

最小絶対値法による回帰直線の特徴づけ定理

尾 崎 雄一郎

1. はじめに

Roger J. Boscovich は 1755 年から 1770 年にかけて地球がどのような形状であるかという測地学上の論争に決着をつけようと、直線より上方に位置する観測値に対する偏差の和と下方に位置する観測値に対する偏差の和が等しく、すべての偏差の絶対値の和を最小にするという基準で回帰直線を求める問題を考え出し、それを独創的な幾何学的方法で解き、地球は赤道で膨らみ、両極で凹んだ楕円体であるという結論を確認するとともに、地球の中心から赤道までの半径の長さが地球の中心から両極までの半径の長さに比べてどれだけ長いかが計算した。¹ Laplace は同じ測地学上の問題を解くのに、最初は幾つかの偏差の絶対値の中の最大値を最小にする基準(Chebyshev 基準)を用いたけれども、1793 年から 1799 年にかけて Boscovich の基準を用いて彼とは異なる方法でその問題を解いた。²

Edgeworth [6] は、直線の上方に位置する観測値に対する偏差の和と下方に位置する観測値に対する偏差の和が等しくなければならないという Boscovich の条件を取り除いて、すべての観測値に対する偏差の絶対値の和を最小にするという基準だけで回帰直線を求める方法(最小絶対値法)を用い、図を利用して解く方法を示した。³ Rhodes [21] は Edgeworth による方法で 2 次の回帰曲線を求めた経験からこの方法は時間がかかり効率的ではないという感想をもち、Turner [30] も同じ見解である。Harris [14] と Karst [16] は各々最小絶対値法による回帰直線を求める効率的な逐次解法を提案している。⁴

Kelley [17] は Chebyshev 基準による回帰直線を求める問題を、Wagner [31] は Chebyshev 基準と最小絶対値法による回帰直線を求める問題をリニア・プログラミングの問題としてはじめて定式化した。また、尾崎 [20] は観測データの特定の点(観測値でなくてもよい)を通る Boscovich の基準による回帰直線を求める問題をリニア・プログラミングの問題として表し、これを双対定理を利用して解いた。

1 Boscovich の幾何学的解法については Eisenhart [8] と Stigler [28], pp.39-50 を参照するとよい。この他 Boscovich の方法については Farebrother [9], Harter [15], Part I, Sheynin [22], Todhunter [29], Vol. I, pp. 331-2 などとも参考になる。

2 Boscovich の方法に関する Laplace については Farebrother [9], Harter [15], Part II, Sheynin [22], Stigler [27], Stigler [28], pp.50-4, Todhunter [29], Vol. II, pp. 133-4, 206 などを参照のこと。

3 他に Edgeworth [4], [5], [7] も参照のこと。Edgeworth の図を利用した解法については Farebrother [9] による説明がわかり易い。

4 Karst の方法については Sposito [24], pp.153-7 に同じ説明がある。

最小絶対値法による定数項をもつ最適な回帰直線がもつ特徴として, Dufton [3] は(観測値の数が偶数であるとき)最適な回帰直線より上方にある観測値の数と下方にある観測値の数が等しいことを, Harris [14] は最適な回帰直線より上方にある観測値の数と下方にある観測値の数の差はこの回帰直線上にある観測値の数以下であることを, とともに数値例で示した. これら以外に最小絶対値法による定数項をもつ回帰直線(超平面)の興味深い幾つかの特徴が現在明らかにされている.⁵

最小絶対値法による回帰直線はリニアール・プログラミングを用いて解くことが多いけれども, データのサイズがそれほど大きくない場合には, 幾つかの特徴づけ定理を利用すればしばしば簡単な計算で最小絶対値法による回帰直線を求めることができる. 本論文において, 最小絶対値法による回帰直線に関する新しい幾つかの特徴づけ定理を明らかにするとともに, 既知の幾つかの定理についてもその内容を深めたり, 新しい証明を与える.

2. 最小絶対値法とリニアール・プログラミング

独立変数を x , 従属変数を y とし, x と y に関する m 個の観測値を

$$(x_i, y_i) \quad (i = 1, \dots, m)$$

とし, 求める回帰直線を

$$(1) \quad y = ax + b$$

とする. (1) と i 番目の観測値との偏差を e_i とし,

$$(2) \quad e_i = y_i - (ax_i + b) \quad (i = 1, \dots, m)$$

と定義する. 最小絶対値法によって (1) の a と b を求める問題は (2) の m 個の偏差の絶対値の和, すなわち偏差の L_1 ノルムである

$$(3) \quad \sum_{i=1}^m |e_i|$$

を最小にするという問題である. 符号の制約のない変数 e_i を 2 つの非負の変数の差として

$$e_i = e_i^+ - e_i^-, \quad e_i^+ \geq 0, \quad e_i^- \geq 0 \quad (i = 1, \dots, m)$$

と表すと, 同じ i について e_i^+ と e_i^- のうち少なくとも 1 つはゼロとすることができるから,

$$|e_i| = |e_i^+ - e_i^-| = e_i^+ + e_i^- \quad (i = 1, \dots, m)$$

と表せる. これより (2) の下で (3) を最小にする問題は,

$$(4) \quad f = \sum_{i=1}^m (e_i^+ + e_i^-)$$

を次の制約条件の下で最小にする

$$(5) \quad ax_i + b + e_i^+ - e_i^- = y_i, \quad e_i^+ \geq 0, \quad e_i^- \geq 0 \quad (i = 1, \dots, m)$$

というリニアール・プログラミングの問題に変換できる. ここで, 変数 a と b には符号の制約がなく, f は目的関数の値である. 主問題 (4)–(5) に対する双対問題は,

$$(6) \quad \sum_{i=1}^m y_i u_i$$

5 Appa and Smith [1], Gentle, Kennedy, and Sposito [12], [13], Sposito [23], pp.119–22, 142, Sposito [24], pp.136–45, Sposito and Smith [25], Sposito, Smith, and McCormick [26], pp.9–12, 20–7 など.

を次の制約条件の下で最大にする

$$(7) \quad \sum_{i=1}^m x_i u_i = 0, \quad \sum_{i=1}^m u_i = 0, \quad u_i \leq 1, \quad -u_i \leq 1 \quad (i=1, \dots, m)$$

と表せる.

3. 最小絶対値法による回帰直線の特徴づけ定理

本節で最小絶対値法による回帰直線の特徴づける定理を与え, 証明する.

定理 1. 主問題 (4)–(5) と双対問題 (6)–(7) の各々に最適解が存在する.

