

# MINDSTE KVADRATERS METODE

## Afsnit 1. Bedste proportionale model

I disse noter vil vi udlede formler til bestemmelse af bedste proportionale model, dvs. bestemme ligningen for den rette linje gennem  $O(0,0)$ , som bedst tilpasser et givet datasæt. Vi vil tillige udlede et udtryk for den såkaldte korrelationskoefficient, samt definere begrebet forklaringsgrad, som vi kender fra praktiske anvendelser af regression.

Vi tænker os givet datapunkterne  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ , hvis førstekoordinater ikke alle er 0. For at bestemme ligningen for den proportionale model  $y = kx$ , der tilpasser datapunkterne bedst, betragter vi kvadratsummen

$$S(k) = \sum_{i=1}^N (y_i - kx_i)^2.$$

Vores opgave er at bestemme  $k$  således, at  $S(k)$  bliver mindst mulig.

Vi ganger først parenteserne ud:

$$(y_i - kx_i)^2 = y_i^2 - 2 y_i kx_i + (kx_i)^2 = k^2 x_i^2 - 2 kx_i y_i + y_i^2.$$

Dernæst deler vi sumudtrykket op i tre summer:

$$S(k) = \sum_{i=1}^N (k^2 x_i^2 - 2 kx_i y_i + y_i^2) = k^2 \sum_{i=1}^N x_i^2 - 2 k \sum_{i=1}^N x_i y_i + \sum_{i=1}^N y_i^2.$$

Der er i statistik tradition for at indføre særlige symboler for en række hyppigt forekommende sumudtryk. Således betegner man summen

$$\sum_{i=1}^N x_i^2$$

med  $SK_x$ , der er en forkortelse for *Sum af Kvadrater på  $x_i$ -erne*.

I tabellen øverst på næste side har vi for overskuelighedens skyld samlet symboler og formler for alle de sumudtryk, der anvendes i disse noter:

Symbol	Formeludtryk	Forklaring af forkortelse og eventuelle bemærkninger
$SK_x$	$\sum_{i=1}^N x_i^2$	Sum af Kvadrater på $x_i$ -er
$SP_{xy}$	$\sum_{i=1}^N x_i y_i$	Sum af Produkter mellem $x_i$ -er og $y_i$ -er
$SK_y$	$\sum_{i=1}^N y_i^2$	Sum af Kvadrater på $y_i$ -er Kaldes også total variation
$SK_{f(x_i)}$	$\sum_{i=1}^N (f(x_i))^2$	Sum af Kvadrater på funktionsværdier $f(x_i)$ Kaldes også forklaret variation
$SRK$	$\sum_{i=1}^N (y_i - kx_i)^2$	Sum af ResidualKvadrater Kaldes også uforklaret variation

Dermed kan  $\mathcal{S}(k)$  udtrykkes som

$$\mathcal{S}(k) = SK_x \cdot k^2 - 2 SP_{xy} \cdot k + SK_y .$$

Da førstekoordinaterne  $x_1, x_2, \dots, x_N$  ikke alle er 0, er kvadratsummen

$$SK_x = \sum_{i=1}^N x_i^2 > 0 .$$

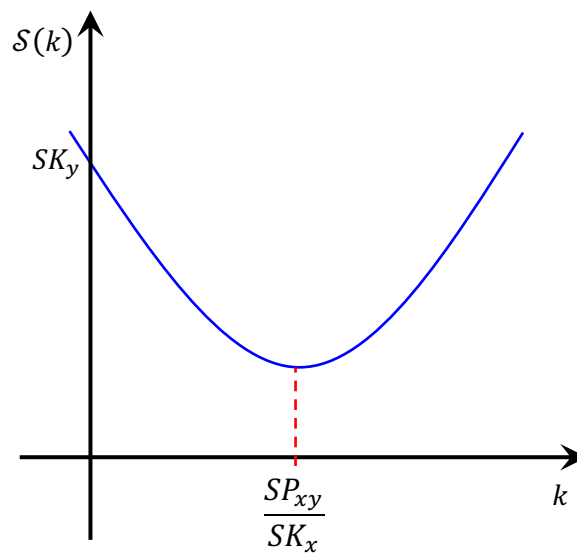
$\mathcal{S}(k)$  er følgelig et andengradspolynomium i  $k$ , hvis graf er en parabel, der vender grenene opad. Det globale minimumssted for  $\mathcal{S}(k)$  er da førstekoordinaten for parablens toppunkt.

Da toppunktet  $T$  for parablen

$$y = Ax^2 + Bx + C$$

har førstekoordinat  $x_T = -\frac{B}{2A}$ , får vi:

$$k = -\frac{-2 SP_{xy}}{2 SK_x} = \frac{SP_{xy}}{SK_x} .$$



Figur 1.1. Toppunktets førstekoordinat for grafen for  $S(k)$ .

Vi har dermed bevist følgende sætning:

- **Sætning 1.2.** Lad punkterne  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$  være givne og antag, at deres førstekoordinater ikke alle er 0. Den proportionale model

$$y = kx ,$$

der tilpasser data bedst, har proportionalitetskonstant

$$k = \frac{SP_{xy}}{SK_x}.$$

I eksempel 1.3 viser vi, hvorledes sætning 1.2 kan anvendes til at bestemme ligningen for den bedste proportionale model i et simpelt taleksempel. I praksis er sætningen naturligvis ikke hensigtsmæssigt at anvende; det er langt lettere at benytte et værktøjsprogram.

