

1 現 [赤チャート数学 I 例題120]

n 個の 2 変量データ (x_i, y_i) ($i=1, 2, \dots, n$) がある。

$n \geq 2$ とし, x_i ($i=1, 2, \dots, n$) は互いに異なるとする。 x_i と y_i に対して関数

$y = ax + b$ により得られる値 $ax_i + b$ と y_i との差の 2 乗和を n で割った

$$R = \frac{1}{n} [\{y_1 - (ax_1 + b)\}^2 + \{y_2 - (ax_2 + b)\}^2 + \dots + \{y_n - (ax_n + b)\}^2]$$

を最小にする a, b を求めることにする。

R を a と b について展開した展開式の各項の係数を, x の平均値 \bar{x} と分散 s_x^2 , y の平均値 \bar{y} と分散 s_y^2 および x, y の共分散 s_{xy} を用いて表すと

$$R = b^2 + 2\bar{x}ab + \left(\overset{\text{ア}}{\square}\right)a^2 - 2\bar{y}b - 2\left(\overset{\text{イ}}{\square}\right)a + \overset{\text{ウ}}{\square}$$

となる。この式の右辺を, まず b について平方完成し, 次に a について平方完成することにより, R を最小にする a, b は $\bar{x}, \bar{y}, s_x^2, s_{xy}$ を用いて $a = \overset{\text{エ}}{\square}$, $b = \overset{\text{オ}}{\square}$

と求めることができる。

解答 (ア) $s_x^2 + (\bar{x})^2$ (イ) $s_{xy} + \bar{x}\bar{y}$ (ウ) $s_y^2 + (\bar{y})^2$ (エ) $\frac{s_{xy}}{s_x^2}$

(オ) $\bar{y} - \frac{s_{xy}\bar{x}}{s_x^2}$

解説
$$R = \frac{1}{n} \{y_1^2 - 2(ax_1 + b)y_1 + (ax_1 + b)^2\} + \{y_2^2 - 2(ax_2 + b)y_2 + (ax_2 + b)^2\} \\ + \dots + \{y_n^2 - 2(ax_n + b)y_n + (ax_n + b)^2\} \\ = \frac{1}{n} \{(y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_n^2) - 2a(x_1y_1 + x_2y_2 + \dots + x_ny_n) \\ - 2b(y_1 + y_2 + \dots + y_n) + a^2(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2) \\ + 2ab(x_1 + x_2 + \dots + x_n) + nb^2\}$$

ここで, $\frac{1}{n}(x_1 + x_2 + \dots + x_n) = \bar{x}$, $\frac{1}{n}(y_1 + y_2 + \dots + y_n) = \bar{y}$ であり,

$s_x^2 = \bar{x}^2 - (\bar{x})^2$, $s_y^2 = \bar{y}^2 - (\bar{y})^2$ であるから

$$\frac{1}{n}(x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2) = s_x^2 + (\bar{x})^2, \quad \frac{1}{n}(y_1^2 + y_2^2 + \dots + y_n^2) = s_y^2 + (\bar{y})^2$$

また, $i=1, 2, \dots, n$ について

$$(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = x_i y_i - \bar{y} x_i - \bar{x} y_i + \bar{x} \bar{y}$$

であるから $x_i y_i = (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) + \bar{y} x_i + \bar{x} y_i - \bar{x} \bar{y}$

これより $\frac{1}{n}(x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n)$

$$= \frac{1}{n} \{ (x_1 - \bar{x})(y_1 - \bar{y}) + (x_2 - \bar{x})(y_2 - \bar{y}) + \dots + (x_n - \bar{x})(y_n - \bar{y}) \}$$

$$+ \bar{y}(x_1 + x_2 + \dots + x_n) + \bar{x}(y_1 + y_2 + \dots + y_n) - n \bar{x} \bar{y}$$

$$= s_{xy} + \bar{y} \bar{x} + \bar{x} \bar{y} - \bar{x} \bar{y} = s_{xy} + \bar{x} \bar{y}$$

よって $R = s_y^2 + (\bar{y})^2 - 2a(s_{xy} + \bar{x} \bar{y}) - 2b \bar{y} + a^2 \{ s_x^2 + (\bar{x})^2 \} + 2ab \bar{x} + b^2$
 $= b^2 + 2 \bar{x} a b + \{ s_x^2 + (\bar{x})^2 \} a^2 - 2 \bar{y} b - 2 (s_{xy} + \bar{x} \bar{y}) a + s_y^2 + (\bar{y})^2$

R を変形すると

$$R = b^2 + 2(a \bar{x} - \bar{y})b + \{ s_x^2 + (\bar{x})^2 \} a^2 - 2(s_{xy} + \bar{x} \bar{y})a + s_y^2 + (\bar{y})^2$$

$$= \{ b + (a \bar{x} - \bar{y}) \}^2 - (a \bar{x} - \bar{y})^2 + \{ s_x^2 + (\bar{x})^2 \} a^2 - 2(s_{xy} + \bar{x} \bar{y})a + s_y^2 + (\bar{y})^2$$

$$= \{ b + (a \bar{x} - \bar{y}) \}^2 + s_x^2 a^2 - 2s_{xy} a + s_y^2$$

$$= \{ b + (a \bar{x} - \bar{y}) \}^2 + s_x^2 \left(a^2 - \frac{2s_{xy}}{s_x^2} a \right) + s_y^2$$

$$= \{ b + (a \bar{x} - \bar{y}) \}^2 + s_x^2 \left(a - \frac{s_{xy}}{s_x^2} \right)^2 - \frac{s_{xy}^2}{s_x^2} + s_y^2$$

$$= \{ b + (a \bar{x} - \bar{y}) \}^2 + s_x^2 \left(a - \frac{s_{xy}}{s_x^2} \right)^2 + \frac{s_x^2 s_y^2 - s_{xy}^2}{s_x^2}$$

したがって, R を最小にする a, b は,

$$a = \frac{s_{xy}}{s_x^2}, \quad b = \bar{y} - a \bar{x} = \bar{y} - \frac{s_{xy} \bar{x}}{s_x^2} \quad \text{である。} \quad \square$$