証明. 主問題において $a=b=0$ とし, $y_i \geq 0$ である i については $e_i^+ = y_i$, $e_i^- = 0$, また $y_i < 0$ である i については $e_i^+ = 0$, $e_i^- = -y_i$ と定めると, これらは (5) のすべての式を満たすから, 主問題の実行可能解である. 次に, 双対問題においてすべての i について $u_i = 0$ とすると, これらは (7) の式をすべて満たすから, 双対問題の実行可能解である. 主問題と双対問題の各々に実行可能解が存在するから, 双対定理の 1 つ⁶ によって主問題と双対問題の各々に最適解が存在する. $\square$

主問題の最適解を $a^*, b^*, e_i^* = e_i^{+*} - e_i^{-*}$ としたときの目的関数の最小値を f^* とすると,

$$f^* = \sum_{i=1}^m (e_i^{+*} + e_i^{-*})$$

であり, このときの (1) を

$$(8) \quad y = a^* x + b^*$$

と表す. (8) は最小絶対値法による最適な回帰直線である. (8) に対する偏差を用いて

$$(9) \quad I^+ = \{i \mid e_i^* > 0\}, \quad I^- = \{i \mid e_i^* < 0\}, \quad I^0 = \{i \mid e_i^* = 0\}$$

と定義し, これらに属する観測値の数を各々 N^+, N^-, N^0 とする. 同様に, 別の値 $a^{**}, b^{**}, e_i^{**} = e_i^{+**} - e_i^{-**}$ に対する目的関数の値を f^{**} とすると,

$$f^{**} = \sum_{i=1}^m (e_i^{+**} + e_i^{-**})$$

であり, このときの (1) を

$$(10) \quad y = a^{**} x + b^{**}$$

と表す. (10) は最適な回帰直線であるか, そうでないか, この時点では定めない. (9) と同様に,

$$(11) \quad J^+ = \{i \mid e_i^{**} > 0\}, \quad J^- = \{i \mid e_i^{**} < 0\}, \quad J^0 = \{i \mid e_i^{**} = 0\}$$

と定める. 以下において観測値の数は 3 個以上, すなわち $m \geq 3$ であるとし,

(A) 3 個以上の観測値が同一の直線上に並ぶことはない

という条件を設ける.⁷ 簡単化のために主問題の最適解に基づく最小絶対値法による回帰直線を以

6 たとえば Gale [10], pp.12, 78–9, Gass [11], p.162, Kolman and Beck [18], pp.174–6, Murty [19], p.193 など.

7 この条件は Appa and Smith [1], Sposito [24], Sposito, Smith, and McCormick [26] などによって用いられている.

下において L_1 回帰直線と呼ぶことにする.

定理2. L_1 回帰直線 (8) が観測値を通らない, すなわち $I^0 = \phi$ であるならば, 観測値の数 m は偶数であり,

$$(12) \quad \sum_{i \in I^+} x_i = \sum_{i \in I^-} x_i, \quad N^+ = N^-$$

が成立する. また, (8) に対する e_i^* と (10) に対する e_i^{**} との間に (9) と (11) を用いて

$$(13) \quad \begin{aligned} i &\in J^+ \cup J^0 & (i \in I^+ \text{ である } i \text{ に対して}) \\ i &\in J^- \cup J^0 & (i \in I^- \text{ である } i \text{ に対して}) \end{aligned}$$

が成立するならば, (10) も L_1 回帰直線である.

証明. L_1 回帰直線 (8) に対する双対問題の最適解を u_i^* とし, 相補弛緩定理⁸ を (7) に適用すると, $e_i^* > 0$ ならば $u_i^* = 1$ ($i \in I^*$), $e_i^* < 0$ ならば $u_i^* = -1$ ($i \in I^-$) であり, 仮定により $I^0 = \phi$ ($N^0 = 0$) であるから,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= N^+ - N^- = 0 \end{aligned}$$

が成り立ち, これらより (12) をえる. 次に, この2番目の式と $N^0 = 0$ を用いると,

$$m = N^+ + N^- + N^0 = 2N^+$$

となり, m は偶数でなければならない.

次に, $e_i^* > 0$ ならば,

$$e_i^{+*} = y_i - a^* x_i - b^* > 0, \quad e_i^{-*} = 0 \quad (i \in I^+)$$

であり, $e_i^* < 0$ ならば,

$$e_i^{+*} = 0, \quad e_i^{-*} = a^* x_i + b^* - y_i > 0 \quad (i \in I^-)$$

であり, $e_i^* = 0$ ならば,

$$e_i^{+*} = e_i^{-*} = 0 \quad (i \in I^0)$$

であるから, 目的関数 (4) の最小値 f^* は,

$$(14) \quad f^* = \sum_{i=1}^m (e_i^{+*} + e_i^{-*}) = \sum_{i \in I^+} e_i^{+*} + \sum_{i \in I^-} e_i^{-*} = \sum_{i \in I^+} (y_i - a^* x_i - b^*) + \sum_{i \in I^-} (a^* x_i + b^* - y_i)$$

と表せる. 同様に, (10) に対する目的関数の値 f^{**} も (9), (11), (13) に注意して

$$(15) \quad f^{**} = \sum_{i \in I^+} (y_i - a^{**} x_i - b^{**}) + \sum_{i \in I^-} (a^{**} x_i + b^{**} - y_i)$$

と表せる. (14) と (15) より

$$(16) \quad f^{**} - f^* = (a^* - a^{**}) \left(\sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i \right) + (b^* - b^{**}) (N^+ - N^-)$$

をえる. (16) の右辺は (12) よりゼロとなり,

$$f^{**} = f^*$$

8 たとえば Bertsimas and Tsitsiklis [2], pp.151-2, Gale [10], pp.19-20, 32, Gass [11], pp.168-70, Kolman and Beck [18], pp.178-9, Murty [19], pp.197-8 など.

となるから, (15) は目的関数 (4) の最小値に等しい. したがって, (13) を満たす (10) は L_1 回帰直線である. $\square$

定理 3. 観測値の数が奇数であるならば, すべての L_1 回帰直線は少なくとも 1 つの観測値を通る.

証明. 定理 2 の対偶より直ちに結論をえる. $\square$

定理 4. 唯一つの観測値を通る L_1 回帰直線が存在するとき, 同じ観測値を通りその偏差が条件 (13) を満たす任意の直線は L_1 回帰直線である.

証明. ある観測値を (x_1, y_1) , これを通る L_1 回帰直線を (8), 目的関数の最小値を f^* とする. この観測値を通り条件 (13) を満たす任意の直線 (10) が L_1 回帰直線であることを示す. 前と同様, (8) と (10) に対する偏差を各々 e_i^* , e_i^{**} とする. (8) と (10) が (x_1, y_1) を通ることから, $e_1^* = e_1^{**} = 0$ である. (8) に対する双対問題の最適解 u_i^* を用いて相補弛緩定理を (7) に適用すると,

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= x_1 u_1^* + \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= u_1^* + N^+ - N^- = 0 \end{aligned}$$

をえる. ここで, u_1^* の値は未知である. これらより

$$\begin{aligned} (17) \quad \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i &= -x_1 u_1^* \\ N^+ - N^- &= -u_1^* \end{aligned}$$

をえる. また, (8) と (10) がともに (x_1, y_1) を通ることから,

$$(18) \quad b^* - b^{**} = (a^{**} - a^*) x_1$$

が成立する. (10) が (13) を満たすことより定理 2 の証明と同様にして (16) をえる. (16) に (17) と (18) を代入すると,

$$f^{**} - f^* = (a^* - a^{**}) (-x_1 u_1^*) + (a^{**} - a^*) (-x_1 u_1^*) = 0$$

となる. これより (10) に対する目的関数の値 f^{**} は最小値 f^* に等しいので, (10) も L_1 回帰直線である. $\square$

定理 5. 与えられた観測値の中の 2 個を通る, すなわち

$$(19) \quad N^0 = 2$$

である L_1 回帰直線が存在する.

