

回帰分析（単回帰）

麻生良文

1.回帰分析の前提

回帰分析は、説明変数 x と被説明変数 y の間の関係を統計的にとらえる手法です。説明変数が単一の変数である場合を単回帰(simple regression), 説明変数が複数個ある場合を重回帰(multiple regression)といいます。最初に単回帰モデルを説明します。

まず、次のようなモデルを想定します。

$$y = \alpha + \beta x + u \quad (1)$$

ここで、 α , β はある定数で、 u は確率変数です。つまり、 x が与えられると確定的な項 $\alpha + \beta x$ にランダムなショック u が加わって y が決まるというモデルを想定します。なお、 y , x , u は次のように呼ばれます。

- y : 被説明変数(explained variable), 従属変数(dependent variable), regressand
- x : 説明変数(explanatory variable), 独立変数(independent variable), regressor
- u : 誤差項(error term), 攪乱項(disturbance term)

例)

(Keynes 型消費関数)

$$C = \alpha + \beta YD + u$$

C : 民間消費, YD :可処分所得, β : 限界消費性向

(賃金の決定)

$$\text{wage} = \alpha + \beta \text{educ} + u$$

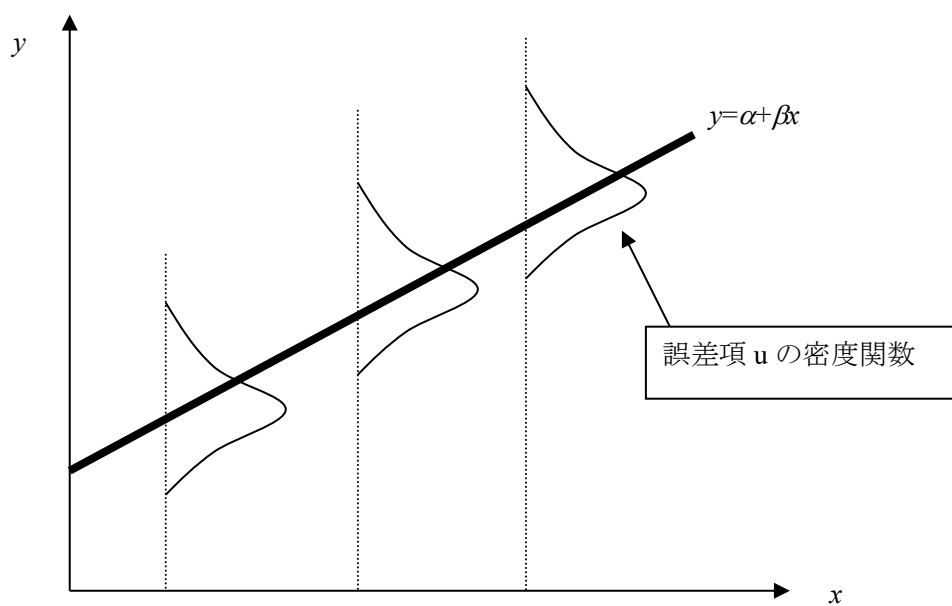
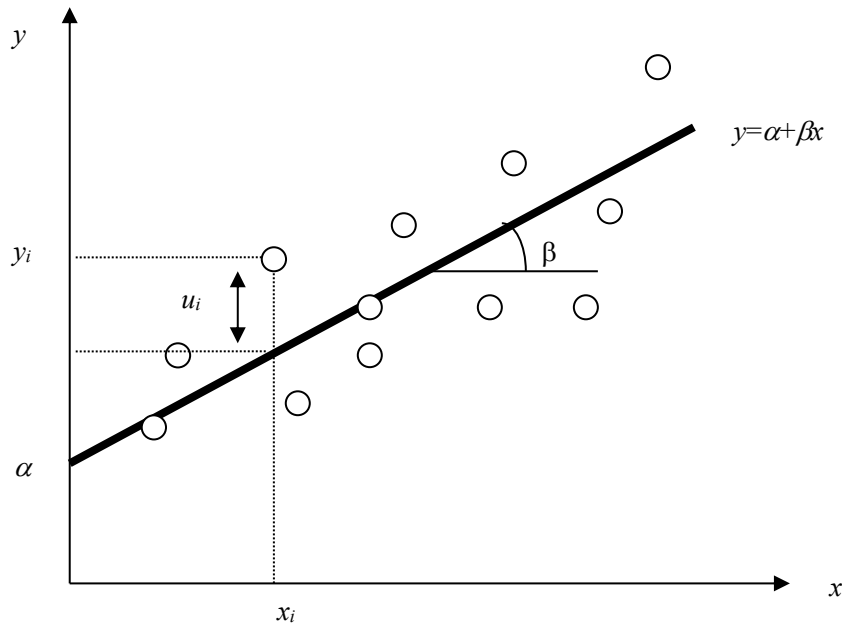
wage:賃金, educ:教育年数

