最小二乗法と正規方程式

調査や実験で得られたデータ (x_i, y_i) を使って，2 つの変数 x と y の間に直線

$$y = b_0 + b_1 x$$

をあてはめる問題において，各点 (x_i, y_i) のできるだけ近くを通るように b_0 と b_1 を決定することを考える．このとき，点 (x_i, y_i) と直線 $y = b_0 + b_1 x$ との残差

$$e_i = y_i - (b_0 + b_1 x_i)$$

を考え，

$$\sum_{i=1}^{n} e_i^2$$

が最小になるように，b_0 と b_1 を求める方法を**最小二乗法**という．また，$\sum_{i=1}^{n} e_i^2$ を**残差平方和**という．いま，残差平方和を Q で表すことにする．

$$Q = \sum_{i=1}^{n} e_i^2 = \sum_{i=1}^{n} (y_i - b_0 - b_1 x_i)^2$$

Q が最小になるような b_0 と b_1 を求めることを考える．そこで，b_0 と b_1 に関する偏微分を 0 とした次の連立方程式を考えると，

$$\begin{aligned}
\frac{\partial Q}{\partial b_0} &= 2\sum_{i=1}^{n} (y_i - b_0 - b_1 x_i)(-1) = 0 \\
\frac{\partial Q}{\partial b_1} &= 2\sum_{i=1}^{n} (y_i - b_0 - b_1 x_i)(-x_i) = 0
\end{aligned}$$

であるから，これを整理すると次のようになる．

$$\begin{aligned}
b_0 \sum_{i=1}^{n} 1 + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i &= \sum_{i=1}^{n} y_i \\
b_0 \sum_{i=1}^{n} x_i + b_1 \sum_{i=1}^{n} x_i^2 &= \sum_{i=1}^{n} x_i y_i
\end{aligned}$$

この連立方程式を**正規方程式**という．この連立方程式を解くと，

$$\begin{aligned}
b_0 &= \frac{S(xy)}{S(xx)} \\
b_0 &= \bar{y} - b_1 \bar{x} = \bar{y} - \frac{S(xy)}{S(xx)} \bar{x}
\end{aligned}$$

となる．このとき，残差平方和は，次のようになる．

$$Q = S(yy) - b_1^2 S(xx)$$