2014年10月15日

第5回　通常の最小2乗法（OLS）
(1.2–1.3)

村澤 康友

目次

1 単回帰モデル（定数項なし） 2

2 単回帰モデル（定数項あり，p. 13） 8

3 重回帰モデル（行列を使わない説明） 16

4 重回帰モデル（行列を使った説明） 23

1　単回帰モデル（定数項なし）

2変量データを $((y_1, x_1), \ldots, (y_n, x_n))$ とする．
y_i の x_i 上への定数項のない単回帰モデルは

$$\mathrm{E}(y_i|x_i) = \beta x_i$$

β を求めたい．

回帰の残差（p. 15）

定義 1. $\beta = b$ **のときの** y_i **の残差は**

$$e_i := y_i - bx_i$$

注：誤差 $u_i := y_i - \beta x_i$ **とは異なる．**

OLS（p. 14）

定義 2. 残差 2 乗和を最小にするように回帰係数を定める方法を通常の最小 2 乗法（*ordinary least squares, OLS*）という．

注：すなわち OLS 問題は

$$\min_b \sum_{i=1}^{n} (y_i - bx_i)^2$$

正規方程式（p. 16）

定義 3. *OLS*問題の*1*階の条件を整理した式を**正規方程式**という．

注：残差2乗和はbに関する凸関数なので，1階の条件は最小化の必要十分条件．
注：OLS問題の1階の条件は

$$\sum_{i=1}^{n}(-x_i)2(y_i - b^* x_i) = 0$$

正規方程式は

$$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - b^* \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 0$$

