

通常最小二乗法 (Ordinary Least Squares: OLS)

T.Chiba

2020 年 5 月 16 日

概要

最小二乗法についてみていく.

1 最小二乗法 (1 変量)

本題に入る前に, リハビリもかねて 1 変量の最小二乗法を確認する. 線形回帰モデルは下記のような構造をしていると考えられる.

$$y = \alpha + \beta x + \varepsilon \quad (1)$$

x, y についての観測値 $\{(x_i, y_i) | i = 1, 2, \dots, n\}$ がそれぞれ次のような構造を持っていると仮定する.

$$y_i = \alpha + \beta x_i + \varepsilon_i, i = 1, \dots, n \quad (2)$$

誤差 ε の平方和を考える.

$$Q(\alpha, \beta) = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n \{y_i - (\alpha + \beta x_i)\}^2 \quad (3)$$

これを, 偏差平方和と呼ぶ. $Q(\alpha, \beta)$ を最小にするような $\alpha = \hat{\alpha}, \beta = \hat{\beta}$ を最小二乗推定量 (Least Squares Estimator: LSE) と呼ぶ.

$$\begin{cases} \frac{\partial Q(\alpha, \beta)}{\partial \alpha} = 0 \\ \frac{\partial Q(\alpha, \beta)}{\partial \beta} = 0 \end{cases} \quad (4)$$

を満たすような α, β を考える. 2 階の偏微分まで計算すると,

$$\frac{\partial Q}{\partial \alpha} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - \alpha - \beta x_i) \quad (5)$$

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} = 2n > 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \beta} = -2 \sum_{i=1}^n x_i (y_i - \alpha - \beta x_i) \quad (7)$$

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial \beta^2} = 2 \sum_{i=1}^n x_i^2 > 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha \partial \beta} = 0 \quad (9)$$

ヘッセ行列は,

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha^2} & \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha \partial \beta} \\ \frac{\partial^2 Q}{\partial \alpha \partial \beta} & \frac{\partial^2 Q}{\partial \beta^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2n & 0 \\ 0 & 2 \sum x_i^2 \end{bmatrix} \quad (10)$$

いま, 任意の 2 次元ベクトル $\mathbf{t} = (t_1, t_2)'$ に対して二次形式,

$$\mathbf{t}' H \mathbf{t} = (t_1, t_2) \begin{pmatrix} 2n & 0 \\ 0 & 2 \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} = 2(n t_1^2 + t_2^2 \sum x_i^2) \geq 0 \quad (11)$$

となり、これが 0 となるのは、 $t = 0$ のときのみ。よってヘッセ行列 H は正定値。つまり、式 (4) を満たす、 α, β が極小値であることが分かる。

付録 A

A.1 2 変数関数の極値

偏差平方和を最小にするような、 α と β を求める際に、 α, β に関する偏微分を 0 として、推定量を求めた。しかし、偏微分が 0 と置くだけでは、 $Q(\alpha, \beta)$ の極値が求められるだけで、最小値かどうかは分からない。テキストだと当たり前のようになっているけど。

A.1.1 極大・極小

関数 $f(x, y)$ は連続かつ微分可能とする。

補題 境界点^{*1}でない極大点、極小点においては

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) = 0, \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) = 0 \quad (12)$$

となる。

証明 もし $\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) \neq 0$ ならば、微分可能性の定義^{*2}

$$\begin{cases} f(x, y) - f(x_0, y_0) = \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)(x - x_0) + \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0)(y - y_0) + g(x, y), \\ \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0} \frac{g(x, y)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|} = 0 \end{cases}$$

において、 $y = y_0$ と置くと、

$$\begin{aligned} f(x, y_0) - f(x_0, y_0) &= \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)(x - x_0) + g(x, y_0) \\ &= \frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0)(x - x_0) \left\{ 1 + c \cdot \frac{g(x, y_0)}{x - x_0} \right\} \end{aligned}$$

右辺の $\{ \}$ の中は x が x_0 に十分近いとき > 0 となる。一方、 $x - x_0$ は x が x_0 の近傍を動く時必ず符号を変えるため、 $f(x_0, y_0)$ は極大値でも極小値でもないことが分かる。 $\frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) \neq 0$ としても同様。

これにより、連立方程式

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) = 0, \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) = 0$$

を解けば、境界点でない極値の候補者が全て見つかる。 □

A.1.2 極大・極小の判定

極大値か極小値かの判定はヘッセ行列により行うことができる。

定義 (ヘッセ行列) 行列

$$\begin{bmatrix} f_{xx} & f_{xy} \\ f_{xy} & f_{yy} \end{bmatrix}$$

を $f(x, y)$ に関するヘッセ行列という。

^{*1} [5] p18 参照。

^{*2} $z = f(x, y)$ が点 $\mathbf{x}_0 = (x_0, y_0)$ で微分可能であるとは、ある定数 α, β があって、

$$\begin{cases} f(x, y) = f(x_0, y_0) + \alpha(x - x_0) + \beta(y - y_0) + g(x, y) \\ \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_0} \frac{g(x, y)}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0|} = 0 \end{cases} \quad (\mathbf{x} = (x, y) \neq \mathbf{x}_0)$$

と表せること ([5] p153 参照)

定理 $\frac{\partial f}{\partial x}(x_0, y_0) = \frac{\partial f}{\partial y}(x_0, y_0) = 0$ を満たす点 x_0, y_0 においてヘッセ行列が^{※3}

正定値 (x_0, y_0) は極小値

負定値 (x_0, y_0) は極大値

不定値 (x_0, y_0) は極値点ではない

A.1.3 正定値・負定値・不定値

参考文献

- [1] Tze Leung Lai, Haipeng Xing 著, 松原 望, 山村吉信 訳: 『ファイナンスのための統計学 -統計的アプローチによる評価と意思決定-』, 東京図書, 2016
- [2] 鈴木 武, 山田 作太郎: 『数理統計学 -基礎から学ぶデータ解析』, 内田老鶴圃, 1996
- [3] 稲垣宣生: 『数学シリーズ 数理統計学 (改訂版)』, 裳華房, 2003
- [4] 江川博康: 『弱点克服 大学生の微積分』 東京図書, 2005
- [5] 笠原皓司: 『サイエンスライブラリー 数学=12 微分積分学』, サイエンス社, 1974
- [6] David A. Harville, (監訳) 伊里正夫: 『統計のための行列代数 (上)』, 丸善出版, 2016

^{※3} 高校数学の美しい物語とか参考になる: <https://mathtrain.jp/hessian>