モデルの特徴

- 線型モデルである。
- 線型モデルは制約的に感じられるかもしれないが、 x^2 を説明変数に含める、あるいは、 $\ln(x)$ などの変数変換を行うことで、 x の非線形効果を捉えることは可能である。
- x 以外の効果は誤差項に集約されている。それらは次のようなものである。
 - ✓ 他の変数、モデルで想定していない変数の効果
 - ✓ 観察不可能な変数の影響

✓ y の測定誤差

(x,y) の組み合わせが(1)式のような確率モデルにしたがって実現すると考えると、直線 $y = \alpha + \beta x$ と観測された点 (x,y) は次の図のような関係であると考えられます（上の図の○が観測された点を表し、下の図は誤差項の確率分布をイメージした図である）。



なお、重回帰(multiple regression)モデルは、複数の要因を同時に考慮するモデルで、次の式のようなモデルを想定する。

$$y = \alpha + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_k x_k + u \quad (2)$$

回帰分析の前提

観測された (x,y) をもとに α, β の値を推定するために、誤差項 u に次の仮定をおく。

(仮定 1) 線型性

真のモデルが次の方程式で表される。 α, β は(推定すべき未知の)パラメータで、 (x_i, y_i) は i 番目の観測値、 u_i は誤差の実現値である。

$$y_i = \alpha + \beta x_i + u_i \quad (A1)$$

(仮定 2) 誤差項の期待値は 0 (すべての i について)。

$$E(u_i) = 0 \quad (A2)$$

なお、(A1) 式において定数項が存在するため、誤差項の期待値が 0 であるという仮定は何ら制約的でないことに注意せよ(定数項で調整できる)。

(仮定 3) 誤差項の分散はすべての i について等しい(分散均一性 homoskedasticity)。

$$\text{var}(u_i) = \sigma^2 \quad (A3)$$

(仮定 4) 誤差項に系列相関は存在しない。すなわち、全ての $i \neq j$ に対し u_i と u_j の共分散は 0 である。

$$\text{cov}(u_i, u_j) = 0 \quad \text{for all } i \neq j \quad (A4)$$

(仮定 5) 説明変数と誤差項の独立性。

説明変数 x と誤差項 u は独立である。古典的回帰モデルにおいては、 x は非確率変数であると仮定される。その場合には自動的にこの仮定は満たされる。

なお、現在の教科書のほとんどは、 x を非確率変数とせず、 x が与えられた場合の誤差項の条件付分布について(仮定 2)以下が成り立つという前提で議論を進めている。

(仮定 6) 正規分布の仮定

誤差項の確率分布は正規分布に従う。

(仮定 2), (仮定 3), (仮定 4) とこの仮定をあわせると, 誤差項は互いに独立で同一の正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従う。すなわち,

$$u_i \sim N(0, \sigma^2) \quad i.i.d.$$

が成り立つ (*i.i.d.* は *independently identically distributed* の略)。

回帰分析は (A1) のようなモデルを仮定して, 観測されたデータから, パラメータ α, β を求める統計的手法である。観測されたデータは, (x, y) のとりうる値の一部でしかない (標本である)。また, 誤差項を含んだ確率モデルを想定しているので, 観測されたデータから何らかの方法で推定された a, b が真の値である保証はない。一般には, α, β の推定値は誤差項の確率分布の性質に依存して, ある確率分布に従うと考えられる。

