Publication: lifemater.com, Author: peekAboo
Creation: 2022/2/7

最小二乗法（定数）

1. 最小二乗法による定数への回帰

n 個のデータ点$\{y_i\}$が得られたとき、以下の二乗誤差$I(b)$を最小化するように定数bを定める。

$$I(b)=\sum_i \{y_i-b\}^2 . \tag{1-1}$$

ここで、ある n 個のデータ$\{(x_i, y_i)\}$について以下の式を定義する。

$$E[x]=\frac{1}{n}\sum_i x_i , \tag{1-2}$$

$$\mathrm{Cov}[x,y]=E\Big[\big(x-E[x]\big)\big(y-E[y]\big)\Big]. \tag{1-3}$$

$E[x]$は$\{x_i\}$の平均値、$\mathrm{Cov}[x,x]$は$\{x_i\}$の分散、$\mathrm{Cov}[x,y]$は$\{(x_i, y_i)\}$の共分散である。

Eq. (1-1)を展開し、Eq. (1-2)を用いると、

$$\begin{aligned} I(b)&=\sum_i \{y_i-b\}^2=\sum_i\left(y_i^2-2by_i+b^2\right)=\sum_i y_i^2-2b\sum_i y_i+b^2\sum_i 1 \\ &=nb^2-2nbE[y]+\sum_i y_i^2 \end{aligned},$$

となる。これはbに関する二次方程式なので、平方完成すると以下のようになる。

$$\begin{aligned} I(b)&=nb^2-2nbE[y]+\sum_i y_i^2=n\left(b^2-2bE[y]+\frac{1}{n}\sum_i y_i^2\right) \\ &=n\left(\big(b-E[y]\big)^2-\big(E[y]\big)^2+\frac{1}{n}\sum_i y_i^2\right) \end{aligned}.$$

この二次関数は下に凸の二次関数なので、$I(b)$を最小化するbは$\{y_i\}$の平均値となる。

$$b = E[y]. \tag{1-4}$$

この時、

$$\begin{aligned}\min(I(b)) &= I(E[y]) = \sum_i \{y_i - E[y]\}^2 = n\frac{1}{n}\sum_i \{y_i - E[y]\}^2 \\ &= nE\left[\{y_i - E[y]\}^2\right] = n\mathrm{Cov}[y, y]\end{aligned},$$

つまり、

$$\min(I(b)) = n\mathrm{Cov}[y, y], \tag{1-5}$$

となる。

以上のように、最小二乗法を用いて$\{y_i\}$を定数bに回帰すると、bは$\{y_i\}$の平均値となり、二乗誤差$I(b)$は$\{y_i\}$の分散となる。