OLS 係数の計算方法[1]

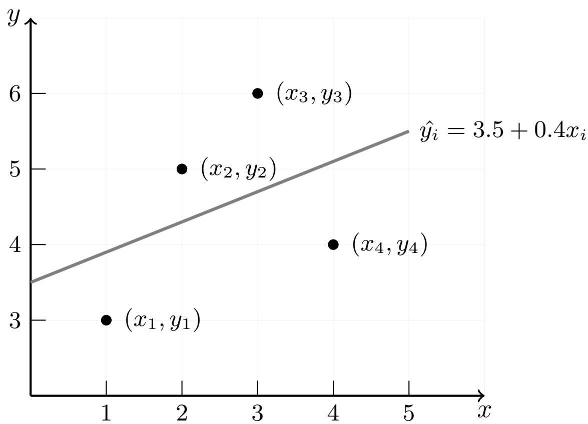
浜田　宏

平成 33 年 10 月 29 日

[1] このノートは『その問題，やっぱり数理モデルが解決します』9 章の補足資料です．ver1;2021 年 10 月 28 日公開.

第 1 章
OLS 係数の計算方法

「ねえ，花京院くん」
「どうしたの」
「まえに OLS の話をしてくれたよね」
「うん」
青葉は回帰直線の図を描いた．



x : 来店者数	y : 売り上げ（万円）
1	3
2	5
3	6
4	4

「あのときさあ，$y_i = a + bx_i$ という線形回帰モデルの係数を OLS

で計算すると，a, b はデータ (x_i, y_i) $i = 1, 2, \ldots, n$ を使って一般的に書けるって教えてくれたじゃん」

「そうだったね」

「あの式ってどんなのだっけ」

「たしか OLS で計算した係数は，

$$a = \bar{y} - \hat{b}\bar{x}, \qquad b = \frac{\displaystyle\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\displaystyle\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2}$$

ただし

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i, \quad \bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$$

だよ」花京院はすらすらと紙に式を書いた．

「え，まさか，覚えてるの？」

「うーん，別に暗記したわけじゃないんだけど，何度も計算するうちに自然と覚えたみたい」

「私も計算して確かめようとしたんだけど $\cdots\cdots$,」

「へえ，そりゃ，いいことだ」

「途中でつまずいたんだよ．ちょっと見てくれる？」

「いいよ，どこまで考えたの？」

花京院は新しい計算用紙を机に置いた．

1.1 微分の条件

えーっと，まず残差は

$$u_i = y_i - a - bx_i$$

だからその 2 乗和は

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

だよね？

　これを展開すると

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i)^2 = \sum_{i=1}^{n}(y_i^2 + a^2 + b^2x_i^2 - 2ay_i + 2abx_i - 2bx_iy_i)$$

だから，これを a で偏微分すると……

$$\begin{aligned} y_i^2 &\quad (a \text{ で偏微分}) \to 0 \\ a^2 &\quad (a \text{ で偏微分}) \to 2a \\ b^2x_i^2 &\quad (a \text{ で偏微分}) \to 0 \\ -2ay_i &\quad (a \text{ で偏微分}) \to -2y_i \\ 2abx_i &\quad (a \text{ で偏微分}) \to 2bx_i \\ -2bx_iy_i &\quad (a \text{ で偏微分}) \to 0 \end{aligned}$$

だから，残るのは

$$2a, -2y_i, 2bx_i$$

の 3 つだよ．だから

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

かな？

　花京院は，計算結果を確認するとうなずいた．

「そうだよ．1 つづつ順番に計算したのがよかったね．そのやり方なら間違いが少ないよ．厳密に言えば，

　《微分してから足し算すること》
　と
　《足し算してから微分すること》

が同じ，という微分の性質を使っているよ．a に関する偏微分はこれで問題ない」

「じゃあ次は b で偏微分だね」

青葉は次の紙を取り出した.

さっきと同じように，b で偏微分すると ……

$$\begin{aligned}
y_i^2 &\quad (b\text{ で偏微分}) \to 0 \\
a^2 &\quad (b\text{ で偏微分}) \to 0 \\
b^2x_i^2 &\quad (b\text{ で偏微分}) \to 2bx_i^2 \\
-2ay_i &\quad (b\text{ で偏微分}) \to 0 \\
2abx_i &\quad (b\text{ で偏微分}) \to 2ax_i \\
-2bx_iy_i &\quad (b\text{ で偏微分}) \to -2x_iy_i
\end{aligned}$$

だから，残るのは

$$2bx_i^2, 2ax_i, -2x_iy_i$$

の 3 つだよ．だから

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(2bx_i^2 + 2ax_i - 2x_iy_i) &= \sum_{i=1}^{n} 2x_i(bx_i + a - y_i) \\
&= -2\sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - a - bx_i)
\end{aligned}$$

かな？

よし.

結果をまとめ書くよ.

残差の 2 乗和を

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

という記号で表せば，いまやった偏微分の結果は

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f(a,b)}{\partial a} &= -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i) \\
\frac{\partial f(a,b)}{\partial b} &= -2\sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - a - bx_i)
\end{aligned}$$