OLS推定量（p. 16）

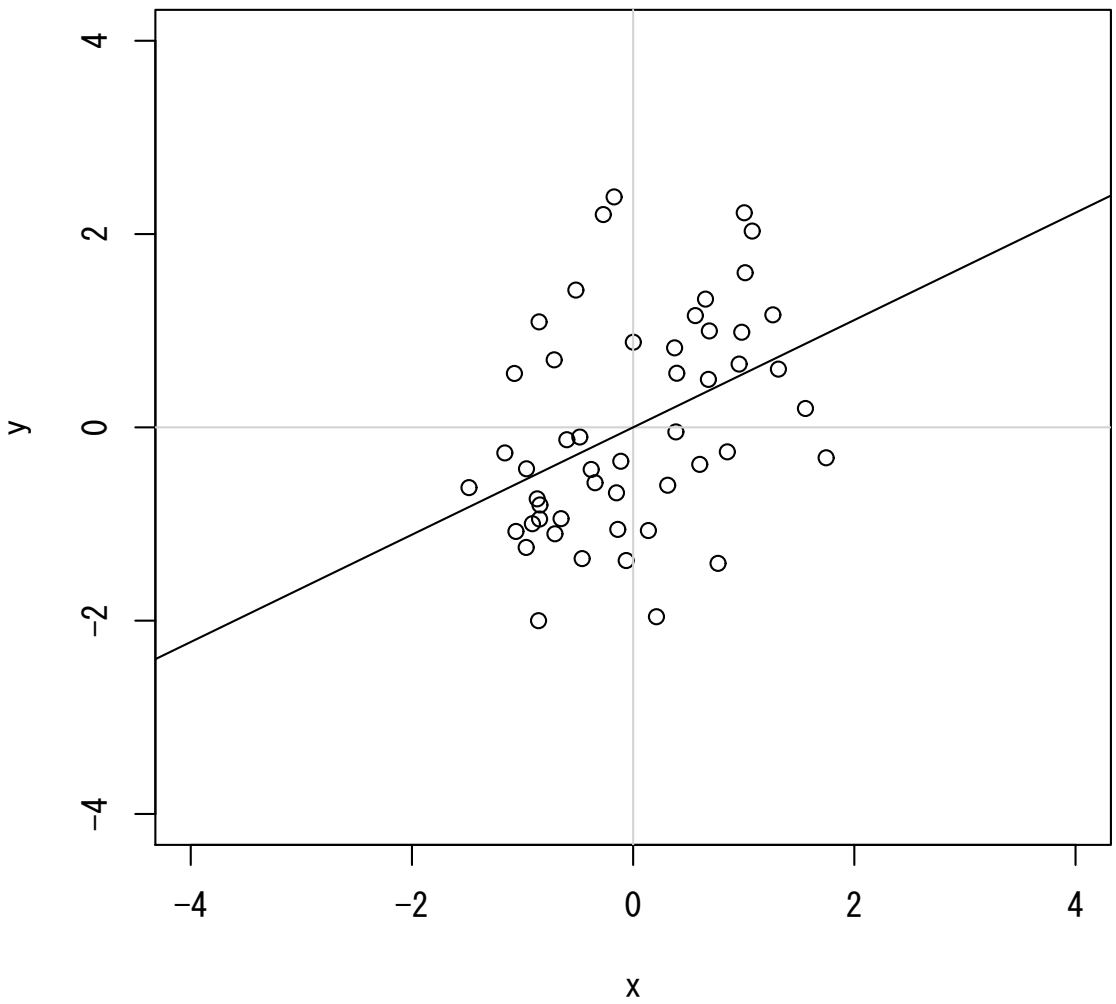
定義 4. *OLS*問題の解を回帰係数の*OLS*推定量という．

注：βのOLS推定量は

$$b^* = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i}{\sum_{i=1}^n x_i^2}$$

$\sum_{i=1}^n x_i^2 = 0$だと解は存在しない．

回帰直線（定数項なし）



2　単回帰モデル（定数項あり，p. 13）

y_i の x_i 上への定数項のある単回帰モデルは

$$\mathrm{E}(y_i|x_i) = \alpha + \beta x_i$$

(α, β) を求めたい．

OLS（p. 14）

$(\alpha, \beta) = (a, b)$ のときの y_i の残差は

$$e_i := y_i - a - bx_i$$

OLS 問題は

$$\min_{a,b} \sum_{i=1}^{n} (y_i - a - bx_i)^2$$

正規方程式（p. 16）

1階の条件は

$$\sum_{i=1}^{n}(-1)2(y_i - a^* - b^* x_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n}(-x_i)2(y_i - a^* - b^* x_i) = 0$$

すなわち

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - a^* - b^* x_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - a^* - b^* x_i) = 0$$

正規方程式は

$$\sum_{i=1}^{n} y_i - na^* - b^* \sum_{i=1}^{n} x_i = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i - a^* \sum_{i=1}^{n} x_i - b^* \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 0$$

この連立方程式の解が (α, β) **の** OLS **推定量．**

注：正規方程式の第1式をnで割ると

$$\bar{y} - a^* - b^*\bar{x} = 0$$

したがって$a^* = \bar{y} - b^*\bar{x}$**.**
1階の条件より

$$\begin{aligned}
&\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - a^* - b^* x_i) \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - a^* - b^* x_i) - \bar{x}\sum_{i=1}^{n}(y_i - a^* - b^* x_i) \\
&= 0
\end{aligned}$$

