

■ 与えられたデータ $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ に対して, 関数

$$f(a, b) = \sum_{k=1}^n \{y_k - (ax_k + b)\}^2$$

が最小値を取る点 (a, b) を求めよ. ただし, データ x_1, x_2, \dots, x_n の標準偏差 s_x は $s_x > 0$ であると仮定する.

(解) データ x_1, x_2, \dots, x_n の平均を \bar{x} , データ y_1, y_2, \dots, y_n の平均を \bar{y} , 標準偏差を s_y , データ $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_n, y_n)$ の共分散を s_{xy} とすると,

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n x_k &= n\bar{x}, & \sum_{k=1}^n y_k &= n\bar{y}, & \sum_{k=1}^n x_k^2 &= n(s_x^2 + \bar{x}^2), \\ \sum_{k=1}^n y_k^2 &= n(s_y^2 + \bar{y}^2), & \sum_{k=1}^n x_k y_k &= n(s_{xy} + \bar{x}\bar{y}) \end{aligned}$$

が成り立つことに注意したい. $f(a, b)$ が点 (a_0, b_0) において極値を取るならば

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{\partial f}{\partial a}(a_0, b_0) = \sum_{k=1}^n [2\{y_k - (a_0 x_k + b_0)\}(-x_k)] = -2 \sum_{k=1}^n y_k x_k + 2a_0 \sum_{k=1}^n x_k^2 + 2b_0 \sum_{k=1}^n x_k \\ &= 2n \{(s_x^2 + \bar{x}^2)a_0 + \bar{x}b_0 - (s_{xy} + \bar{x}\bar{y})\} = 2n (s_x^2 a_0 - s_{xy}) + 2n\bar{x} (\bar{x}a_0 + b_0 - \bar{y}), \\ 0 &= \frac{\partial f}{\partial b}(a_0, b_0) = \sum_{k=1}^n [2\{y_k - (a_0 x_k + b_0)\}(-1)] = 2n (\bar{x}a_0 + b_0 - \bar{y}) \end{aligned}$$

であるから,

$$a_0 = \frac{s_{xy}}{s_x^2}, \quad b_0 = \bar{y} - \bar{x}a_0 = \frac{\bar{y}s_x^2 - \bar{x}s_{xy}}{s_x^2}$$

となる.

$$\frac{\partial^2 f}{\partial a^2}(a_0, b_0) = 2 \sum_{k=1}^n x_k^2 = 2n(s_x^2 + \bar{x}^2), \quad \frac{\partial^2 f}{\partial a \partial b}(a_0, b_0) = 2 \sum_{k=1}^n x_k = 2n\bar{x}, \quad \frac{\partial^2 f}{\partial b^2}(a_0, b_0) = 2n$$

より点 (a_0, b_0) での $f(a, b)$ のヘッセ行列は

$$H = \begin{pmatrix} 2n(s_x^2 + \bar{x}^2) & 2n\bar{x} \\ 2n\bar{x} & 2n \end{pmatrix}$$

であり,

$$\det H = 4n^2 s_x^2 > 0, \quad \text{Tr } H = 2n(s_x^2 + \bar{x}^2 + 1) > 0$$

より $f(a, b)$ は点 (a_0, b_0) で極小値を取る. ■