- **Eksempel 1.3.** Vi ønsker at bestemme ligningen for den proportionale model  $y = kx$ , der bedst tilpasser datapunkterne i nedenstående tabel:

$i$	$x_i$	$y_i$
1	1,00	1,00
2	2,00	1,00
3	3,00	3,00
4	4,00	3,00

Det er praktisk at tilføje to søjler til tabellen med henholdsvis produkterne  $x_i y_i$  og kvadraterne  $x_i^2$ , samt en række med disse to søjlers sum:

$i$	$x_i$	$y_i$	$x_i y_i$	$x_i^2$
1	1,00	1,00	1,00	1,00
2	2,00	1,00	2,00	4,00
3	3,00	3,00	9,00	9,00
4	4,00	3,00	12,0	16,0
<b>Sum</b>			<b><math>SP_{xy} = 24,0</math></b>	<b><math>SK_x = 30,0</math></b>

Dermed kan vi beregne proportionalitetskonstanten  $k$  til

$$k = \frac{SP_{xy}}{SK_x}$$

$$k = \frac{24,0}{30,0} = 0,800$$

Den søgte proportionalitet er da

$$y = 0,800x .$$

## Afsnit 2. korrelationskoefficienten

Vi vil nu udlede udtryk for den såkaldte korrelationskoefficient for bedste proportionale model. Udledningen giver os mulighed for at opnå en forståelse af betydningen af korrelationskoefficienten  $r$  og dermed give en mere præcis fortolkning af  $r$ .

For at bestemme ligningen for den proportionale model  $y = kx$ , der bedst tilpasser datapunkterne  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ , hvis førstekoordinater ikke alle er ens, betragtede vi i afsnit 2 kvadratsummen

$$S(k) = \sum_{i=1}^N (y_i - kx_i)^2.$$

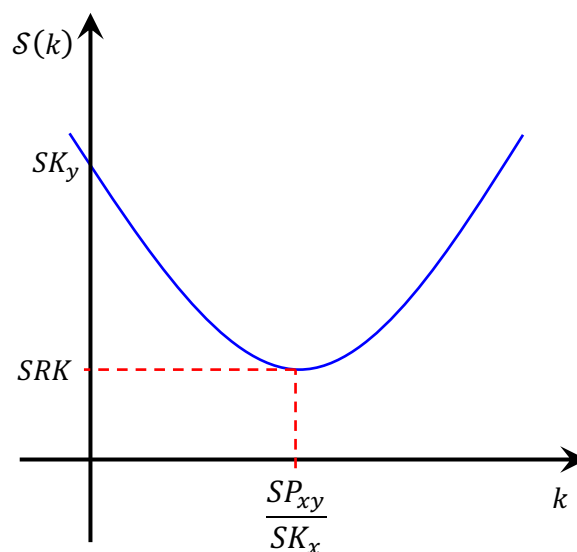
Vi omskrev  $S(k)$  til formen

$$S(k) = SK_x \cdot k^2 - 2 SP_{xy} \cdot k + SK_y$$

og så, at  $S(k)$  er et andengradspolynomium i  $k$ , hvis graf er en parabel, der vender grenene opad. Den værdi af  $k$ , som gør  $S(k)$  mindst mulig, er førstekoordinaten for parablens toppunkt:

$$k = \frac{SP_{xy}}{SK_x}.$$

Den mindste værdi af kvadratsummen  $S(k)$  er da toppunktets andenkoordinat. Denne mindsteværdi betegner vi  $SRK$ , som er en forkortelse for *Sum af ResidualKvadrater*.



Figur 2.1. Toppunktets beliggenhed for grafen for  $S(k)$ .

Da toppunktet  $T$  for parablen

$$y = Ax^2 + Bx + C$$

er givet ved  $T = \left(-\frac{B}{2A}, -\frac{D}{4A}\right)$ , hvor diskriminanten  $D = B^2 - 4AC$ , udregner vi først diskriminanten for  $S(k)$ :

$$D = (-2 SP_{xy})^2 - 4 SK_x \cdot SK_y = 4 \left( (SP_{xy})^2 - SK_x \cdot SK_y \right).$$

Dermed får  $S(k)$  mindsteværdien

$$SRK = -\frac{4 \left( (SP_{xy})^2 - SK_x \cdot SK_y \right)}{4 SK_x} = -\frac{(SP_{xy})^2 - SK_x \cdot SK_y}{SK_x} = \frac{SK_x \cdot SK_y - (SP_{xy})^2}{SK_x}.$$

Vi deler udtrykket for  $SRK$  op i to brøker og reducerer:

$$SRK = \frac{SK_x \cdot SK_y}{SK_x} - \frac{(SP_{xy})^2}{SK_x} = SK_y - \frac{(SP_{xy})^2}{SK_x}$$

Hvis vi yderligere forudsætter, at datapunkternes andenkoordinater ikke alle er 0, gælder  $SK_y > 0$ . Dermed kan vi sætte  $SK_y$  udenfor parentes:

$$SRK = SK_y \cdot \left( 1 - \frac{(SP_{xy})^2}{SK_x \cdot SK_y} \right).$$

For bedste proportionalitet definerer vi korrelationskoefficienten  $r$  ved ligningen

$$r = \frac{SP_{xy}}{\sqrt{SK_x} \cdot \sqrt{SK_y}}$$

og bemærker, at

$$r^2 = \frac{(SP_{xy})^2}{SK_x \cdot SK_y}.$$

Dermed har vi følgende udtryk for  $SRK$ :

$$SRK = SK_y \cdot (1 - r^2).$$

Da  $SRK$  er en sum af kvadrater, gælder

$$SRK \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad SK_y \cdot (1 - r^2) \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad 1 - r^2 \geq 0 \quad \Leftrightarrow \quad -1 \leq r \leq 1,$$

idet  $SK_y > 0$ .