POINT

- どのような方法でパラメータを推定することが望ましいのか。
- 推定されたパラメータがどのような確率分布に従うか。

以下では, 最小二乗法による推計を説明する (他にも, モーメント法, 最尤法などの推定方法がある)。最小二乗法に基づくパラメータの推計量は, BLUE (Best Linear Unbiased Estimator) という望ましい性質を備えている (説明は省略)。BLUE の性質は上の仮定 1 から仮定 5 まだが満たされる場合に成立する。仮定 6 の正規分布の仮定は, この性質を持つためには不要な (強すぎる) 仮定である。ただし, 推定されたパラメータについての仮説検定のためには, 誤差項の確率分布を特定化しなければならず, そのためには通常, 誤差項の正規分布を仮定する。この仮定から, 最小二乗法で得られたパラメータの推計量の確率分布が求められる。

2. 最小二乗法(method of least square)

パラメータ α, β の推定値を a, b で表す。第 i 番目の観測値が (x_i, y_i) であるとき, $\hat{y}_i = a + bx_i$ を y_i の推定値, fitted value, predicted value などと呼ぶ。そして, 実際の観測値と推定値の差を残差 (residual) と呼ぶ。残差を e_i は次の式で表される。

$$e_i = y_i - \hat{y}_i = y_i - (a + bx_i) \quad (3)$$

最小二乗法は残差の平方和を最小にするように、 a, b を決定するという手法である。次の式からわかるように、残差平方和は a, b の関数とみなすことができ、それを $S(a, b)$ で表すと

$$S(a, b) = \sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2 \quad (4)$$

となる。 $S(a, b)$ は (a, b) に関する 2 次関数である。 $S(a, b)$ を最小化する (a, b) を見つけるためには、 (a, b) に関して微分して最小化の必要条件を求めればよい（微分して 0 になることが必要条件だが、(4) 式の a^2 や b^2 の項の係数はプラスなので、最小化の十分条件でもある）。

まず、 a に関して微分すると

$$\frac{\partial S}{\partial a} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i) = 0$$

を得る。これから次の式が得られる。

$$\sum_{i=1}^n y_i = \sum_{i=1}^n a + b \sum_{i=1}^n x_i$$

さらに、この式の両辺を n で割れば

$$\bar{y} = a + b\bar{x} \quad (5)$$

が得られる。ここで、 $\bar{x} = \sum_i x_i / n, \bar{y} = \sum_i y_i / n$ で、それぞれ x, y の平均値を表す。

また、 b に関して微分すると

$$\frac{\partial S}{\partial b} = -2 \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i) x_i = 0$$

を得る。この式を変形すると次の式が求められる。

$$\sum_{i=1}^n x_i y_i = a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 \quad (6)$$

(5) 式と (6) 式は (a, b) に関する連立一次方程式である。この方程式を正規方程式 (normal equation) と呼ぶ。正規方程式の解が、最小二乗法による (α, β) の推計値になる。

最小二乗法の推計値を求めるため、(5) 式を a について解き、これを (6) 式に代入すると

$$\sum_i x_i y_i = (\bar{y} - b\bar{x}) \sum_i x_i + b \sum_i x_i^2 = n\bar{x}\bar{y} + b \left(\sum_i x_i^2 - n\bar{x}^2 \right)$$

を得る。この式から次の式が得られる。

$$S_{xy} = bS_{xx} \quad (7)$$

ただし、 S_{xx} は x の平均値の回りの平方和、 S_{xy} は x と y の平均値の回りのクロス・モーメントで次の式で与えられる。

$$S_{xx} = \sum_i (x_i - \bar{x})^2 = \sum_i x_i^2 - n\bar{x}^2$$

$$S_{xy} = \sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \sum_i x_i y_i - n\bar{x}\bar{y}$$

さて、(7)式より

$$b = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} \quad (8)$$

が求められ、これがパラメータ β の最小二乗法による推定値である。(8)式により b が求まると、 α の推定値は(5)式より、 $a = \bar{y} - b\bar{x}$ で求められる。

なお、残差(観測された y_i の値と y_i の予測値の差)は $e_i = y_i - (a + bx_i)$ で与えられるが、正規方程式の性質から

$$\sum_i e_i = 0 \quad (9)$$

$$\sum_i x_i e_i = 0 \quad (10)$$

が成立することがわかる(残差平方和の一階の条件をみよ)。(9)式および(10)式は、残差の平均が 0 (あるいは残差と定数項が無相関)、残差と説明変数 x が無相関であることを表している。

当てはまりの良さ

$y_i = a + bx_i + e_i$ から $\bar{y} = a + b\bar{x}$ を引くと

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

という関係が得られる。この式の両辺を平方し、 i について合計すると、次の式が得られる。

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 = b^2 \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 + \sum_{i=1}^n e_i^2 \quad (11)$$