証明. L_1 回帰直線を (8) とし, 最初 (8) が観測値を全く通らないものとする. 定理 2 より (8) に対して I^+ に属する観測値と I^- に属する観測値の間を通り (13) を満たす任意の直線は L_1 回帰直線であるから, (A) を考慮すると a^{**} と b^{**} を適当に選ぶことにより (19) を満たす L_1 回帰を求めることができる. 次に, L_1 回帰直線が 1 つの観測値を通るものとする. 定理 4 より (13) を満たす任意の直線は L_1 回帰直線であるから, (A) に注意すると a^{**} と b^{**} を適当に選ぶことにより (19) を満たす L_1 回帰直線を求めることができる. $\square$

定理6. 任意の L_1 回帰直線に対して

$$(20) \quad |N^+ - N^-| = 0, 1, 2$$

が成立する. 特に, (19) を満たす L_1 回帰直線に対して

$$(21) \quad |N^+ - N^-| = 0, 2$$

であるための必要十分条件は, m が偶数であることであり,

$$(22) \quad |N^+ - N^-| = 1$$

であるための必要十分条件は m が奇数であることである.

証明. 双対問題の最適解 u_i^* に対して (7) の2番目の式より

$$\sum_{i \in I^+} u_i^* + \sum_{i \in I^-} u_i^* + \sum_{i \in I^0} u_i^* = 0$$

であるから, これと(A)より

$$|N^+ - N^-| = \left| \sum_{i \in I^0} u_i^* \right| \leq 2$$

となる. この左辺は整数でなければならないから, (20) をえる. 他方,

$$(23) \quad m = N^+ + N^- + N^0$$

であり, (21) が成立するならば,

$$(21') \quad N^+ = N^-, \quad N^+ = N^- + 2, \quad N^+ = N^- - 2$$

のいずれかが成立するから, (19) が成立するとき, (23) と (21') より

$$m = N^+ + N^- + N^0 = \begin{cases} 2(N^+ + 1) & (N^+ = N^- \text{ のとき}) \\ 2N^+ & (N^+ = N^- + 2 \text{ のとき}) \\ 2(N^+ + 2) & (N^+ = N^- - 2 \text{ のとき}) \end{cases}$$

となり, いずれの場合にも m は偶数でなければならない. 逆に, (19) と (23) を用いると,

$$(24) \quad |N^+ - N^-| = |m - 2(N^- + 1)|$$

となる. (24) より m が偶数ならば, $N^+ - N^-$ も偶数になり, (20) を考慮して (21) をえる.

次に, (22) が成立するならば,

$$(22') \quad N^+ - N^- = 1, \quad N^+ - N^- = -1$$

のいずれかが成立するから, (19) が成立するとき, (22') より

$$m = N^+ + N^- + N^0 = \begin{cases} 2N^+ + 1 & (N^+ = N^- + 1 \text{ のとき}) \\ 2N^+ + 3 & (N^+ = N^- - 1 \text{ のとき}) \end{cases}$$

となり, m は奇数でなければならない. 逆に, (24) を用いると m が奇数ならば, $N^+ - N^-$ も奇数となり, (20) に注意すると (22) をえる. □

なお, (A) が成立しても (19) が成立せず, $N^0 = 0$ や 1 である L_1 回帰直線については, m が偶数であっても

$$|N^+ - N^-| = 1$$

となるものや, 奇数であっても

$$|N^+ - N^-| = 0$$

となるものがある.

定理 7. (20) が成立しない直線は L_1 回帰直線ではない. さらに, (19) が成立するとき, m が偶数であって (21) が成立しない, 奇数であって (22) が成立しない直線は L_1 回帰直線ではない.

証明. 定理 6 より直ちに結論をえる. $\square$

(8) と (10) 各々を主問題の最適解に対応する L_1 回帰直線であるとし, これらに基づく偏差に対して

$$\begin{aligned} K^+ &= \{i \mid e_i^* > 0, e_i^{**} > 0\} = I^+ \cap J^+ \\ K^- &= \{i \mid e_i^* < 0, e_i^{**} < 0\} = I^- \cap J^- \\ K^0 &= \{i \mid e_i^* > 0, e_i^{**} < 0\} \cup \{i \mid e_i^* < 0, e_i^{**} > 0\} \end{aligned}$$

と定義し, これらに属する観測値の数を各々 M^+ , M^- , M^0 とする.

定理 8. 主問題の最適解が多重解であるとき, 任意の 2 つの L_1 回帰直線の間に観測値が存在することはない, すなわち $K^0 = \emptyset$ である.

証明. 2 つの L_1 回帰直線の間に観測値が存在するとして矛盾を導く. 任意の 2 つの L_1 回帰直線を (8) と (10) とすると, これらの凸結合である.

$$(25) \quad y = \hat{a}x + \hat{b}, \quad \hat{a} = \theta a^* + (1-\theta)a^{**}, \quad \hat{b} = \theta b^* + (1-\theta)b^{**}$$

も $0 \leq \theta \leq 1$ である任意の θ に対して L_1 回帰直線である. もし 2 つの L_1 回帰直線の間に観測値が存在するならば, (25) において θ を 2 つ適当に選ぶことによって, (i) 導出された 2 つの L_1 回帰直線が平行で, これらは観測値を通らず, これらの間に観測値が存在する, (ii) 導出された 2 つの L_1 回帰直線が交差し, その交点が観測値であり, 2 つの L_1 回帰直線はこれ以外に観測値を通らず, (A) を考慮してこれらの L_1 回帰直線の間に唯 1 つの観測値が存在する, (iii) 導出された 2 つの L_1 回帰直線が交差し, これらは全く観測値を通らず, (A) よりたかだか 2 つの観測値が 2 つの L_1 回帰直線の間に存在する, といういずれかの場合に帰着できる. 以後簡単化のために (25) から θ の値によって導出され, いま述べた条件を満たす 2 つの L_1 回帰直線を (8) と (10) 自身とする.

(i) (8) と (10) が平行で, (8) が (10) の下方にあるとする. このとき, (8) に対応する双対問題の最適解 u_i^* を用いて, 相補弛緩定理を (7) に適用すると,

$$\sum_{i=1}^m u_i^* = M^+ - M^- + M^0 = 0$$

が成立し, (10) に対応する双対問題の最適解 u_i^{**} を用いて同様に

$$\sum_{i=1}^m u_i^{**} = M^+ - M^- - M^0 = 0$$

が成立する. これらより $M^0 = 0$ でなければならない.