Da  $SRK$  er en sum af kvadrater, er  $SRK = 0$  hvis og kun hvis ethvert af kvadraterne i summen er 0. Dette er tilfældet, hvis og kun hvis datapunkterne alle ligger på linjen  $y = kx$ . I så fald gælder

$$SRK = 0 \Leftrightarrow SK_y \cdot (1 - r^2) = 0 \Leftrightarrow 1 - r^2 = 0 \Leftrightarrow r = -1 \vee r = 1.$$

Tillige bemærker vi, at jo tættere  $r$  er på enten  $-1$  eller på  $1$ , jo tættere er  $r^2$  på  $1$  og jo tættere er  $SRK$  på  $0$ . Sagt på en anden måde: Jo tættere  $r$  er på enten  $-1$  eller på  $1$ , jo bedre tilnærmer bedste proportionalitet datapunkterne.

Endelig noterer vi os, at proportionalitetskonstanten  $k$  og korrelationskoefficienten  $r$  har samme fortegn, idet de har samme tæller  $SP_{xy}$ , mens de begge har positiv nævner:

$$k = \frac{SP_{xy}}{SK_x} \quad \text{og} \quad r = \frac{SP_{xy}}{\sqrt{SK_x} \cdot \sqrt{SK_y}}.$$

Vi har dermed bevist følgende sætning:

- **Sætning 2.2.** Lad punkterne  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$  være givne og antag, at hverken deres første- eller andenkoordinater alle er 0. Korrelationskoefficienten  $r$  for bedste proportionale model er givet ved

$$r = \frac{SP_{xy}}{\sqrt{SK_x} \cdot \sqrt{SK_y}}.$$

$r$  har samme fortegn som proportionalitetskonstanten  $k$ , og opfylder  $-1 \leq r \leq 1$ . Alle datapunkter ligger på bedste proportionale model, hvis og kun hvis  $r = 1$  eller  $r = -1$ .

- **Eksempel 2.3.** Vi vender tilbage til den proportionale model  $y = kx$ , der bedst tilpasser datapunkterne i tabellen fra eksempel 1.3:

$i$	$x_i$	$y_i$
1	1,00	1,00
2	2,00	1,00
3	3,00	3,00
4	4,00	3,00

Vi ønsker nu at bestemme summen af residualkvadrater  $SRK$ , samt korrelationskoefficienten  $r$ .

I eksempel 1.3 fandt vi den bedste proportionale model til

$$y = 0,800x .$$

Vi lader  $f$  betegne proportionaliteten med forskriften

$$f(x) = 0,800x .$$

Vi kan dermed beregne *modelværdien*, *residualet* og *residualkvadratet* for  $x_1 = 1,00$  ved indsættelse i forskriften for  $f$ :

$$f(x_1) = f(1,00) = 0,800 \cdot 1,00 = 0,80$$

$$r_1 = y_1 - f(x_1) = 1,00 - 0,800 = 0,20$$

$$r_1^2 = 0,20^2 = 0,04$$

På denne måde kan vi nu tilføje tre søjler med henholdsvis modelværdier, residualer og residualkvadrater til tabellen:

$i$	$x_i$	$y_i$	$f(x_i)$	$r_i$	$r_i^2$
<b>1</b>	1,00	1,00	0,80	0,20	0,04
<b>2</b>	2,00	1,00	1,60	-0,60	0,36
<b>3</b>	3,00	3,00	2,40	0,60	0,36
<b>4</b>	4,00	3,00	3,20	-0,20	0,04
<b>Sum</b>					<b>SRK = 0,80</b>