なお、(11)式の導出において x_i と e_i の交差項が消えるのは、(10)式が成り立つからである。

(11)式の左辺は y の平均値の回りの平方和 (全体の平方和)、右辺の第1項は説明変数 x で説明される部分の平方和、右辺第2項は、残差の平方和を表す。全体の平方和を TSS(Total Sum of Squares)、説明変数で説明される部分の平方和を ESS(Explained Sum of Squares)、残差平方和を RSS(Residual Sum of Squares)で表すと、(11)式は

$$\mathbf{TSS = ESS + RSS} \quad (12)$$

と書き直すことができる。なお、TSS は y の平均値の回りの平方和なので、(8)式と同様の記号を用いると、 S_{yy} と表すことができる。

ESS を TSS で割った値は、全平方和のうち説明変数で説明される平方和の比率を表す。これを**決定係数**(coefficient of determination)といい、通常 R^2 で表す。 R^2 は次の式で定義される。

$$R^2 = \frac{ESS}{TSS} = 1 - \frac{RSS}{TSS} \quad (13)$$

R^2 は 0 から 1 の間の値をとる。 R^2 が 1 に近いほど、モデルの説明力が高いことになる。

なお、決定係数は x と y の相関係数を平方したものに等しい。これは次のことから確かめられる。まず、(8)式と(11)式から、ESS は次のように変形できる。

$$ESS = b^2 S_{xx} = \left(\frac{S_{xy}}{S_{xx}} \right)^2 S_{xx} = \frac{S_{xy}^2}{S_{xx}}$$

したがって、次の式が成り立つ。

$$R^2 = \frac{\text{ESS}}{\text{TSS}} = \frac{S_{xy}^2/S_{xx}}{S_{yy}} = \frac{S_{xy}^2}{S_{xx}S_{yy}}$$

この式は、 R^2 が x と y の相関係数の平方であることを示している。

最小二乗推定量(least square estimator)の確率的性質

(α, β) の推定値 (a, b) は y_i の実現値に依存して決定される（つまり、誤差項の実現値 u_i に依存して決定される）。事前には (a, b) はどの値が実現するかは確定せず、ある確率分布にしたがって実現する。 (a, b) が確率変数であることを強調する場合、 (a, b) を推定量(estimator)と呼ぶ。

最小二乗推定量の確率分布を求めてみよう。まず、(8)式から

$$b = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{1}{S_{xx}} \sum_i (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) = \frac{1}{S_{xx}} \sum_i (x_i - \bar{x})y_i = \sum_i c_i y_i \quad (14)$$

が成立する。ただし、

$$c_i \equiv \frac{x_i - \bar{x}}{S_{xx}}$$

である。つまり、最小二乗推定量 b は y_i の線型関数である。ここで、回帰モデルの仮定 6 までの全ての仮定が満たされるとすると、 b は正規分布に従うことがわかる。一方、 $a = \bar{y} - b\bar{x}$ より、

$$a = \frac{1}{n} \sum_i y_i - b\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_i y_i - \frac{\bar{x}}{S_{xx}} \sum_i (x_i - \bar{x})y_i = \sum_i d_i y_i \quad (15)$$