(ii) (8) と (10) の交点に一致する観測値を (x_1, y_1) , 2 つの L_1 回帰直線の間にある 1 つの観測値を (x_2, y_2) とし, 簡単化のためにこの観測値は (8) の上方, (10) の下方にあるものとする ($x_1 \neq x_2$). (8) に対応する u_i^* を用いると, (x_2, y_2) は (8) の上方にあるので, $u_2^* = 1$ であり, (7) より

$$(26) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= \sum_{i \in K^+} x_i - \sum_{i \in K^-} x_i + x_1 u_1^* + x_2 = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= M^+ - M^- + u_1^* + 1 = 0 \end{aligned}$$

が成立する. 同様に, (10)に対応する u_i^{**} を用いると, (x_2, y_2) は (10) の下方にあるので, $u_2^{**} = -1$ であり,

$$(27) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^{**} &= \sum_{i \in K^+} x_i - \sum_{i \in K^-} x_i + x_1 u_1^{**} - x_2 = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^{**} &= M^+ - M^- + u_1^{**} - 1 = 0 \end{aligned}$$

が成立する. (26) と (27) より次の2つの式

$$\begin{aligned} x_1(u_1^{**} - u_1^*) &= 2x_2 \\ u_1^{**} - u_1^* &= 2 \end{aligned}$$

をえ, これらより $x_1 = x_2$ をえるが, これは仮定に矛盾する.

(iii) (8) と (10) が全く観測値を通らず, したがってこれらの交点も観測値でないとき, これらの L_1 回帰直線の間にある観測値が唯1つであるならば, (ii) の場合と同じようにして矛盾を導ける. (A) に注意して2つの観測値がこれらの間にあるとき, (a) 2つの観測値がともに (8) の上方(下方), (10) の下方(上方)にある場合と, (b) 1つの観測値は (8) の上方で (10) の下方にあり, もう1つは (8) の下方で (10) の上方にある場合に分けられる. (a) の場合, (8) に対応する u_i^* を (7) に適用して

$$\sum_{i=1}^m u_i^* = M^+ - M^- + 2 = 0$$

となり, (10) に対応する u_i^{**} を用いて

$$\sum_{i=1}^m u_i^{**} = M^+ + M^- - 2 = 0$$

となるけれども, これらは明らかに矛盾している. (b) の場合, 1つの観測値 (x_1, y_1) は (8) の上方で (10) の下方にあり, もう1つの観測値 (x_2, y_2) は (8) の下方で (10) の上方にあるとする ($x_1 \neq x_2$). (8) に対応する u_i^* を (7) に用いて

$$\sum_{i=1}^m x_i u_i^* = \sum_{i \in K^+} x_i - \sum_{i \in K^-} x_i + x_1 - x_2 = 0$$

となり, (10) に対応する u_i^{**} を用いると,

$$\sum_{i=1}^m x_i u_i^{**} = \sum_{i \in K^+} x_i - \sum_{i \in K^-} x_i - x_1 + x_2 = 0$$

となる. これらより $x_1 = x_2$ をえるが, これは仮定に反する.

以上いずれの場合にも任意の2つの L_1 回帰直線の間に観測値は存在しない. $\square$

補助定理 1. 主問題 (4)–(5) の最適解が一意であるとき, 双対問題 (6)–(7) の最適解も一意である.

証明. 主問題の一意の最適解に対応する L_1 回帰直線を (8) とする. 定理 5 によりこれは2つの観測値, たとえば (x_1, y_1) と (x_2, y_2) を通る ($x_1 \neq x_2$). このとき, 双対問題に2組の最適解 u_i^* と u_i^{**} が存在すると仮定し, 相補弛緩定理を (7) に適用すると, (9) を用いて

$$u_i^* = u_i^{**} = 1 \quad (i \in I^+), \quad u_i^* = u_i^{**} = -1 \quad (i \in I^-)$$

が成立する. さらに, (7) に u_i^* を用いて

$$(28) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i + x_1 u_1^* + x_2 u_2^* = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= N^+ - N^- + u_1^* + u_2^* = 0 \end{aligned}$$

また u_i^{**} を用いて

$$(29) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^{**} &= \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i + x_1 u_1^{**} + x_2 u_2^{**} = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^{**} &= N^+ - N^- + u_1^{**} + u_2^{**} = 0 \end{aligned}$$

が成立する. (28) と (29) より次の 2 つの式

$$\begin{aligned} x_1(u_1^{**} - u_1^*) &= x_2(u_2^* - u_2^{**}) \\ u_1^{**} - u_1^* &= u_2^* - u_2^{**} \end{aligned}$$

をえる. ここで, $x_1 \neq x_2$ に注意すると,

$$u_1^* = u_1^{**}, \quad u_2^* = u_2^{**}$$

となる. 以上よりすべての i について $u_i^* = u_i^{**}$ が成立するので, 双対問題の最適解は一意である. $\square$

補助定理 2. 主問題の最適解が多重解であって, 2 つの L_1 回帰直線上に観測値が全く存在しない場合, 双対問題の最適解は一意である.

証明. 2 つ L_1 回帰直線を (8) と (10) とする. これらは平行であっても, 交わっていてもよい. 定理 8 よりこれらの直線の間に観測値は存在しないし, ここでの仮定よりこれらの直線上にも観測値が存在しないから, すべての観測値は先に定義した K^+ か K^- のいずれかに属する. (8) に対応する双対問題の最適解 u_i^* , (10) に対応する u_i^{**} を用いて相補弛緩定理を (7) に適用すると,

$$u_i^* = u_i^{**} = 1 \quad (i \in K^+), \quad u_i^* = u_i^{**} = -1 \quad (i \in K^-)$$

であるから, 双対問題の最適解は一意である. $\square$

補助定理 3. 主問題の最適解が多重解で, (i) 2 つの L_1 回帰直線がある観測値の上で交わり, 両直線はこれ以外の観測値を通らない, (ii) 1 つの L_1 回帰直線上に 1 つの観測値が存在し, 他方の L_1 回帰直線上には観測値が全く存在しない, といういずれの場合にも双対問題の最適解は一意である.

証明. 2 つの L_1 回帰直線を (8) と (10) とする. (i) これらの交点を (x_1, y_1) とし, (8) に対応する u_i^* , (10) に対応する u_i^{**} を用いると, $i = 1$ を除いて

$$u_i^* = u_i^{**} \quad (i = 2, \dots, m)$$

が成立する. 定理 8 に注意し, u_i^* を (7) に適用すると,

$$\sum_{i=1}^m u_i^* = M^+ - M^- + u_1^* = 0$$

が成立し, 同様に u_i^{**} を用いると,

$$\sum_{i=1}^m u_i^{**} = M^+ - M^- + u_1^{**} = 0$$

が成立する。これらより

$$u_1^* = u_1^{**}$$

をえる。以上よりすべての i について $u_i^* = u_i^{**}$ が成立する。

(ii) の場合についても同様に証明できるので、証明を省略する。 $\square$

補助定理 4. 主問題の最適解が多重解であるとする。(i) 2つの観測値を通る L_1 回帰直線と観測値を全く通らない別の L_1 回帰直線があり、後者の直線は前者の直線上の2つの観測値の上方(下方)にある、(ii) 2つの観測値を通る L_1 回帰直線とこれらの観測値のいずれかを通してこの直線と交わり、この交点以外に他の観測値を通らない別の L_1 回帰直線がある、(iii) 2つの観測値を通る L_1 回帰直線とこれらの観測値の間でこの直線と交わる別の L_1 回帰直線があり、後者の回帰直線上には観測値が存在しない、(iv) 2つの交差する L_1 回帰直線の各々が異なった唯一つの観測値を通り、各々の回帰直線から見れば他方の回帰直線上の観測値がともにその上方(下方)にある、(v) 2つの L_1 回帰直線の各々が異なった唯一つの観測値を通り、一方の回帰直線上の観測値から見れば、他方の回帰直線がその上方(下方)にあり、他方の回帰直線上の観測値から見れば、もう一方の回帰直線がその下方(上方)にある、といういずれの場合にも双対問題の最適解は一意である。