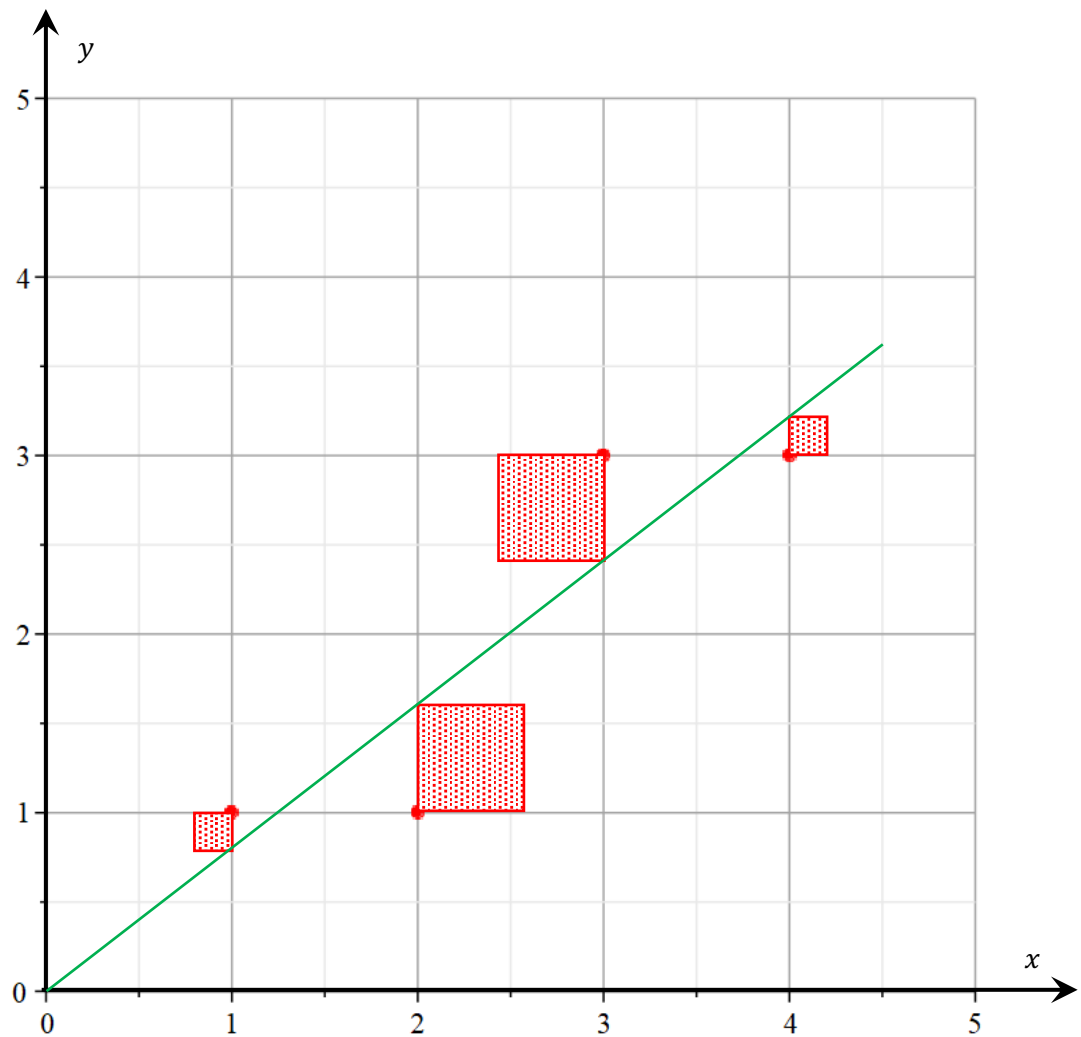
Dermed har vi

$$SRK = 0,80$$

Summen af arealerne af de **røde** kvadrater på figur 2.4 på næste side er således 0,80.

Man opfatter undertiden residualerne  $r_i$  som den del af  $y_i$ -erne, der *ikke* forklares af den proportionale model. Derfor kalder man somme tider *SRK* for *den uforklarede variation*.





*Figur 2.4. Bedste proportionale model er den linje gennem  $O(0,0)$ , som gør summen af arealerne af de røde kvadrater mindst mulig.*

For at beregne korrelationskoefficienten  $r$  er det hensigtsmæssigt at tilføje tre søjler til den oprindelige tabel med henholdsvis kvadraterne  $x_i^2$ , produkterne  $x_i y_i$  og kvadraterne  $y_i^2$ , samt en række med de tre sidste søjlers summer:

$i$	$x_i$	$y_i$	$x_i^2$	$x_i y_i$	$y_i^2$
1	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00
2	2,00	1,00	4,00	2,00	1,00
3	3,00	3,00	9,00	9,00	9,00
4	4,00	3,00	16,0	12,0	9,00
Sum			$SK_x = 30,0$	$SP_{xy} = 24,0$	$SK_y = 20,0$

Vi beregner nu korrelationskoefficienten  $r$  ved hjælp af formelen fra sætning 2.2:

$$r = \frac{SP_{xy}}{\sqrt{SK_x} \cdot \sqrt{SK_y}}$$

$$r = \frac{24,0}{\sqrt{30,0} \cdot \sqrt{20,0}} = 0,980 .$$

Vi bemærker, at  $0 < r < 1$  helt i overensstemmelse med sætning 2.2, idet proportionalitetskonstanten  $k = 0,800$  er positiv.

## Afsnit 3. Forklaringsgraden

Vi vil nu indføre *forklaringsgraden* – der også ofte betegnes *determinationskoefficienten* – som et mål for hvor stor en del af den totale variation, der forklares af den proportionale model. Vi vil indlede med at forklare begrebet i et konkret eksempel:

➤ **Eksempel 3.1.** Vi betragter igen tabellen fra eksempel 1.3 og 2.3:

$i$	$x_i$	$y_i$
1	1,00	1,00
2	2,00	1,00
3	3,00	3,00
4	4,00	3,00

I eksempel 1.3 bestemte vi forskriften for proportionalitet  $f$ , der bedst tilnærmer datapunkterne, til

