第9回：推定と仮説検定Appendix:
単純回帰の回帰係数の最尤推定

尚　晋
大学院経済学研究科　助教

2025年6月24日

ポイント

1. 最尤法を用いて単純回帰の回帰係数の最尤推定について

単純回帰の回帰係数の最尤推定過程

1. 単純回帰モデルの定義

単純回帰モデルは以下のように表されます。

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i + \epsilon_i$$

ここで、

- y_i：目的変数（従属変数）
- x_i：説明変数（独立変数）
- β_0：切片（回帰直線がy軸と交わる点）
- β_1：回帰係数（x_iが1単位増加したときのy_iの変化量）
- ϵ_i：誤差項（ランダムな誤差）

2. 誤差項の仮定

最尤推定を行う上で、誤差項ϵ_iに関して以下の仮定を置く。

- ϵ_iは互いに独立に、平均0、分散σ^2の正規分布に従う。

$$\epsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$$

この仮定から、y_iもまた、平均$\beta_0 + \beta_1 x_i$、分散σ^2の正規分布に従うことになる。

$$y_i \sim N(\beta_0 + \beta_1 x_i, \sigma^2)$$

つまり、y_iの確率密度関数$f(y_i|x_i; \beta_0, \beta_1, \sigma^2)$は以下のようになります。

$$f(y_i|x_i; \beta_0, \beta_1, \sigma^2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))^2}{2\sigma^2}\right)$$

3. 尤度関数の構築

観測されたn個のデータ点$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n)$が互いに独立であるという仮定の下、これらの観測値が得られる確率（同時確率）を表す尤度関数$L(\beta_0, \beta_1, \sigma^2)$は、各$y_i$の確率密度関数の積として定義される。

$$L(\beta_0, \beta_1, \sigma^2) = \prod_{i=1}^{n} f(y_i | x_i; \beta_0, \beta_1, \sigma^2)$$

$$L(\beta_0, \beta_1, \sigma^2) = \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2}{2\sigma^2}\right)$$

4. 対数尤度関数の構築

尤度関数を直接最大化するのは計算が複雑になるため、通常は対数を取った対数尤度関数$logL(\beta_0, \beta_1, \sigma^2) = \log L(\beta_0, \beta_1, \sigma^2)$を最大化する。対数関数は単調増加関数であるため、尤度関数を最大化することと対数尤度関数を最大化することは同義である。

$$\begin{aligned}
logL(\beta_0, \beta_1, \sigma^2) &= \log\left(\prod_{i=1}^{n} \left(2\pi\sigma^2\right)^{-1/2} \exp\left(-\frac{(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2}{2\sigma^2}\right)\right) \\
&= \sum_{i=1}^{n} \left[-\frac{1}{2}\log(2\pi\sigma^2) - \frac{(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2}{2\sigma^2}\right] \\
&= -\frac{n}{2}\log(2\pi) - \frac{n}{2}\log(\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2
\end{aligned}$$

5. 最尤推定量（MLE）の導出

対数尤度関数を最大化するために、各パラメータ（$\beta_0, \beta_1, \sigma^2$）について偏微分し、それが0となる点を求めます。

A. β_0に関する偏微分

$$\begin{aligned}
\frac{\partial logL(\beta_0, \beta_1, \sigma^2)}{\partial \beta_0} &= \frac{\partial}{\partial \beta_0}\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)^2\right) \\
&= -\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n} 2(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)(-1) \\
&= \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \beta_0 - \beta_1 x_i)
\end{aligned}$$