証明. (i) と (iii) の場合は、(ii) の場合と同じ様に証明できるので、証明を省略する。

(ii) 2つの観測値 (x_1, y_1) , (x_2, y_2) を通る L_1 回帰直線を (8) とし、(8) と (x_1, y_1) のところで交わってこれ以外に他の観測値を通らない L_1 回帰直線を (10) とする(このとき、 $x_1 \neq x_2$ である)。(10) は簡単化のために (x_2, y_2) の上方にあるとする。(8) に対応する u_i^* と (10) に対応する u_i^{**} より $i = 1, 2$ を除くすべての i について $u_i^* = u_i^{**}$ が成立する。(7) に u_i^* を適用すると、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= \sum_{i \in K^+} x_i - \sum_{i \in K^-} x_i + x_1 u_1^* + x_2 u_2^* = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= M^+ - M^- + u_1^* + u_2^* = 0 \end{aligned}$$

が成立し、同様に u_i^{**} を用いると、 (x_2, y_2) が (10) の下方にあるので、

$$u_2^{**} = -1$$

であり、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^{**} &= \sum_{i \in K^+} x_i - \sum_{i \in K^-} x_i + x_1 u_1^{**} - x_2 = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^{**} &= M^+ - M^- + u_1^{**} - 1 = 0 \end{aligned}$$

が成立する。これらより次の2つの式

$$\begin{aligned} x_1 u_1^* + x_2 u_2^* &= x_1 u_1^{**} - x_2 \\ u_1^* + u_2^* &= u_1^{**} - 1 \end{aligned}$$

をえ、 $x_1 \neq x_2$ に注意すると、

$$u_1^* = u_1^{**}, \quad u_2^* = -1$$

をえる。したがって、すべての i について $u_i^* = u_i^{**}$ である。

(iv) 2つの L_1 回帰直線を (8) と (10) とする。これらの凸結合である (25) は、定理 8 より $0 < \theta < 1$

である任意の θ に対して、観測値を通らない L_1 回帰直線である。(8)とこのような(25)の関係と、(10)とこのような(25)の関係はともに補助定理3の(ii)の場合に帰着する。このとき、双対問題の最適解は(8)と(25)の間で、また(10)と(25)の間で一意であるから、(8)と(10)の間でも一意である。

(v) この場合も(iv)の場合と同じようにして補助定理3の(ii)の場合に行き着き、双対問題の最適解は一意である。□

補助定理5. 主問題の最適解が多重解であるとする。(i) 観測値の上で交わる2つの L_1 回帰直線上に各々別の観測値が存在し、いずれの回帰直線から見ても他方の回帰直線上の観測値がその上方(下方)にある、(ii) 観測値の上で交わる2つの L_1 回帰直線上に各々別の観測値が存在し、一方の回帰直線から見れば他方の回帰直線上の観測値がその上方(下方)に、もう一方の回帰直線から見れば他方の回帰直線上の観測値がその下方(上方)にある、といういずれの場合にも双対問題の最適解は一意である。

証明. (i) と(ii) いずれの場合にも2つの L_1 回帰直線を(8)と(10)とし、これらの凸結合で $0 < \theta < 1$ である任意の θ に対応する第3の L_1 回帰直線を(25)とすると、(8)と(25)の関係、(10)と(25)の関係は、定理8を考慮して各々補助定理4の(ii)の場合に帰着する。このとき、双対問題の最適解は(8)と(25)の間で、(10)と(25)の間で一意であるから、(8)と(10)の間でも双対問題の最適解は一意である。□

補助定理6. 主問題の最適解が多重解であるとする。(i) 2つの観測値を通る2つの L_1 回帰直線があり、一方の回帰直線から見れば他方の回帰直線上の2つの観測値はその上方に、他方の回帰直線から見ればもう一方の回帰直線上の2つの観測値はその下方にある、(ii) 2つの観測値を通る2つの L_1 回帰直線が観測値でないところで交わり、各々の回帰直線から見ても他方の回帰直線上の1つの観測値がその上方に、もう1つの観測値がその下方にある、といういずれの場合にも双対問題の最適解は一意である。

証明. いずれの場合にも2つの L_1 回帰直線を(8)と(10)とし、これらの凸結合で $0 < \theta < 1$ である任意の θ に対応する第3の L_1 回帰直線を(25)とする。(i)の場合、(8)と(10)は平行であっても、なくてもよい。(8)と(25)、また(10)と(25)の関係は各々補助定理4の(i)の場合に帰着し、(ii)の場合は各々補助定理4の(iii)の場合に帰着する。したがって、これらいずれの場合にも、(8)と(25)に関して、また(10)と(25)に関して双対問題の最適解は一意であるから、(8)と(10)に関しても双対問題の最適解は一意である。□

定理9. 双対問題(6)–(7)の最適解は一意である。

証明. (A)と定理8を考慮すると、主問題(4)–(5)の最適解のすべてのタイプに該当する補助定理1から6によって双対問題の最適解は一意である。□

定理10. 観測値の数が奇数で、主問題の最適解が多重解であるならば、すべての L_1 回帰直線は

共通の1つの観測値を通る.

証明. 任意の2つの L_1 回帰直線が平行であるか, あるいは交差していても交点が観測値でない場合には, これらの L_1 回帰直線の凸結合である L_1 回帰直線の中から観測値を全く通らないものを選ぶことができる. しかし, これは定理3に矛盾する. したがって, すべての L_1 回帰直線は観測値上で交わらなければならない. 任意の L_1 回帰直線を (8) とすると, 定理3よりこれは少なくとも1つの観測値を通る. 別の任意の L_1 回帰直線は今述べた理由により (8) が通る観測値の上で (8) と交わらなければならない. (8) が唯一つの観測値を通る場合には, すべての L_1 回帰直線がこの観測値を通ることになり, 求める結果がえられる.

次に, (A) を考慮して (8) が2つの観測値たとえば (x_1, y_1) と (x_2, y_2) を通る L_1 回帰直線であるとき, ある L_1 回帰直線 η は (8) と (x_1, y_1) のところで交わり, 別の L_1 回帰直線 ξ は (8) と (x_2, y_2) のところで交わると仮定する. このとき, η と ξ の凸結合として表される直線も (8) と交わる L_1 回帰直線であるが, これらの凸結合の仕方を適当に選ぶことによって (8) との交点が観測値でないようにすることができ, 先の結果に矛盾する. ゆえに, (8) が2つの観測値を通るとき, 他のすべての L_1 回帰直線はこれらの中の共通の1つの観測値を通らなければならない. $\square$

定理 11. 観測値の数が奇数であるとき, L_1 回帰直線が多重解であるための必要十分条件は, L_1 回帰直線上にある観測値 (x_g, y_g) に対応する双対変数の値がゼロであること, すなわち

$$(30) \quad u_g^* = 0 \quad (g \in I^0)$$

が成立することである.