$a^* = \bar{y} - b^* \bar{x}$ を左辺に代入すると

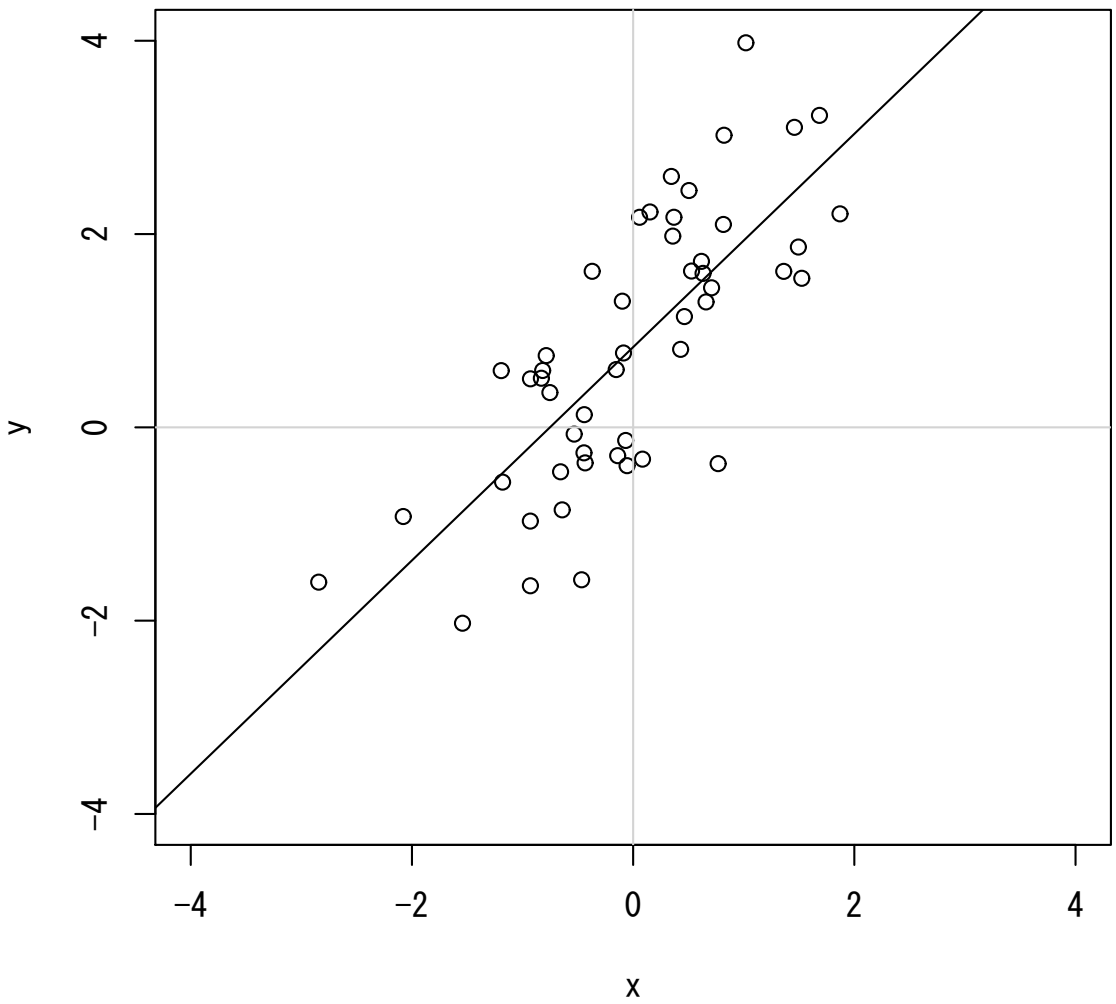
$$\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})[(y_i - \bar{y}) - b^*(x_i - \bar{x})] = 0$$

これを解くと

$$b^* = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2}$$

これは σ_{XY}/σ_X^2 の推定量と理解できる．

回帰直線（定数項あり）



3　重回帰モデル（行列を使わない説明）

y_i の x_i 上への線形回帰モデルは

$$\mathrm{E}(y_i|\boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{x}_i'\boldsymbol{\beta}$$

$\boldsymbol{\beta}$ を求めたい．

OLS

$\boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{b}$のときの$y_i$の残差は

$$e_i := y_i - \boldsymbol{x}_i'\boldsymbol{b}$$

OLS問題は

$$\min_{\boldsymbol{b}} \sum_{i=1}^{n} (y_i - \boldsymbol{x}_i'\boldsymbol{b})^2$$