となる。ただし、

$$d_i \equiv \frac{1}{n} - \frac{\bar{x}(x_i - \bar{x})}{S_{xx}}$$

である。これから、 a も y_i の線型関数であり、正規分布に従うことがわかる。

(14)式、(15)式から、 (a, b) の期待値、分散が求められる。導出はやや面倒であるので、最初に結果だけを述べておこう。まず、期待値は次の通りになる。

$$\begin{aligned} E(a) &= \alpha \\ E(b) &= \beta \end{aligned}$$

これらの式は最小二乗推定量の期待値はパラメータの真の値に一致することを述べている。

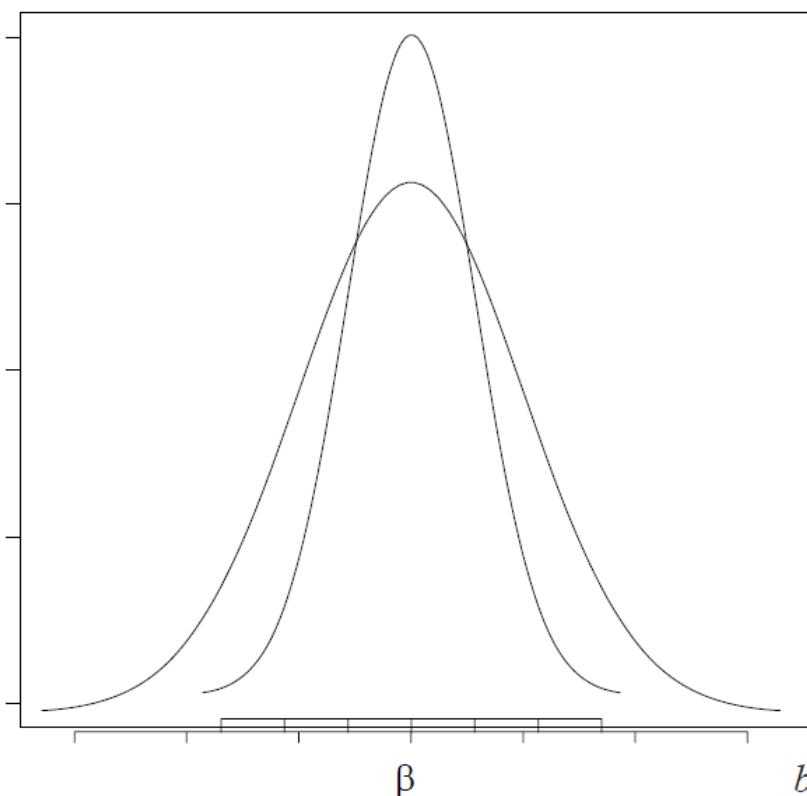
この性質を不偏性(unbiasedness)という。

また、分散、共分散は次の通りになる。

$$\begin{aligned}\text{var}(b) &= \frac{\sigma^2}{S_{xx}} \\ \text{var}(a) &= \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}} \right) \\ \text{cov}(a, b) &= \sigma^2 \left(-\frac{\bar{x}}{S_{xx}} \right)\end{aligned}$$

上の式によれば、 S_{xx} が大きいほど（ x のバラつきが大きいほど）、サンプル数 n が大きいほど、パラメータの a, b の分散は小さくなる。逆に言えば、 x のバラつきが少なかったり、サンプル数が十分でない場合には、パラメータの推定は不正確なものになる。

図 最小二乗推定量 b の分布



S_{xx} が大きいほど、 n が大きいほど、 $\text{var}(b)$ が小さくなる。

最小二乗推定量の確率分布の導出

(導出はやや面倒)

まず、真のモデルが

$$y_i = \alpha + \beta x_i + u_i$$

で与えられ、誤差項 u_i は互いに独立で同一な正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従うものとする。最小二乗推定量の期待値と分散・共分散を求めるためには、(14)式、(15)式の c_i 、 d_i の性質について最初に導いておくと都合がよい。まず、 c_i については

$$\begin{aligned}\sum_i c_i &= \frac{1}{S_{xx}} \sum_i (x_i - \bar{x}) = 0 \\ \sum_i c_i x_i &= \frac{1}{S_{xx}} \sum_i (x_i - \bar{x}) x_i = \frac{1}{S_{xx}} \sum_i (x_i - \bar{x})^2 = 1 \\ \sum_i c_i^2 &= \frac{1}{S_{xx}^2} \sum_i (x_i - \bar{x})^2 = \frac{1}{S_{xx}}\end{aligned}$$

が成立する。また、 d_i については

$$\begin{aligned}\sum_i d_i &= \sum_i \left(\frac{1}{n} - \frac{\bar{x}}{S_{xx}} (x_i - \bar{x}) \right) = 1 \\ \sum_i d_i x_i &= \sum_i \left(\frac{1}{n} - \frac{\bar{x}}{S_{xx}} (x_i - \bar{x}) \right) x_i = \bar{x} - \frac{\bar{x}}{S_{xx}} \sum_i (x_i - \bar{x})^2 = \bar{x} - \bar{x} = 0 \\ \sum_i d_i^2 &= \sum_i \left(\frac{1}{n} - \frac{\bar{x}}{S_{xx}} (x_i - \bar{x}) \right)^2 = \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}} - \frac{2\bar{x}}{nS_{xx}} \sum_i (x_i - \bar{x}) = \frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}\end{aligned}$$