$$f(x) = 0,800x .$$

Tillige beregnede vi i eksempel 2.3 summen af residualkvadraterne til

$$SRK = 0,800 ,$$

og korrelationskoefficienten  $r$  til

$$r = 0,980 .$$

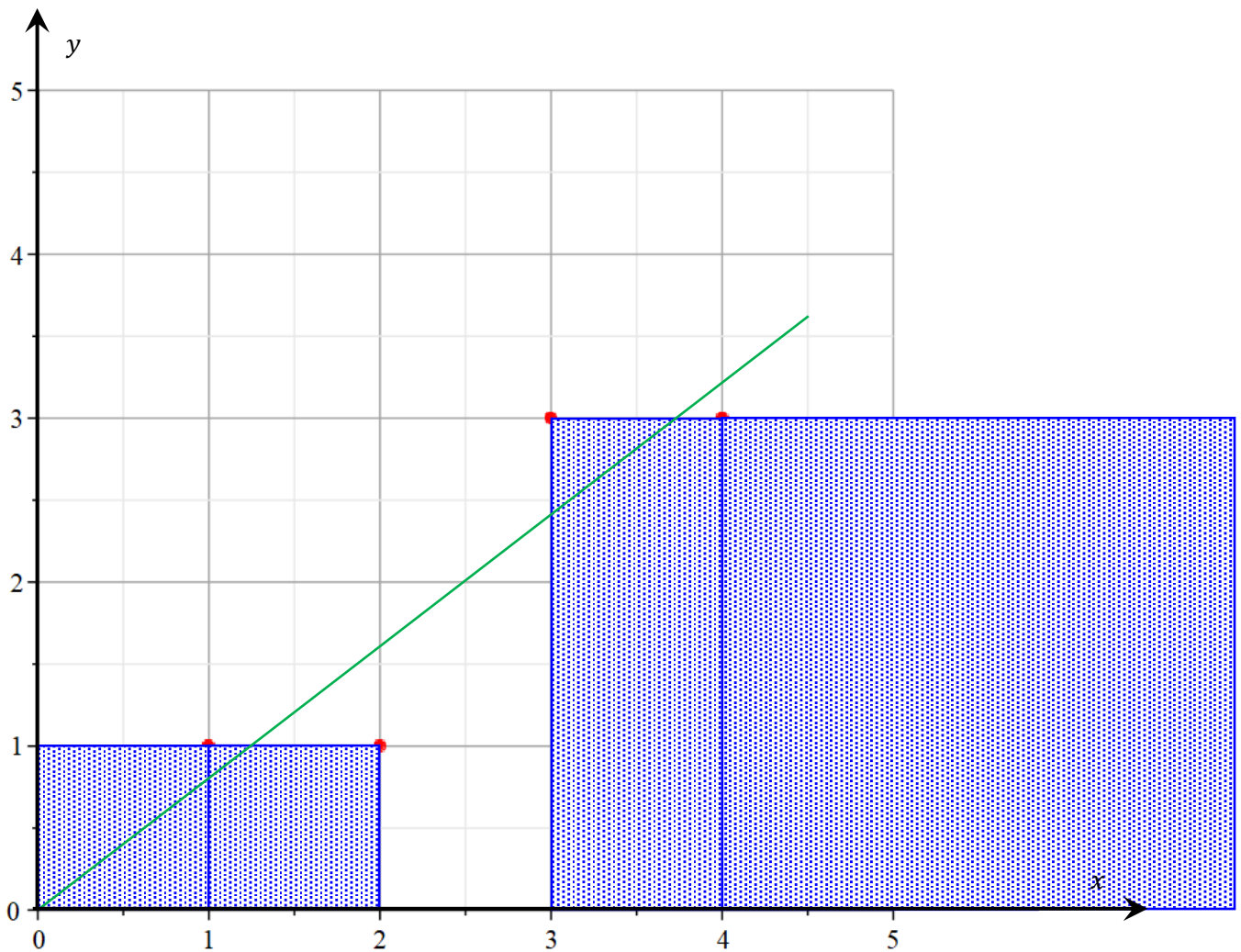
Vi benævnte  $SRK$  den uforklarede variation, som vi geometrisk tolkede som summen af arealerne af de **røde** kvadrater på figur 2.4.

I overensstemmelse med denne sprogbrug vil vi betegne summen

$$SK_y = \sum_{i=1}^N y_i^2$$

som *den totale variation* af  $y_i$ -erne. Geometrisk kan vi tolke vi  $SK_y$  som summen af arealerne af de **blå** kvadrater på figur 3.2 på næste side.

Fra eksempel 2.3 ved vi, at  $SK_y = 20,0$ , jævnfør tabellen side 20.



Figur 3.2. Den totale variation  $SK_x$  er summen af arealerne af de blå Kvadrater. Bemærk, at de to kvadrater til højre delvist overlapper.

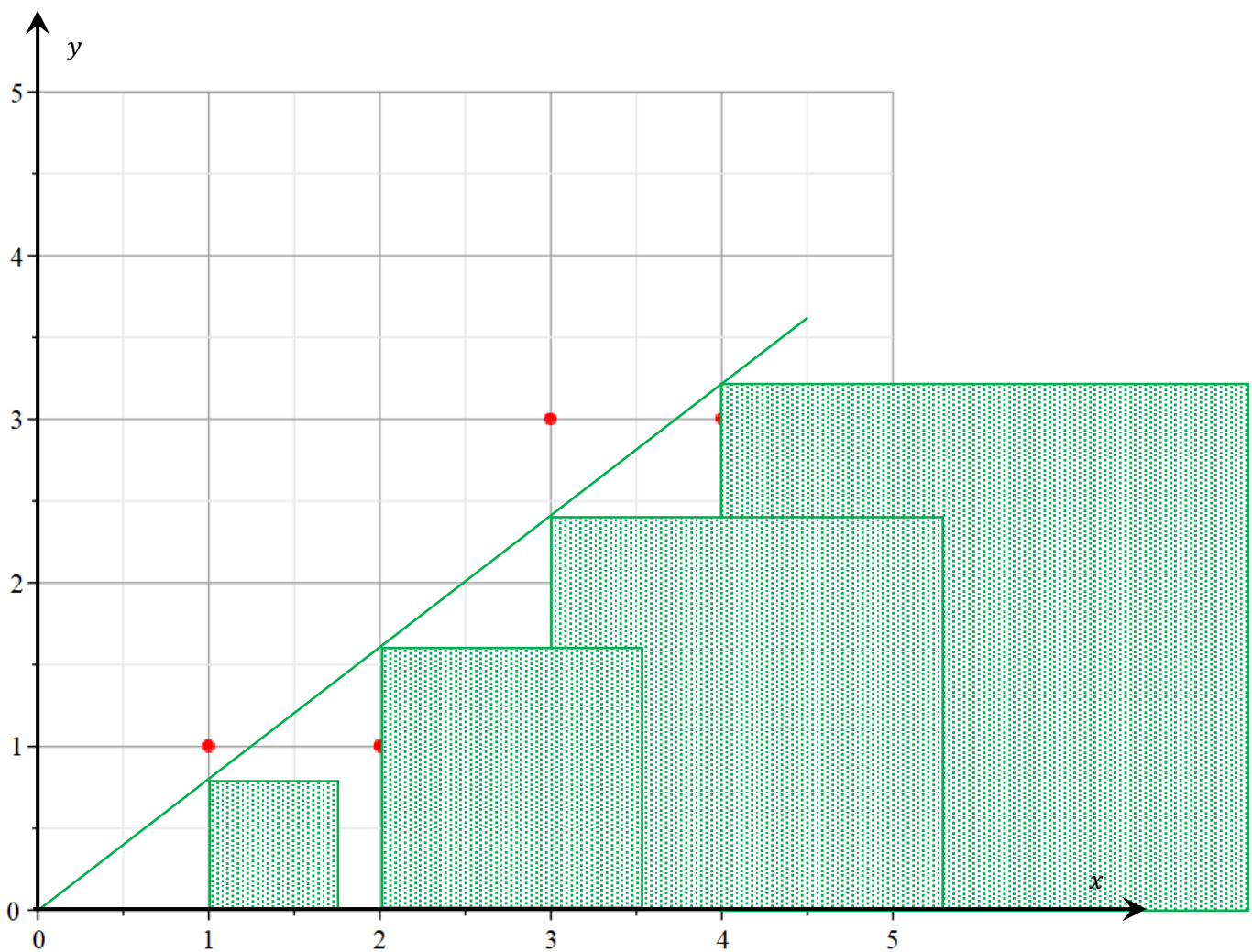
Tilsvarende vil vi betegne  $SK_{f(x_i)}$  den forklarede variation, altså den variation, der kan forklares af den proportionale model:

$$SK_{f(x_i)} = \sum_{i=1}^N (f(x_i))^2.$$

Geometrisk kan vi tolke vi  $SK_{f(x_i)}$  som summen af arealerne af de grønne kvadrater på figur 3.3 nederst på næste side.

I nedenstående tabel har vi samlet de søjler fra tabellerne på side 8, der er relevante for beregning af den uforklarede variation  $SRK$ , den totale variation  $SK_y$  og den forklarede variation  $SK_{f(x_i)}$ :

$i$	$x_i$	$y_i$	$r_i^2$	$y_i^2$	$(f(x_i))^2$
1	1,00	1,00	0,04	1,00	0,640
2	2,00	1,00	0,36	1,00	2,56
3	3,00	3,00	0,36	9,00	5,76
4	4,00	3,00	0,04	9,00	10,24
Sum			<b><math>SRK = 0,80</math></b>	<b><math>SK_y = 20,0</math></b>	<b><math>SK_{f(x)} = 19,2</math></b>



*Figur 3.3. Summen af arealerne  $SK_{f(x)}$  af de grønne kvadrater kaldes den forklarede variation. I eksemplet er  $SK_{f(x)} = 19,2$ .*

Vi lægger mærke til, at

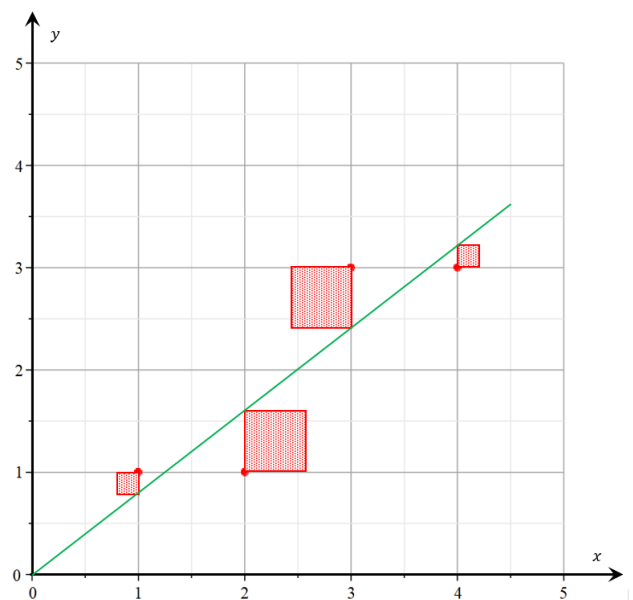
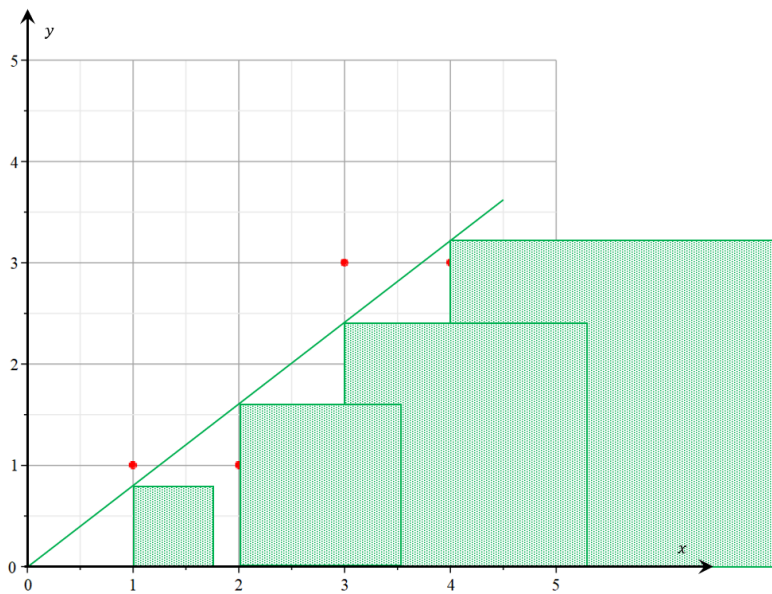
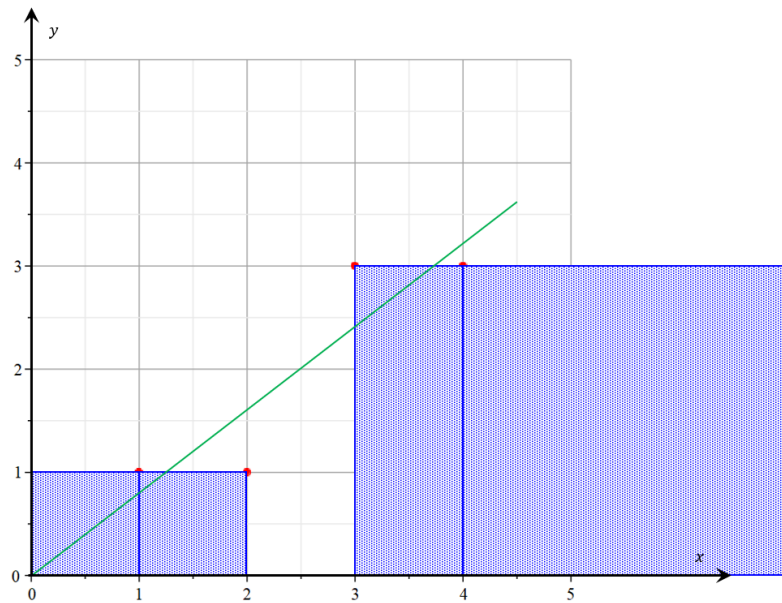
$$SK_y = SK_{f(x)} + SRK ,$$