勾配ベクトル

$f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ とする．

定義 5. x における $f(.)$ の**勾配ベクトル**は

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}) := \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1}(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n}(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix}$$

注：$\nabla f(x)$ とも書く．

ベクトルによる微分

定理 1. $\boldsymbol{a}$を$n \times 1$ベクトルとすると

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{a}$$

証明：勾配ベクトルの定義より

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} &:= \begin{pmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \boldsymbol{a}'\boldsymbol{x}}{\partial x_n} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \sum_{i=1}^{n} a_i x_i \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} \sum_{i=1}^{n} a_i x_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

正規方程式

1階の条件は

$$\sum_{i=1}^{n}(-\boldsymbol{x}_i)2(y_i - \boldsymbol{x}_i'\boldsymbol{b}^*) = \boldsymbol{0}$$

すなわち

$$\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i(y_i - \boldsymbol{x}_i'\boldsymbol{b}^*) = \boldsymbol{0}$$

正規方程式は

$$\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i y_i - \sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i'\boldsymbol{b}^* = \boldsymbol{0}$$

OLS推定量

βのOLS推定量は

$$\boldsymbol{b}^* = \left(\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_i'\right)^{-1} \sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i y_i$$

$\sum_{i=1}^{n} \boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_i'$が特異だと解は存在しない（多重共線性）.

4　重回帰モデル（行列を使った説明）

y の X 上への線形回帰モデルは

$$\mathrm{E}(\boldsymbol{y}|\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}$$

$\beta = b$ のときの y の残差ベクトルは

$$\boldsymbol{e} := \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}$$

OLS

残差2乗和は

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{e}'\boldsymbol{e} &= (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b})'(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}) \\
&= (\boldsymbol{y}' - \boldsymbol{b}'\boldsymbol{X}')(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{b}) \\
&= \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{b}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}
\end{aligned}
$$

OLS**問題は**

$$
\min_{\boldsymbol{b}} \boldsymbol{y}'\boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{b}'\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}
$$

ヤコビ行列

$\boldsymbol{f} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ とする．

定義 6. x における $\boldsymbol{f}(.)$ の**ヤコビ行列**は

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'}(\boldsymbol{x}) := \begin{bmatrix} \frac{\mathrm{d}f_1}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'}(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ \frac{\mathrm{d}f_m}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'}(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix}$$

注：$\nabla \boldsymbol{f}(x)$ とも書く．

ベクトルの1次関数の微分

定理 2. $\boldsymbol{A}$を$m \times n$行列とすると

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'} = \boldsymbol{A}$$

証明：ヤコビ行列の定義より

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'} &:= \begin{bmatrix} \dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{a}^1\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'} \\ \vdots \\ \dfrac{\mathrm{d}\boldsymbol{a}^m\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}^1 \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}^m \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

ベクトルの2次形式の微分

定理 3. $\boldsymbol{A}$を$n \times n$行列とすると

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} = (\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}')\boldsymbol{x}$$

注：$\boldsymbol{A}$が対称なら

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} = 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

証明：勾配ベクトルの定義より

$$
\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} &:= \begin{pmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \frac{\partial \boldsymbol{x}'\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial x_n} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} x_i a_{i,j} x_j \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} x_i a_{i,j} x_j \end{pmatrix} \\
&= \ldots
\end{aligned}
$$

正規方程式（p. 60）

1階の条件は

$$-2\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y} + 2\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}^* = \boldsymbol{0}$$

正規方程式は

$$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}^* = \boldsymbol{0}$$

OLS推定量（p. 60）

βのOLS推定量は

$$\boldsymbol{b}^* = (\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}'\boldsymbol{y}$$

$\boldsymbol{X}'\boldsymbol{X}$が特異だと解は存在しない（多重共線性）.

今日のキーワード

残差，通常の最小2乗法（OLS），正規方程式，OLS推定量，勾配ベクトル，ヤコビ行列，多重共線性