が成立する。さらに、

$$\sum_i c_i d_i = \sum_i \left(\frac{x_i - \bar{x}}{S_{xx}} \right) \left(\frac{1}{n} - \frac{\bar{x}}{S_{xx}} (x_i - \bar{x}) \right) = -\frac{\bar{x}}{S_{xx}^2} \sum_i (x_i - \bar{x})^2 = -\frac{\bar{x}}{S_{xx}}$$

が成立する。

b の確率分布を求めるため、(14)式に $y_i = \alpha + \beta x_i + u_i$ を代入すると、

$$b = \sum_i c_i (\alpha + \beta x_i + u_i) = \alpha \sum_i c_i + \beta \sum_i c_i x_i + \sum_i c_i u_i = \beta + \sum_i c_i u_i$$

を得る (c_i の性質を参照せよ)。したがって、

$$E(b) = \beta + E\left(\sum_i c_i u_i\right) = \beta + \sum_i c_i E(u_i) = \beta$$

となり、 b の期待値が導かれた (2番目の等式が成立するのは期待値オペレータの線型性の性質より、また3番目の等式は誤差項に関する期待値が0であるから)。分散を求めると次の通りになる。

$$\text{var}(b) = E(b - \beta)^2 = E\left(\sum_i c_i u_i\right)^2 = \sigma^2 \sum_i c_i^2 = \frac{\sigma^2}{S_{xx}}$$

3番目の等号は、誤差項が互いに独立で同一の分布に従うという仮定から導かれる。すなわち、 $E(u_i^2) = \sigma^2$ と $E(u_i u_j) = 0$ が成り立つからである ($i \neq j$)。

a の期待値と分散も同様にして求められる。(15)式に $y_i = \alpha + \beta x_i + u_i$ を代入すると、

$$a = \sum_i d_i (\alpha + \beta x_i + u_i) = \alpha \sum_i d_i + \beta \sum_i d_i x_i + \sum_i d_i u_i = \alpha + \sum_i d_i u_i$$

が成り立つことがわかる (d_i の性質を参照せよ)。したがって、

$$E(a) = \alpha + E\left(\sum_i d_i u_i\right) = \alpha + \sum_i d_i E(u_i) = \alpha$$

$$\text{var}(a) = E(a - \alpha)^2 = E(\sum_i d_i u_i)^2 = \sigma^2 \sum_i d_i^2 = \sigma^2 \left(\frac{1}{n} + \frac{\bar{x}^2}{S_{xx}}\right)$$

が導かれる。さらに

$$\text{cov}(a, b) = E[(a - \alpha)(b - \beta)] = E\left[\left(\sum_i d_i u_i\right)\left(\sum_i c_i u_i\right)\right] = \sigma^2 \sum_i c_i d_i = \sigma^2 \left(-\frac{\bar{x}}{S_{xx}}\right)$$

が導かれる。なお、以上から最小二乗推定量の分散は誤差項の分散 σ^2 に依存することがわかる。ただし、 σ^2 は未知のパラメータであることに注意。

誤差項の分散 σ^2 の推定値

サンプル数 n , 説明変数 2 個の場合の (単回帰の場合, 説明変数 x と定数項で合計 2 個の説明変数があると考え), σ^2 の最小二乗推定量 s^2 は

$$s^2 = \frac{1}{n-2}RSS = \frac{1}{n-2} \sum_i e_i^2 \quad (16)$$

で与えられる。 $n-2$ は**自由度**(degrees of freedom)と呼ばれる。なお, s^2 の平方根は**標準誤差**(standard error)と呼ばれる。多くのソフトでは **SER** (回帰の標準誤差: standard error of the regression) として出力される。

残差平方和を n ではなく, $(n-2)$ で割るのは, そうすることで, s^2 が不偏性を持つからである。ここで,

$$\frac{RSS}{\sigma^2} = \sum_i \left(\frac{e_i}{\sigma}\right)^2 \quad (17)$$

は**自由度 $(n-2)$ のカイ二乗分布**にしたがう (この証明には行列の知識が必要なので省略)。自由度が $n-2$ であるのは, n 個の残差のうち独立に動ける次元が 2 つだけ少なくなるからである (最小二乗推定量を求めるための正規方程式(9), (10)式を参照せよ)。行列を用いた証明は, Greene の *Econometric Analysis* などを参照のこと。