だよ．

あってるかな？

「問題ないよ．ちなみに合成関数の微分を使うともう少し簡単にできるよ」

「私，あれ苦手」

「なれると便利だよ」

合成関数の微分の定理より

$$\frac{\partial u_i^2}{\partial a} = \frac{\partial u_i^2}{\partial u_i}\frac{\partial u_i}{\partial a} = 2u_i \cdot -1 = -2(y_i - a - bx_i)$$
$$\frac{\partial u_i^2}{\partial b} = \frac{\partial u_i^2}{\partial u_i}\frac{\partial u_i}{\partial b} = 2u_i \cdot -x_i = -2x_i(y_i - a - bx_i)$$

u_i^2 について総和をとれば

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sum u_i^2}{\partial a} &= \frac{\partial u_1^2}{\partial a} + \frac{\partial u_2^2}{\partial a} + \cdots + \frac{\partial u_n^2}{\partial a} \\ &= \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial u_i^2}{\partial a} \\ &= -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i)\end{aligned}$$

b についての偏微分も同様に

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sum u_i^2}{\partial b} &= \frac{\partial u_1^2}{\partial b} + \frac{\partial u_2^2}{\partial b} + \cdots + \frac{\partial u_n^2}{\partial b} \\ &= -2\sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - a - bx_i)\end{aligned}$$

となる．

「うーん，私には難しいなー」

「まあ，どっちの方法でもいいよ，結果は同じだから」

1.2 正規方程式の計算

「残差の 2 乗和が最小になるような a, b を計算したいので，さっき計算した偏導関数をそれぞれ 0 とおく．

$$\frac{\partial f(a,b)}{\partial a} = -2\sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i) = 0$$
$$\frac{\partial f(a,b)}{\partial b} = -2\sum_{i=1}^{n}x_i(y_i - a - bx_i) = 0$$

両辺に $-1/2$ をかければ

$$\frac{\partial f(a,b)}{\partial a} = \sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i) = 0 \tag{1.1}$$
$$\frac{\partial f(a,b)}{\partial b} = \sum_{i=1}^{n}x_i(y_i - a - bx_i) = 0 \tag{1.2}$$

だよ．これを正規方程式という．まあ名前はどうでもいいんだけど」

「OK．ここからの計算につまったんだよ」

「じゃあ簡単な a の計算からいこう．（1.1）式を計算すると

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - a - bx_i) = 0$$
$$\sum_{i=1}^{n}y_i - \sum_{i=1}^{n}a - \sum_{i=1}^{n}bx_i = 0$$
$$n\bar{y} - na - bn\bar{x} = 0$$

となる，あとはこれを a について整理すると

$$na = n\bar{y} - bn\bar{x}$$
$$a = \bar{y} - b\bar{x}$$

だよ」

「えーと，なんで

$$\sum_{i=1}^{n}y_i = n\bar{y}$$

になるんだっけ？」

「それは平均値の定義から

$$\bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i$$

$$n\bar{y} = \sum_{i=1}^{n} y_i \qquad \text{両辺に } n \text{ をかけた}$$

となるから，だよ」

「あ，ほんとだ．言われてみれば簡単」

「さて、と。次の b の計算がちょっとややこしい」

まず $a = \bar{y} - b\bar{x}$ を (1.2) 式に代入する．

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

$$\sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - (\bar{y} - b\bar{x}) - bx_i) = 0 \qquad \text{代入した}$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_i(y_i - \bar{y} + b\bar{x} - bx_i) = 0 \qquad \text{括弧を外した}$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_iy_i - x_i\bar{y} + bx_i\bar{x} - bx_ix_i = \qquad \text{括弧を外した}$$

次に総和を分解する

$$\sum_{i=1}^{n}(x_iy_i - x_i\bar{y} + bx_i\bar{x} - bx_ix_i) = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_iy_i - \sum_{i=1}^{n} x_i\bar{y} + \sum_{i=1}^{n} bx_i\bar{x} - \sum_{i=1}^{n} bx_ix_i = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_iy_i - n\bar{x}\bar{y} + bn\bar{x}\bar{x} - b\sum_{i=1}^{n} x_i^2 = 0$$

$$\sum_{i=1}^{n} x_iy_i - n\bar{x}\bar{y} + b\left(n\bar{x}^2 - \sum_{i=1}^{n} x_i^2\right) = 0$$

これを b について整理すると

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

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

だよ．

まあ意外と簡単だったね．

「え？ これでおわり？」

「そうだよ」

「形が違うじゃん．最初に書いた式は

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

だよ」

「そうだね」

「そうだねって．違ってもいいの？」

「変形すれば同じだから別にこれでもいいよ」

「ほんとに同じになるの？」

「なるよ．確かめたことあるから」

「えー，ほんとに？」青葉は眉間にしわをよせた．

「疑り深いなあ．まあちゃんと確かめるのはいいことだ．ようするに分子が

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

になることと，分母が

$$\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2$$

になることを確かめればいい．さあやってみて」
　花京院は計算用紙を取り出すと，青葉の前に置いた．

練習問題

問題 **1.1**　難易度☆☆

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

を証明してください

問題 **1.2**　難易度☆☆

$$\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2$$

を証明してください

問題 **1.1**　解答例

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})(y_i-\bar{y}) &= \sum_{i=1}^{n}(x_iy_i - x_i\bar{y} - \bar{x}y_i + \bar{x}\bar{y}) \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_iy_i - \sum_{i=1}^{n} x_i\bar{y} - \sum_{i=1}^{n} \bar{x}y_i + \sum_{i=1}^{n} \bar{x}\bar{y} \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_iy_i - n\bar{x}\bar{y} - n\bar{x}\bar{y} + n\bar{x}\bar{y} \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_iy_i - n\bar{x}\bar{y}
\end{aligned}
$$

問題 **1.2**　解答例

$$
\begin{aligned}
\sum_{i=1}^{n}(x_i-\bar{x})^2 &= \sum_{i=1}^{n}(x_i^2 - 2x_i\bar{x} + \bar{x}^2) \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \sum_{i=1}^{n} 2x_i\bar{x} + \sum_{i=1}^{n} \bar{x}^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2n\bar{x}\bar{x} + n\bar{x}^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - 2n\bar{x}^2 + n\bar{x}^2 \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i^2 - n\bar{x}^2
\end{aligned}
$$