idet

$$20,0 = 19,2 + 0,80 .$$

Vi har altså i dette tilfælde, at den totale variation er lig summen af den forklarede variation og den uforklarede variation.

Geometrisk kan vi tolke dette således, at summen af arealerne af de blå kvadrater er i lig med summerne af arealerne af de røde og de grønne kvadrater til sammen, jævnfør figur 3.4 nedenfor.



*Figur 3.4. Summen af arealerne af de blå kvadrater er lig summerne af arealerne af de røde og de grønne kvadrater til sammen.*

Forklaringsgraden  $R^2$  defineres som forholdet mellem den forklarede variation og den totale variation:

$$R^2 = \frac{SK_{f(x)}}{SK_y}.$$

Vi har dermed

$$R^2 = \frac{19,2}{20,0} = 0,960.$$

Ved konkret udregning får vi i dette tilfælde

$$r^2 = 0,980^2 = 0,960 = R^2.$$

Vi vender os igen mod igen det almene tilfælde. Vi lader altså  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$  betegne  $N$  datapunkter, som tillige opfylder at hverken punkternes førstekoordinater eller andenkoordinater alle er 0.

Vi lader  $f$  betegne den proportionalitet, hvis graf netop er den rette linje gennem  $O(0,0)$ , der tilpasser datapunkterne bedst muligt:

$$f(x) = kx.$$

I afsnit 2 beviste vi, at i så fald er kvadratsummen

$$S(k) = \sum_{i=1}^N (y_i - kx_i)^2$$

mindst mulig, samt at

$$k = \frac{SP_{xy}}{SK_x}.$$

Som nævnt i eksempel 1.3 omtaler man

$$SK_y = \sum_{i=1}^N y_i^2$$

som *den totale variation af  $y_i$ -erne*, dvs. den samlede kvadratsum. Geometrisk kan  $SK_y$  tolkes som summen af kvadraterne på de **blå** afstande på figur 3.5 på næste side.

Vi betegner som tillige kvadratsummen

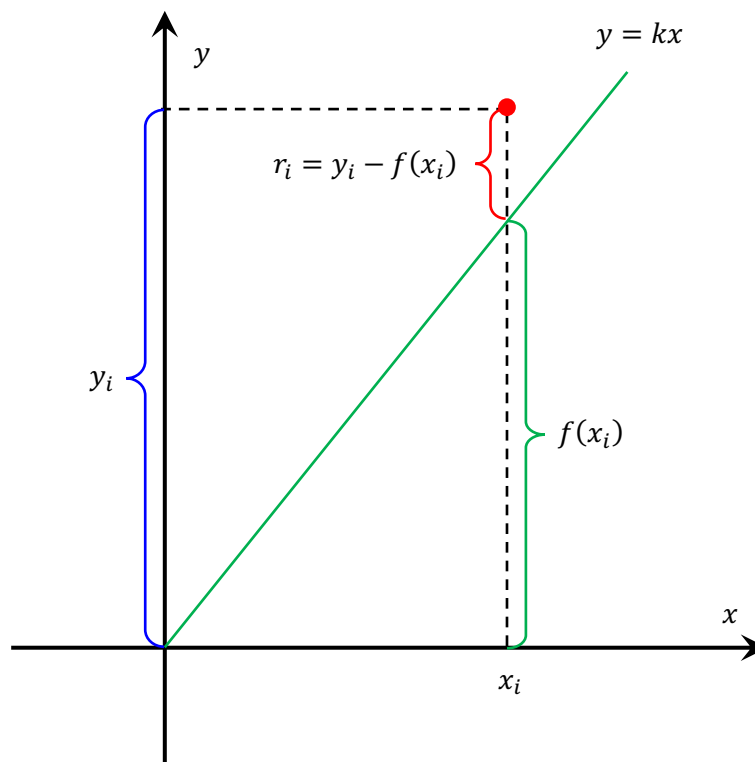
$$SK_{f(x)} = \sum_{i=1}^N (f(x_i))^2$$

den forklarede variation, da  $f(x_i)$  er den del af  $y_i$ , der forklares af den proportionale model, jævnfør figur 3.5.

Endelig kalder vi summen af residualkvadrater

$$SRK = \sum_{i=1}^N r_i^2 = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i))^2$$

for den uforklarede variation, da residualerne  $r_i = y_i - f(x_i)$  ikke forklares af den proportionale model, jævnfør figur 3.5.



Figur 3.5. Den proportionale model forklarer  $f(x_i)$ , men ikke  $y_i - f(x_i)$ , af dataværdien  $y_i$ .