これを0と置くと、

$$\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 x_i) = 0$$

$$\sum y_i - n\hat{\beta}_0 - \hat{\beta}_1 \sum x_i = 0$$

$$n\hat{\beta}_0 = \sum y_i - \hat{\beta}_1 \sum x_i$$

$$\hat{\beta}_0 = \frac{\sum y_i}{n} - \hat{\beta}_1 \frac{\sum x_i}{n}$$

$$\hat{\beta}_0 = \bar{y} - \hat{\beta}_1 \bar{x}$$

B. β_1**に関する偏微分**

$$\frac{\partial logL(\beta_0,\beta_1,\sigma^2)}{\partial\beta_1} = \frac{\partial}{\partial\beta_1}\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\beta_0-\beta_1x_i)^2\right)$$
$$= -\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}2(y_i-\beta_0-\beta_1x_i)(-x_i)$$
$$= \frac{1}{\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}x_i(y_i-\beta_0-\beta_1x_i)$$

これを0と置くと、

$$\sum_{i=1}^{n}x_i(y_i-\hat\beta_0-\hat\beta_1x_i)=0$$
$$\sum x_iy_i-\hat\beta_0\sum x_i-\hat\beta_1\sum x_i^2=0$$

ここで、Aで得られた$\hat\beta_0=\bar y-\hat\beta_1\bar x$を代入します。

$$\sum x_iy_i-(\bar y-\hat\beta_1\bar x)\sum x_i-\hat\beta_1\sum x_i^2=0$$
$$\sum x_iy_i-\bar y\sum x_i+\hat\beta_1\bar x\sum x_i-\hat\beta_1\sum x_i^2=0$$
$$\sum x_iy_i-n\bar y\bar x+\hat\beta_1(n\bar x^2-\sum x_i^2)=0$$
$$\hat\beta_1(\sum x_i^2-n\bar x^2)=\sum x_iy_i-n\bar x\bar y$$
$$\hat\beta_1=\frac{\sum x_iy_i-n\bar x\bar y}{\sum x_i^2-n\bar x^2}$$

ここで、分母は$S_{xx}=\sum(x_i-\bar x)^2=\sum x_i^2-n\bar x^2$、分子は$S_{xy}=\sum(x_i-\bar x)(y_i-\bar y)=\sum x_iy_i-n\bar x\bar y$と書けるので、

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

C. σ^2**に関する偏微分**

$$\frac{\partial logL(\beta_0,\beta_1,\sigma^2)}{\partial\sigma^2} = \frac{\partial}{\partial\sigma^2}\left(-\frac{n}{2}\log(\sigma^2)-\frac{1}{2\sigma^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\beta_0-\beta_1x_i)^2\right)$$
$$= -\frac{n}{2\sigma^2}+\frac{1}{2(\sigma^2)^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\beta_0-\beta_1x_i)^2$$

これを0と置くと、

$$-\frac{n}{2\hat\sigma^2}+\frac{1}{2(\hat\sigma^2)^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat\beta_0-\hat\beta_1x_i)^2=0$$
$$\frac{n}{2\hat\sigma^2}=\frac{1}{2(\hat\sigma^2)^2}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat\beta_0-\hat\beta_1x_i)^2$$
$$n\hat\sigma^2=\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat\beta_0-\hat\beta_1x_i)^2$$
$$\hat\sigma^2=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i-\hat\beta_0-\hat\beta_1x_i)^2$$

まとめ

最尤推定法による単純回帰の回帰係数(β_0, β_1)の推定過程は、以下のステップで進みます。

1. **モデルの定義と誤差項の仮定**: 誤差項が正規分布に従うと仮定し、y_iの確率分布を特定します。
2. **尤度関数の構築**: 観測データが得られる同時確率をパラメータの関数として表現します。
3. **対数尤度関数の構築**: 計算を容易にするため、尤度関数の対数を取ります。
4. **偏微分による最大化**: 対数尤度関数を各パラメータで偏微分し、それが0となる方程式を解きます。

この過程の結果として得られる回帰係数$(\hat{\beta}_0, \hat{\beta}_1)$の最尤推定量は、正規分布の仮定の下では最小二乗推定量と数学的に一致する。これは、正規分布の場合、残差平方和を最小化すること（最小二乗法）が、尤度を最大化すること（最尤推定法）と等価になるためである。