自由度 m のカイ二乗分布に従う確率変数の期待値は m に等しい。これから, RSS/σ^2 の期待値は $(n-2)$ に等しく, したがって, (16)式で定義される誤差項の分散の推定量の期待値は真の分散 σ^2 に等しいことがわかる。

β に関する検定

次のような仮説 H_0 を考える。

$$H_0: \beta = \beta_0$$

多くの仮説検定では $\beta_0=0$ を H_0 とすることが多い。例えば, 賃金と教育年数の回帰分析で, 教育年数が賃金に影響しないという仮説は, 教育年数の係数が 0 に等しいという仮説検定の問題として考えることができる (もちろん, β_0 が 0 という特定の値である必要は無い)。

β の最小二乗推定量 b は, さきほど求めたように, 期待値 β , 分散 σ^2/S_{xx} の正規分布に従った。したがって, H_0 が正しいなら

$$\frac{b - \beta_0}{\sqrt{\sigma^2/S_{xx}}} \sim N(0, 1) \quad (18)$$

が成り立つ。ただし、 σ^2 は未知のパラメータなので、このままでは仮説検定に使えない。そこで、 σ^2 を先ほど求めた最小二乗推定量 s^2 で置き換える統計量を考えてみよう。すなわち、

$$\frac{b - \beta_0}{\sqrt{s^2/S_{xx}}} = \frac{b - \beta_0}{\text{s.e.}(b)} \quad (19)$$

を考える。(19)式の分母の $\sqrt{s^2/S_{xx}}$ は、推定量 b の標準偏差（分散の平方根）の推計値で、 b の標準誤差（standard error）と呼ばれる（ b の真の標準偏差は $\sqrt{\sigma^2/S_{xx}}$ であり、未知のパラメータ σ^2 に依存していた）。仮説 H_0 が真であれば、(19)式は自由度 $(n-2)$ の t 分布に従う。

t 分布の復習

z を標準正規分布、 x を自由度 m のカイ二乗分布に従う確率変数とし、 z と x は独立であるとしたりするとき、次の変数は自由度 m の t 分布に従う。

$$\frac{z}{\sqrt{x/m}} \sim t(m)$$

(19)式が自由度 $(n-2)$ の t 分布に従うことを説明する。まず、(18)式のように、 $\frac{b - \beta_0}{\sqrt{\sigma^2/S_{xx}}}$ は標準正規分布に従うので、これを z とする。次に、(17)式の RSS/σ^2 は自由度 $(n-2)$ のカイ二乗分布に従うので、これを x とする ($m=n-2$ である)。さらに、この z と x の分布は独立であることを示すことができる（この証明には行列の知識が必要。Greene 等の教科書を参照のこと）。したがって、 z と $\sqrt{x/m}$ の比を求めると

$$\frac{z}{\sqrt{x/m}} = \frac{\frac{b - \beta_0}{\sqrt{\sigma^2/S_{xx}}}}{\sqrt{\frac{RSS/\sigma^2}{n-2}}} = \frac{b - \beta_0}{\sqrt{\sigma^2/S_{xx}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{(RSS/\sigma^2)/(n-2)}} = \frac{b - \beta_0}{\sqrt{1/S_{xx}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{RSS/(n-2)}} = \frac{b - \beta_0}{\sqrt{s^2/S_{xx}}}$$

となり、(19)式に等しいことが示された。したがって(19)式は自由度 $(n-2)$ の t 分布に従うことがわかる。つまり、次の式が成立する。

$$\frac{b - \beta_0}{\sqrt{s^2/S_{xx}}} = \frac{b - \beta_0}{\text{s.e.}(b)} \sim t(n-2) \quad (20)$$

BLUE

最小二乗推定量 a, b は線型推定量(linear estimator)の一種である ((14)式, (15)式で表されるように確率変数 y の線型関数である)。また, 最小二乗推定量の期待値は真のパラメータ α, β に等しかった。つまり, 最小二乗推定量は不偏推定量(unbiased estimator)のクラスに属する。さらに, 最小二乗法は, 線型不偏推定量(linear unbiased estimator)のクラスに属する推定量の中で, 最小の分散を持つ推定量であることが知られている (証明は省略)。この性質を BLUE (best linear unbiased estimator: 最良線型不偏推定量) という。最小二乗法は, このような意味で望ましい推定量である。なお, BLUE という性質は, 誤差項が正規分布に従うという仮定なしに導かれる。