証明. (必要性) L_1 回帰直線が多重解であるならば, 定理10よりすべての L_1 回帰直線を通る共通の観測値 (x_g, y_g) がある. これらの回帰直線の中に (x_g, y_g) を通り, 他の観測値を通らないものが存在する. このような L_1 回帰直線を (8), これに対する双対問題の最適解を u_i^* とし, 相補弛緩定理を (7) の2番目の式に適用すると,

$$\sum_{i=1}^m u_i^* = N^+ - N^- + u_g^* = 0 \quad (g \in I^0)$$

をえる. 観測値の数 m が奇数であるから, $N^+ - N^-$ は偶数でなければならないけれども, $|N^+ - N^-| = 2$ であるならば, 上式より $|u_g^*| = 2$ となって, (7) の最後の2つの式に矛盾する. ゆえに, $N^+ - N^- = 0$ でなければならず, これと上式より (30) をえる.

(十分性) (30) が成立すると仮定する. 定理5に注意して (8) が (x_g, y_g) と (x_h, y_h) を通る L_1 回帰直線であるとする. これより $g, h \in I^0$ であり, (30) に注意して (7) より

$$(31) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i + x_h u_h^* = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= N^+ - N^- + u_h^* = 0 \end{aligned}$$

をえる. 次に, (x_g, y_g) だけを通り, (9) と (11) に基づいて

$$(32) \quad J^+ = I^+, \quad J^- = I^- \cup \{h\}, \quad J^0 = \{g\}$$

である J^+, J^-, J^0 を満たす任意の直線を (10) とし, (10) が L_1 回帰直線であることを示し, 主問題の最適解が多重解であることを証明する. L_1 回帰直線 (8) に対する目的関数 (4) の最小値 f^* は,

$$f^* = \sum_{i \in I^+} (y_i - a^* x_i - b^*) + \sum_{i \in I^-} (a^* x_i + b^* - y_i) \quad (g, h \in I^0)$$

と表せ、(10) に対する目的関数 (4) の値は、(32) に注意して

$$f^{**} = \sum_{i \in I^+} (y_i - a^{**} x_i - b^{**}) + \sum_{i \in I^-} (a^{**} x_i + b^{**} - y_i) + a^{**} x_h + b^{**} - y_h$$

と表せる。これらより

$$(33) \quad f^{**} - f^* = (a^* - a^{**}) \left(\sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i \right) + (b^* - b^{**}) (N^+ - N^-) + a^{**} x_h + b^{**} - y_h$$

をえる。(33) の右辺は (31) を用い、さらに (8) に対して $h \in I^0$ であるから、 $y_h = a^* x_h + b^*$ であることを用いると、

$$(a^* - a^{**}) (-x_h u_h^*) + (b^* - b^{**}) (-u_h^*) + a^{**} x_h + b^{**} - y_h = (u_h^* + 1) (a^{**} x_h + b^{**} - y_h)$$

と表せる。ここで、(11) と (32) の $h \in J^-$ を考慮して相補弛緩定理を用いると、 $u_h^* = -1$ であるから、上式の値はゼロになる。ゆえに、(33) より

$$f^{**} = f^*$$

が成立する。これより (10) に対する目的関数 (4) の値 f^{**} は (8) に対する目的関数の最小値 f^* に等しいので、 (x_g, y_g) だけを通る (10) も L_1 回帰直線であり、したがって主問題の最適解は多重解である。□

定理 12. 観測値の数が奇数であるとき、主問題の最適解が一意であるための必要十分条件は、 L_1 回帰直線上の観測値 (x_g, y_g) と (x_h, y_h) に対応する最適な双対変数に対して

$$(34) \quad |u_g^* + u_h^*| = 1, \quad |u_g^*| \neq 1, \quad |u_h^*| \neq 1 \quad (g, h \in I^0)$$

が成立することである。

証明。(十分性) (34) が成立するならば、 $u_g^* \neq 0$ 、 $u_h^* \neq 0$ であるから、定理 11 より主問題の最適解は一意である。

(必要性) 主問題の最適解が一意であるならば、定理 5 より L_1 回帰直線は 2 つの観測値 (x_g, y_g) 、 (x_h, y_h) を通り、定理 6 の (22) より

$$|u_g^* + u_h^*| = \left| \sum_{i \in I^+} u_i^* + \sum_{i \in I^-} u_i^* \right| = |N^+ - N^-| = 1$$

が成立する。主問題の最適解が一意であるから、定理 11 より $u_g^* \neq 0$ 、 $u_h^* \neq 0$ であり、これらより (34) をえる。□

定理 13. 観測値の数が偶数で、 L_1 回帰直線が多重解であるならば、観測値を全く通らない、すなわち $I^0 = \emptyset$ である L_1 回帰直線が存在する。

証明。2 つの L_1 回帰直線の凸結合として (25) で表される L_1 回帰直線の中から観測値を全く通らないか、唯 1 つの観測値を通るものを選ぶ。後者の場合、さらに観測値を通らない L_1 回帰直線が存在することを示せば、証明は完了する。簡単化のために後者の唯 1 つの観測値たとえば (x_g, y_g) を通る L_1 回帰直線を (8) とし、(8) に対する双対問題の最適解を u_i^* とすると、(7) と (9) より

$$(35) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i + x_g u_g^* = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= N^+ - N^- + u_g^* = 0 \end{aligned}$$

となる. (35) の 2 番目の式と仮定の $N^0 = 1$ より

$$m = N^+ + N^- + N^0 = 2N^+ + 1 + u_g^*$$

をえる. これと m が偶数であることから, (7) の最後の 2 つの式を考慮して

$$u_g^* = \pm 1$$

でなければならない.

(i) $u_g^* = 1$ である場合, (35) より

$$(35') \quad \begin{aligned} \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i &= -x_g \\ N^+ - N^- &= -1 \end{aligned}$$

となる. このとき, (8) に対して (4) の値は,

$$f^* = \sum_{i \in I^+} (y_i - a^* x_i - b^*) + \sum_{i \in I^-} (a^* x_i + b^* - y_i) \quad (g \in I^0)$$

である. ここで,

$$J^+ = I^+ \cup \{g\}, \quad J^- = I^-, \quad J^0 = \phi$$

を満たす任意の直線を (10) とし, (10) が L_1 回帰直線であることを示す. 上の定義により (10) は観測値を通らない. (10) に対する目的関数 (4) の値 f^{**} は,

$$f^{**} = \sum_{i \in I^+} (y_i - a^{**} x_i - b^{**}) + \sum_{i \in I^-} (a^{**} x_i + b^{**} - y_i) + y_g - a^{**} x_g - b^{**}$$

と表される. したがって, (35') を用いて

$$\begin{aligned} f^{**} - f^* &= (a^* - a^{**}) \left(\sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i \right) + (b^* - b^{**}) (N^+ - N^-) + y_g - a^{**} x_g - b^{**} \\ &= (a^* - a^{**}) (-x_g) - (b^* - b^{**}) + y_g - a^{**} x_g - b^{**} \\ &= y_g - a^* x_g - b^* \end{aligned}$$

となるが, (8) が (x_g, y_g) を通ることから, 最後の値はゼロとなる. ゆえに,

$$f^{**} = f^*$$

となり, (10) は観測値を通らない L_1 回帰直線である.

