1. 최소제곱추정량

Find $(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ s.t. $\min Q = \sum \hat{e}_i^2 = \sum (y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta} x_i)^2$.

주어진 조건식을 최소로 만드는 $(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$을 찾기 위해 주어진 식을 각각 $(\hat{\alpha}, \hat{\beta})$ 에 대해 편미분한 뒤, 두 연립방정식의 해를 구한다.

$$\frac{\partial Q}{\partial \hat{\alpha}} = -2\sum (y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta} x_i) = 0 \qquad -(1)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial \hat{\beta}} = -2\sum (y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta} x_i) x_i = 0 \qquad -(2)$$

(1) 번의 식을 풀면, $\hat{\alpha} = \overline{y} - \hat{\beta}\overline{x}$.
이를 (2)번의 식에 대입하여 정리하면 다음과 같다.

$\sum x_i y_i - \hat{\alpha} \sum x_i - \hat{\beta} \sum x_i^2 = 0$: (2)의 식을 풀어서 정리.

$\sum x_i y_i - \left(\frac{1}{n} \sum y_i - \frac{1}{n} \hat{\beta} \sum x_i \right) \sum x_i - \hat{\beta} \sum x_i^2 = 0$: $\hat{\alpha} = \overline{y} - \hat{\beta}\overline{x}$ 을 대입하여 정리.

$$\sum x_i y_i - \frac{1}{n} \sum y_i \sum x_i + \frac{1}{n} \hat{\beta} \left(\sum x_i \right)^2 - \hat{\beta} \sum x_i^2 = 0$$

$$\sum x_i y_i - \frac{1}{n} \sum x_i \sum y_i - \hat{\beta} \left(\sum x_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum x_i \right)^2 \right) = 0$$

$$\therefore \quad \hat{\beta} = \frac{\sum x_i y_i - \frac{1}{n} \sum x_i \sum y_i}{\sum x_i^2 - \frac{1}{n} (\sum x_i)^2}$$

그리고 $\hat{\beta} = \frac{\sum x_i y_i - \frac{1}{n} \sum x_i \sum y_i}{\sum x_i^2 - \frac{1}{n} (\sum x_i)^2} = \frac{\sum x_i y_i - n\overline{x}\overline{y}}{\sum x_i^2 - n\overline{x}^2} = \frac{\sum (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum (x_i - \overline{x})^2}$ 으로 정리할 수도 있다.

2. 제곱합의 분해

Show that $\sum (\hat{y}_i - \overline{y})(y_i - \hat{y}_i) = 0$.

먼저, 최소제곱 회귀직선은 다음과 같이 표현할 수 있음을 기억한다.

$$\hat{y}_i = \hat{\alpha} + \hat{\beta} x_i = (\overline{y} - \hat{\beta}\overline{x}) + \hat{\beta} x_i = \overline{y} + \hat{\beta}(x_i - \overline{x})$$

(1) $\sum \hat{e}_i = \sum (y_i - \hat{y}_i) = \sum (y_i - \overline{y} - \hat{\beta}(x_i - \overline{x})) = \sum (y_i - \overline{y}) - \hat{\beta} \sum (x_i - \overline{x}) = 0$

$\because \sum (y_i - \overline{y}) = \sum y_i - n\overline{y} = 0$ (편차의 합은 0이 되는 성질을 사용.)

(2) 앞에서 보인 잔차의 합이 0이 된다는 성질을 사용하면 다음이 성립함을 알 수 있다.

$\overline{x} \sum \hat{e}_i = \overline{x} \sum (y_i - \hat{y}_i) = 0$

따라서 다음과 같이 식을 변형할 수 있다.

$\sum x_i \hat{e}_i = \sum x_i (y_i - \hat{y}_i) = \sum x_i (y_i - \hat{y}_i) - \overline{x} \sum (y_i - \hat{y}_i) = \sum (x_i - \overline{x})(y_i - \hat{y}_i)$

새롭게 정리된 식에 대해 계속해서 풀어나가면 다음과 같다.

$$
\begin{aligned}
\sum x_i \hat{e}_i &= \sum (x_i - \overline{x})(y_i - \hat{y}_i) = \sum (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y} - \hat{\beta}(x_i - \overline{x})) \\
&= \sum (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y}) - \hat{\beta} \sum (x_i - \overline{x})^2 \\
&= \sum (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y}) - \left(\frac{\sum (x_i - \overline{x})(y_i - \overline{y})}{\sum (x_i - \overline{x})^2} \right) \sum (x_i - \overline{x})^2 \\
&= 0
\end{aligned}
$$

(1)과 (2)의 결과를 종합하면, 제곱합의 분해에서 발생하는 cross-product의 값이 0이 됨을 보일 수 있다.

$$
\begin{aligned}
\sum (\hat{y}_i - \overline{y})(y_i - \hat{y}_i) &= \sum (\overline{y} + \hat{\beta}(x_i - \overline{x}) - \overline{y}) \hat{e_i} = \sum \hat{\beta}(x_i - \overline{x}) \hat{e_i} \\
&= \sum \hat{\beta} x_i \hat{e_i} - \sum \hat{\beta} \overline{x} \hat{e_i} = \hat{\beta} \sum x_i \hat{e_i} - \hat{\beta} \overline{x} \sum \hat{e_i} = 0
\end{aligned}
$$