Vi vil nu bevise sætning 3.6, som siger, at resultatet

$$SK_y = SK_{f(x)} + SRK$$

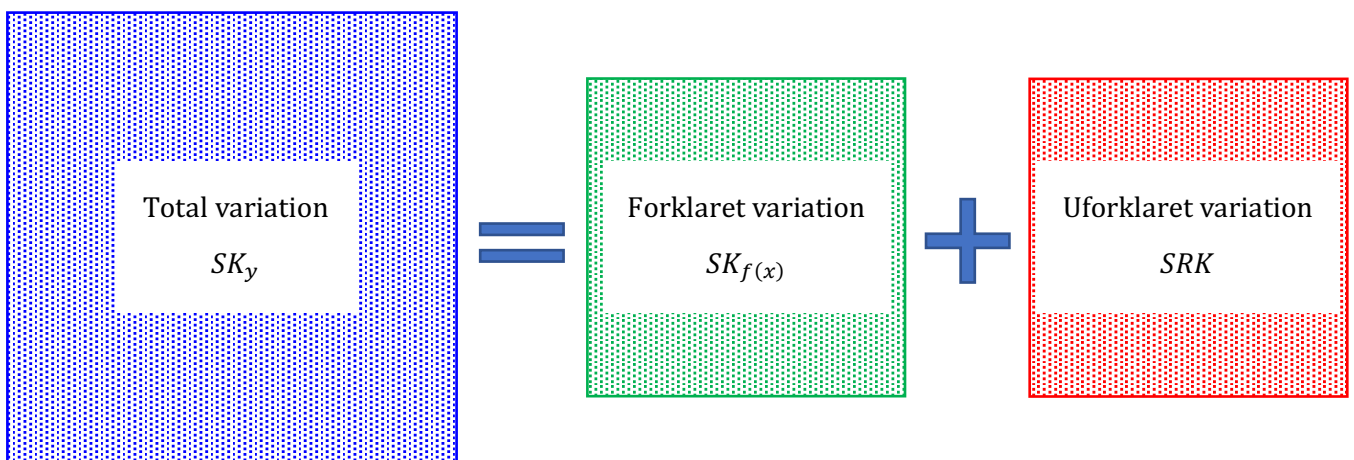
fra eksempel 3.1 er et almengyldigt resultat:



- **Sætning 3.6.** Lad punkterne  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$  være givne og antag, at hverken deres første- eller andenkoordinater alle er 0. Lad  $f$  betegne den proportionalitet, hvis graf er den rette linje gennem , der tilnærmer punkterne bedst. Så er den totale variation lig summen af den forklarede variation og den uforklarede variation:

$$SK_y = SK_{f(x)} + SRK$$

Med samme farvesymbolik som i eksempel 3.1 kan vi illustrere resultatet i sætningen således:



*Bevis:*

I afsnit 2 (se midt på side 6) beviste vi at kvadratsummens mindsteværdi er givet ved formen

$$SRK = SK_y - \frac{(SP_{xy})^2}{SK_x}$$

Forlænger vi brøken med  $SK_x$ , fås

$$SRK = SK_y - \frac{(SP_{xy})^2}{(SK_x)^2} \cdot SK_x = SK_y - k^2 \cdot SK_x,$$

idet vi ved sidste lighedstegn udnytter, at

$$k = \frac{SP_{xy}}{SK_x}.$$

Men da kvadraterne  $(f(x_i))^2$  på funktionsværdierne  $f(x_i) = kx_i$  kan omskrives

$$(f(x_i))^2 = (kx_i)^2 = k^2 \cdot x_i^2$$

har vi, at

$$k^2 \cdot SK_x = k^2 \cdot \sum_{i=1}^N x_i^2 = \sum_{i=1}^N k^2 \cdot x_i^2 = \sum_{i=1}^N (kx_i)^2 = \sum_{i=1}^N (f(x_i))^2 = SK_{f(x)}$$

Følgelig gælder

$$SRK = SK_y - SK_{f(x)} \Leftrightarrow SK_y = SK_{f(x)} + SRK$$

Dermed er sætningen bevist.

□

I eksempel 3.1 så vi, at kvadratet på korrelationskoefficienten var lig med forklaringsgraden:

$$r^2 = R^2.$$

Vi vil nu bevise, at også dette også er en almen gyldig regel:

- **Sætning 3.7.** Lad punkterne  $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$  være givne og antag, at hverken deres første- eller andenkoordinater alle er 0. Lad  $f$  betegne den proportionalitet, hvis grafer den rette linje gennem  $O(0,0)$ , der tilnærmer punkterne bedst. Korrelationskoefficienten  $r$  og forklaringsgraden  $R^2$  model defineres ved

$$r = \frac{SP_{xy}}{\sqrt{SK_x} \cdot \sqrt{SK_y}} \quad \text{og} \quad R^2 = \frac{SK_{f(x)}}{SK_y}.$$

Kvadratet på korrelationskoefficienten er lig forklaringsgraden:

$$r^2 = R^2.$$

*Bevis:*

Kvadratet på korrelationskoefficienten er givet ved

$$r^2 = \frac{(SP_{xy})^2}{SK_x \cdot SK_y}.$$

Forlænger vi brøken med  $SK_x$ , fås

$$r^2 = \frac{(SP_{xy})^2}{(SK_x)^2} \cdot \frac{SK_x}{SK_y} = \frac{k^2 \cdot SK_x}{SK_y},$$

idet vi ved sidste lighedstegn igen udnytter, at  $k = \frac{SP_{xy}}{SK_x}$ .

Af beviset for sætning 3.6 fremgår, at

$$k^2 \cdot SK_x = SK_{f(x)}.$$

Følgelig gælder

$$r^2 = \frac{SK_{f(x)}}{SK_y} = R^2.$$

Dermed er sætningen bevist.

□

Med samme farvesymbolik som i eksempel 3.1 kan vi illustrere resultatet i sætning 3.7 således:

$$R^2 = \frac{\text{Forklaret variation } SK_{f(x)}}{\text{Total variation } SK_y}$$