Least Squares Estimation

Jo Seok Hee

January 17, 2025

1 Simple Linear Regression

단순 선형 회귀 모델은 다음과 같이 정의됩니다.

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

여기서

- y_i: 종속 변수의 관측값,
- x_i: 독립 변수의 관측값,
- β_0, β_1: 회귀 계수 (절편과 기울기),
- ϵ_i: 오차.

잔차 제곱합 (Residual Sum of Squares, RSS)을 정의합니다.

$$\text{SSE} = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\right)^2.$$

잔차 제곱합을 최소화하기 위해 SSE를 β_0와 β_1에 대해 각각 편미분합니다.
1. β_0에 대해 미분

$$\frac{\partial \text{SSE}}{\partial \beta_0} = \frac{\partial}{\partial \beta_0} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\right)^2.$$

체인 룰을 적용하여 전개합니다.

$$\frac{\partial \text{SSE}}{\partial \beta_0} = -2 \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i)\right).$$

이를 0으로 설정합니다.

$$\sum_{i=1}^{n} (y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i) = 0.$$

정리하면

$$n\beta_0 + \beta_1 \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i.$$

2. β_1에 대해 미분

$$\frac{\partial \text{SSE}}{\partial \beta_1} = \frac{\partial}{\partial \beta_1} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \right)^2.$$

체인 룰을 적용하여 전개합니다.

$$\frac{\partial \text{SSE}}{\partial \beta_1} = -2 \sum_{i=1}^{n} x_i \left(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i) \right).$$

이를 0으로 설정합니다.

$$\sum_{i=1}^{n} x_i y_i = \beta_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + \beta_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2.$$

3. 두 식을 연립하여 풀기
첫 번째 식

$$n\beta_0 + \beta_1 \sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i.$$

두 번째 식

$$\beta_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + \beta_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i.$$

두 식을 풀어서 β_0와 β_1를 계산하면

$$\beta_1 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n} (x_i - \bar{x})^2},$$

$$\beta_0 = \bar{y} - \beta_1 \bar{x}.$$

여기서

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

2 Multiple Linear Regression

다중 선형 회귀 모델은 다음과 같이 정의됩니다.

$$Y = X\beta + \epsilon,$$

여기서

- Y: $n \times 1$ 크기의 반응 벡터,
- X: $n \times p$ 크기의 예측 변수 행렬 (상수항 포함),
- β: $p \times 1$ 크기의 회귀 계수 벡터,
- ϵ: $n \times 1$ 크기의 오차 벡터.

잔차 제곱합 (Residual Sum of Squares, RSS)은 다음과 같이 정의됩니다.

$$\text{SSE} = \|Y - X\beta\|^2 = (Y - X\beta)^\top (Y - X\beta).$$

잔차 제곱합을 최소화하기 위해 β에 대해 미분합니다.

$$\frac{\partial \text{SSE}}{\partial \beta} = \frac{\partial}{\partial \beta} \left(Y^\top Y - 2\beta^\top X^\top Y + \beta^\top X^\top X\beta \right).$$

각 항을 미분합니다.
1. $Y^\top Y$는 β에 의존하지 않으므로 미분 값은 0입니다.
2. $-2\beta^\top X^\top Y$를 미분하면

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \left(-2\beta^\top X^\top Y \right) = -2X^\top Y.$$

3. $\beta^\top X^\top X\beta$를 미분하면

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\beta^\top X^\top X\beta \right) = 2X^\top X\beta.$$

따라서, 전체 미분 결과는

$$\frac{\partial \text{SSE}}{\partial \beta} = -2X^\top Y + 2X^\top X\beta.$$

이를 0으로 설정합니다

$$-2X^\top Y + 2X^\top X\beta = 0.$$

정리하면

$$X^\top X\beta = X^\top Y.$$

β에 대한 해는

$$\hat{\beta} = (X^\top X)^{-1} X^\top Y.$$