(ii) $u_g^* = -1$ である場合も, (i) の場合と同様に証明できる. □

定理 2 と 13 より, (A) の下で観測値の数が偶数であるとき, L_1 回帰直線が多重解であるための必要十分条件は $I^0 = \phi$ を満たす L_1 回帰直線が存在することである.

定理 14. 観測値の数が偶数であるとき, L_1 回帰直線が多重解であるための必要十分条件は, 2 つの観測値 (x_g, y_g) と (x_h, y_h) を通る L_1 回帰直線に対応する最適な双対変数の値が

$$(36) \quad |u_g^*| = |u_h^*| = 1 \quad (g, h \in I^0)$$

となることである.

証明. (十分性) 上記 2 つの観測値を通る L_1 回帰直線を (8) とし, (36) が成立すると仮定する.

(i) $u_g^* = u_h^* = 1$ である場合, (8) に対して (7) と (9) より

$$(37) \quad \begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i + x_g + x_h = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= N^+ - N^- + 2 = 0 \end{aligned}$$

が成立する. このとき, 目的関数 (4) の最小値 f^* は,

$$f^* = \sum_{i \in I^+} (y_i - a^* x_i - b^*) + \sum_{i \in I^-} (a^* x_i + b^* - y_i)$$

である. ここで,

$$J^+ = I^+ \cup \{g, h\}, J^- = I, J^0 = \phi$$

を満たす任意の直線を (10) とし, (10) が L_1 回帰直線であることを示す. (10) に対する目的関数 (4) の値 f^{**} は, この場合

$$f^{**} = \sum_{i \in I^+} (y_i - a^{**} x_i - b^{**}) + \sum_{i \in I^-} (a^{**} x_i + b^{**} - y_i) + y_g - a^{**} x_g - b^{**} + y_h - a^{**} x_h - b^{**}$$

となるから,

$$f^{**} - f^* = (a^* - a^{**}) \left(\sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i \right) + (b^* - b^{**}) (N^+ - N^-) + y_g - a^{**} x_g - b^{**} + y_h - a^{**} x_h - b^{**}$$

となる. (8) が (x_g, y_g) と (x_h, y_h) を通ることと (37) より

$$\begin{aligned} f^{**} - f^* &= (a^{**} - a^*) (x_g + x_h) - 2(b^* - b^{**}) + y_g - a^{**} x_g - b^{**} + y_h - a^{**} x_h - b^{**} \\ &= y_g - a^* x_g - b^* + y_h - a^* x_h - b^* = 0 \end{aligned}$$

となる. これより

$$(38) \quad f^{**} = f^*$$

が成立する. (38) より (10) に対する f^{**} は (8) に対する (4) の最小値 f^* に等しいので, (10) も L_1 回帰直線である.

(ii) $u_g^* = 1, u_h^* = -1$ ($u_g^* = -1, u_h^* = 1$) である場合や (iii) $u_g^* = u_h^* = -1$ である場合も同様に証明できるので, 証明を省略する.

(必要性) この場合, 定理 13 より $I^0 = \phi$ である L_1 回帰直線が存在する. このような L_1 回帰直線に対して $I^+ \cup I^- = \{1, \dots, m\}$ であり, 相補弛緩定理を (7) に適用して

$$u_i^* = 1 \quad (i \in I^+), \quad u_i^* = -1 \quad (i \in I^-)$$

をえる. このとき, 定理 5 より 2 つの観測値たとえば (x_g, y_g) と (x_h, y_h) を通る L_1 回帰直線が存在し, 定理 9 より双対問題の最適解は一意であるから, (x_g, y_g) と (x_h, y_h) に対しても u_g^* と u_h^* は 1 か -1 であり, したがって (36) をえる. $\square$

定理 15. ある L_1 回帰直線に対して

$$(39) \quad |N^+ - N^-| = 2$$

が成立するならば, この L_1 回帰直線が通る 2 つの観測値 (x_g, y_g) と (x_h, y_h) に対する最適な双対変数の値は,

$$(40a) \quad u_g^* = u_h^* = 1 \quad (g, h \in I^0)$$

あるいは

$$(40b) \quad u_g^* = u_h^* = -1 \quad (g, h \in I^0)$$

のいずれかが成立し, この逆も成立する.

証明. 相補弛緩定理を (7) に適用すると,

$$\sum_{i=1}^m u_i^* = N^+ - N^- + u_g^* + u_h^* = 0 \quad (g, h \in I^0)$$

が成立する. ここで, (39)を仮定すると, $N^+ - N^- = -2$ ならば (40a) が, $N^+ - N^- = 2$ ならば (40b) が成立する. 逆に, (40a) あるいは (40b) が成立するならば, 上式より (39) が成立する. $\square$

定理 16. ある L_1 回帰直線に対して

$$(39) \quad |N^+ - N^-| = 2$$

が成立するならば, このとき

$$(41) \quad |N^+ - N^-| = 0$$

である別の L_1 回帰直線が存在し, この回帰直線上の 1 つの観測値に対応する最適な双対変数の値は 1 で, もう 1 つの観測値に対応する値は -1 である. また, この逆も成立する.

証明. ある L_1 回帰直線に対して (39) が成立すると仮定する. この L_1 回帰直線を (8) とし, (8) が通る 2 つの観測値を (x_g, y_g) と (x_h, y_h) , (8) に対応する最適な双対変数の値を u_i^* とする.

(i) $N^+ = N^- - 2$ である場合, 定理 15 の証明におけるように (40a) が成立し, (4) と (7) より

$$(42) \quad \begin{aligned} f^* &= \sum_{i \in I^+} (y_i - a^* x_i - b^*) + \sum_{i \in I^-} (a^* x_i + b^* - y_i) \\ \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= \sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i + x_g + x_h = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= N^+ - N^- + 2 = 0 \end{aligned}$$

をえる. 他方, (x_g, y_g) を中心にして (8) を初めて I^- に属している観測値たとえば (x_k, y_k) に出会うまで回転させ, えられた直線を (10) とし, (10) が L_1 回帰直線で, (41) を満たすことを示す. ここで, k は I^- から J^0 に属するようになり, h は簡単化のために I^0 から J^+ に属するようになるとすると,

$$(43) \quad J^+ = I^+ \cup \{h\}, J^- = I^- \setminus \{k\}, J^0 = \{g, k\}$$

である. (10) に対する目的関数 (4) の値は, $k \in I^-$ であるが, $k \in J^0$ より $y_k = a^{**} x_k + b^{**}$ であることに注意して,

$$f^{**} = \sum_{i \in I^+} (y_i - a^{**} x_i - b^{**}) + \sum_{i \in I^-} (a^{**} x_i + b^{**} - y_i) + y_h - a^{**} x_h - b^{**}$$

