$b = \bar{y} - a\bar{x}$$

Beispiel:

Folgende Werte wurden gemessen:

x_i	1	1	2	2	3	3	4	4	5	5	6	6	7	7	8	8	9	9
y_i	1	3	2	4	2	4	3	5	3	5	5	6	3	4	4	6	6	7

$n = 18$



Versuchen Sie, mit Augenmaß eine Gerade zwischen die Punkte zu legen, die die Punkte am besten annähert.

Man berechnet die Größen, die man für die Formeln von a und b benötigt:

$\sum_{i=1}^{18} x_i y_i = 418$ $\bar{x} = 5$ $\bar{y} = 4.05$ $18 \cdot 5 \cdot 4.05 = 364.5$

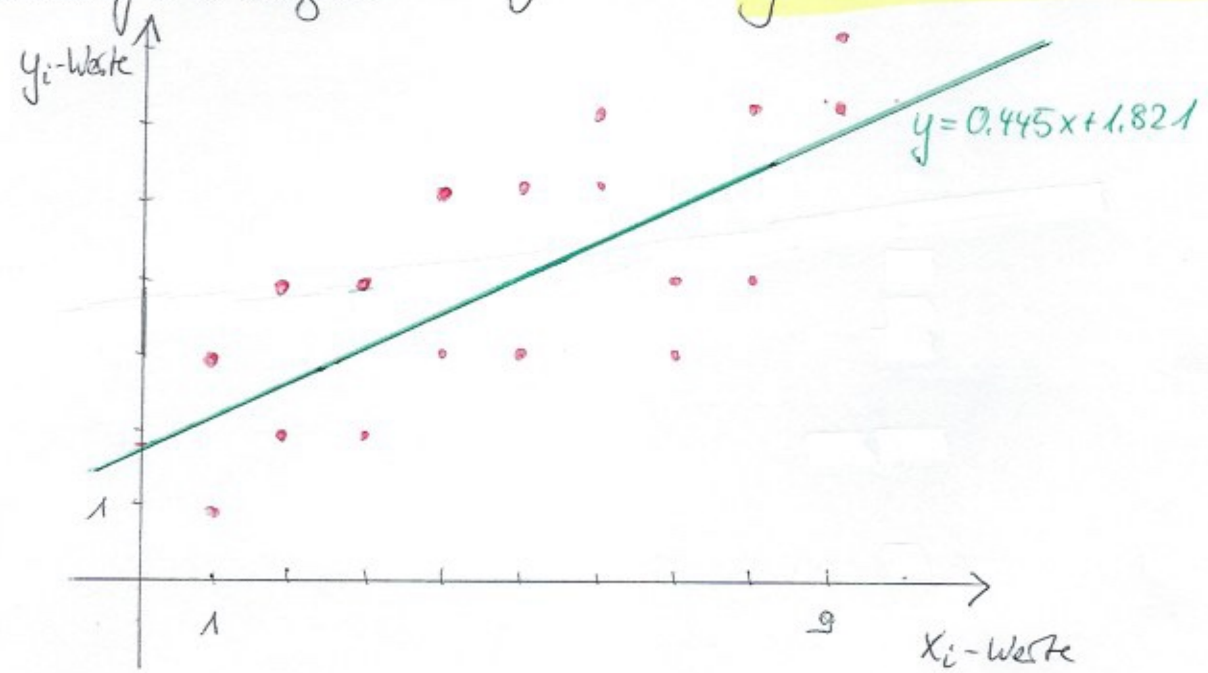
$n \cdot \bar{x} \cdot \bar{y} = 364.5$

$\sum_{i=1}^{18} x_i^2 = 570$ $n \cdot \bar{x}^2 = 18 \cdot 25 = 450$

$$a = \frac{418 - 364.5}{570 - 450} = \frac{53.5}{120} = 0.445$$

$$b = 4.05 - 2.229 = 1{,}821$$

Gleichung der Regressionsgeraden: $y = 0.445x + 1{,}821$



Die meisten Taschenrechner können die Parameter der Regressionsgeraden berechnen.

Anpassung mit Hilfe von Ausgleichskurven

Die Regressionsgerade ist nur ein Fall einer Anpassung. Mit der Methode der kleinsten Quadrate kann man ebenso Ausgleichskurven berechnen, wenn der vermutete Zusammenhang nicht linear, sondern ein anderer ist. Nach Art der Messwerte und Art des Versuchs, der zugrunde liegt, entscheidet man über einen vermuteten Zusammenhang. Eine Gerade ist nicht immer geeignet.

Lösungsansätze für Ausgleichskurven:

		Zu bestimmen:
lineare Funktion	: $y = ax + b$	a, b
quadratische Funktion	: $y = ax^2 + bx + c$	a, b, c
Potenzfunktion	: $y = ax^b$	a, b
Exponentialfunktion	: $y = a \cdot e^{bx}$	a, b

Es müssen immer die Parameter a und b, im Fall der quadratischen Funktion a, b und c berechnet werden.

Frage: Wie lautet der Ansatz für die Bestimmung von a und b, wenn ein exponentieller Zusammenhang vermutet wird?

Antwort: $Q(a,b) = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - a \cdot e^{b x_i} \right)^2$

$$\begin{aligned} Q_a &= 0 \\ Q_b &= 0 \end{aligned}$$ notwendige Bedingungen auswerten

Der Ansatz für die anderen Ausgleichskurven ist entsprechend.