その他の推定方法

- モーメント法

$$\sum_i e_i = \sum_i (y_i - a - bx_i) = 0$$

$$\sum_i x_i e_i = \sum_i (y_i - a - bx_i)x_i = 0$$

を満たすようにパラメータ (a, b) を決める ($E(u)=0, \text{cov}(x, u)=0$ に対応)。今考えているケース ((1)式で表されるような線形モデル) では, 最小二乗法と同じになる。

- 最尤法(Maximum Likelihood Method)

まず, 真のモデルが

$$y_i = \alpha + \beta x_i + u_i$$

で与えられ, 誤差項 u_i は互いに独立で同一の正規分布 $N(0, \sigma^2)$ に従うものとする。さて, 今, (x_i, y_i) ($i=1, 2, \dots, n$) が観測されたとする。この時, x_i が与えられたもとで y_i が実現する確率密度関数 (条件付確率密度関数) は次の式で与えられる。

$$f(y_1, y_2, \dots, y_n | \mathbf{x}; \alpha, \beta, \sigma^2) = \prod_{i=1}^n \phi(u_i) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{u_i}{\sigma}\right)^2\right]$$

$$= \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma^2}(y_i - \alpha - \beta x_i)^2\right]$$

上の式で、 $\phi(u_i) = (\sqrt{2\pi\sigma^2})^{-1} \exp[-(u_i/\sigma)^2/2]$ は、期待値 0、分散 σ^2 の正規分布の確率密度関数である。また、 $\mathbf{x}=(x_1, x_2, \dots, x_n)$ である。

上の式を未知パラメータ α, β, σ^2 の関数とみなしたものは尤度関数(likelihood function)と呼ばれる。未知パラメータ α, β, σ^2 を a, b, s^2 に置き換えて、尤度関数を $L(a, b, s^2)$ で表せば、

$$L(a, b, s^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi s^2}} \exp\left[-\frac{1}{2s^2}(y_i - a - bx_i)^2\right]$$

となる。この尤度関数を最大にするように (a, b, s^2) を決める方法が最尤法(maximum likelihood method)である。簡単に言えば、観測された $(x_i, y_i)(i=1, 2, \dots, n)$ が実現するのは、確率分布を規定するパラメータがどのような値だともっともらしいかに基づいてパラメータを決定するのが最尤法である。

さて、上の尤度関数の対数をとると

$$\ln L(a, b, s^2 | \mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\frac{n}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln s^2 - \frac{1}{2s^2} \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2$$

と変形できる。これを対数尤度関数(log likelihood function)と呼ぶ。尤度の最大化と対数尤度の最大化の条件は同じなので、通常はこの対数尤度を最大にするようにパラメータを決める。今、考えている線型モデルの場合には、 (a, b) の決定は、

$$\sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2$$

の最小化条件を求めればよい。これは残差平方和の最小化条件を求めることだから、 (a, b) の最尤法による推計は最小二乗法と全く同じになる。 s^2 については対数尤度関数を s^2 で微分して0とおくと

$$-\frac{n}{2} \cdot \frac{1}{s^2} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{(s^2)^2} \sum_{i=1}^n (y_i - a - bx_i)^2 = -\frac{n}{2} \cdot \frac{1}{s^2} + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{s^2}\right)^2 \text{RSS} = 0$$

を得る。ただし $RSS = \sum_i e_i^2$ で残差平方和を表す。上の式を s^2 について解くと

$$s^2 = \frac{RSS}{n}$$

が求められる。

σ^2 についての最小二乗推定量は $RSS/(n-2)$ であったが、最尤推定量は RSS/n である。このため、 σ^2 の最尤推定量は不偏性を持たない。普遍性を持たないが、一致性(consistency)という性質を持っている(サンプル数の増加が、推定量の分布を真のパラメータの値に収束させる性質)。なお、サンプル数が大きい場合、 $n-2$ で割ろうが、 n で割ろうが、その差はほとんどなくなることに注意。

誤差項に関する確率分布を特定化すれば、最尤法は、線型モデルだけではなく、非線形モデルにも応用できる。このため、最尤法は広く用いられている。