となる. (8) が (x_g, y_g) と (x_h, y_h) を通り, (10) が (x_g, y_g) を通ることと (42) を用いると,

$$\begin{aligned} f^{**} - f^* &= (a^* - a^{**}) \left(\sum_{i \in I^+} x_i - \sum_{i \in I^-} x_i \right) + (b^* - b^{**}) (N^+ - N^-) + y_h - a^{**} x_h - b^{**} \\ &= (a^{**} - a^*) (x_g + x_h) + 2(b^{**} - b^*) + y_h - a^{**} x_h - b^{**} \\ &= a^{**} x_g + b^{**} - y_g + y_h - a^{**} x_h - b^{**} = 0 \end{aligned}$$

となる. したがって, f^{**} は f^* に等しく, (10) は L_1 回帰直線である. さらに, (43) より (10) の上方に位置する観測値の数は $N^+ + 1$ に, 下方に位置するものの数は $N^- - 1$ に変化する. この場合, (42) の最後の式より $N^+ + 1 = N^- - 1$ であるから, L_1 回帰直線 (10) に対して (41) が成立することになる. さらに, 上で見たように $g \in I^0$ に対して (40a) が成立するから, $u_g^* = 1$ であり, $k \in I^-$ であるから, $u_k^* = -1$ (これらは定理 9 より一意) である.

(ii) $N^+ = N^- + 2$ である場合についても同様に証明できる.

逆は, (41) が (x_g, y_g) と (x_h, y_h) に対して成立すると仮定して, これら 2 点を通る L_1 回帰直線を (x_g, y_g) あるいは (x_h, y_h) を中心に上に述べたのと逆の方向に回転させれば, (39) をえる. $\square$

定理 17. 観測値の数が偶数であるとき, L_1 回帰直線が一意であるための必要十分条件は, L_1 回帰直線が通る 2 個の観測値 (x_g, y_g) と (x_h, y_h) に対応する最適な双対変数の値に対して

$$(44) \quad -1 < u_g^* = -u_h^* < 1 \quad (g, h \in I^0)$$

が成立することである. L_1 回帰直線が一意であるならば, $N^+ = N^-$ が成立する.

証明. (必要性) L_1 回帰直線が一意であるとする. このとき, (7) より

$$\sum_{i=1}^m u_i^* = N^+ - N^- + u_g^* + u_h^* = 0 \quad (g, h \in I^0)$$

が成立する. 観測値の数が偶数であるから, 定理 6 より $N^+ = N^- \pm 2$ または $N^+ = N^-$ が成立する. 前者の場合, 上式より $u_g^* = u_h^* = \mp 1$ となり, 定理 14 より主問題の最適解が多重解になって仮定に反する. したがって, $N^+ = N^-$ が成立しなければならない. このとき, 上式より

$$u_g^* + u_h^* = 0$$

であり, 定理 14 に注意すると, $-1 < u_g^* < 1$, $-1 < u_h^* < 1$ でなければならない. 以上より (44) をえる.

(十分性) (44) が成立すると仮定すると, 定理 14 より L_1 回帰直線は一意である. □

定理 18. 観測値の数が奇数であり, 主問題の最適解が多重解であるならば, 主問題に 2 つの最適な基底解に対応する L_1 回帰直線が存在する.

証明. この場合, 定理 10 よりすべての L_1 回帰直線が通る共通の観測値 (x_g, y_g) が存在する. このとき, (x_g, y_g) だけを通り, 他の観測値を通らない L_1 回帰直線については (x_g, y_g) を中心にして初めて別の観測値に出会うまでこの直線の傾きを大きく, また小さくしてえられる 2 つの直線はともに (x_g, y_g) を通り, もう 1 つの観測値は互いに異なるから, これらは 2 つの異なった基底解に対応する L_1 回帰直線である. また, 2 つの観測値を通る L_1 回帰直線に対しては, 定理 11 の証明からわかるように観測値 (x_g, y_g) を中心にその傾きを大きくするか, 小さくすると 2 つの観測値を通る別の基底解に対応する L_1 回帰直線がえられる. □

定理 19. 観測値の数が偶数で, 主問題の最適解が多重解であるならば, 主問題には少なくとも 3 つの最適な基底解に対応する L_1 回帰直線が存在する.

証明. この場合, 定理 6 の (21) が成立する. 主問題の最適解が多重解であるならば, 定理 16 より (39) が成立する L_1 回帰直線と (41) が成立する L_1 回帰直線が存在する. 定理 16 の証明の中で示したように 2 つの観測値 (x_g, y_g) と (x_h, y_h) を通る L_1 回帰直線を (x_g, y_g) を中心にして (x_h, y_h) から離れて初めて別の観測値たとえば (x_k, y_k) に出会うまで適切な方向に回転させると, 第 2 の L_1 回帰直線をえることができる (定理 13, 14, 16 の証明を参照). 同様に, (x_h, y_h) を中心にして (x_g, y_g) から離れて初めて別の観測値に出会うところまで適切な方向に回転させると, 第 3 の L_1 回帰直線がえられる. 第 2 の L_1 回帰直線を (x_g, y_g) とともに決定する (x_k, y_k) と, 第 3 の L_1 回帰直線を (x_h, y_h) とともに決定する観測値が (x_k, y_k) に等しいときには 3 つの最適な基底解が存在し, (x_h, y_h) とともに第 3 の L_1 回帰直線を決定する観測値が (x_k, y_k) に等しくないときには, この観測値と (x_k, y_k) を通る第 4 の L_1 回帰直線が存在する. □

主問題の最適解が多重解で (8) と (10) が各々最適な基底解に対応する L_1 回帰直線であるとし、これらは共通の観測値 (x_θ, y_θ) を通るものとする。このとき、

$$\begin{aligned} G_1^+ &= \{ i \mid y_i \geq a^* x_i + b^*, y_i \geq a^{**} x_i + b^{**}, x_i > x_\theta \} \\ G_1^- &= \{ i \mid y_i \leq a^* x_i + b^*, y_i \leq a^{**} x_i + b^{**}, x_i > x_\theta \} \\ G_2^+ &= \{ i \mid y_i \geq a^* x_i + b^*, y_i \geq a^{**} x_i + b^{**}, x_i < x_\theta \} \\ G_2^- &= \{ i \mid y_i \leq a^* x_i + b^*, y_i \leq a^{**} x_i + b^{**}, x_i < x_\theta \} \end{aligned}$$

と定義し、

$$G^+ = G_1^+ \cup G_2^+, \quad G^- = G_1^- \cup G_2^-$$

とし、 G^+ に属する観測値の数を H^+ 、 G^- に属する観測値の数を H^- とする。

定理 20. 2つの異なった最適な基底解に対応する L_1 回帰直線が共通の観測値 (x_θ, y_θ) を通るならば、

$$(45) \quad \sum_{i \in G^+} (x_i - x_\theta) = \sum_{i \in G^-} (x_i - x_\theta)$$

あるいは同じことであるが、

$$(46) \quad \sum_{i \in G_1^+} (x_i - x_\theta) + \sum_{i \in G_2^-} (x_\theta - x_i) = \sum_{i \in G_1^-} (x_i - x_\theta) + \sum_{i \in G_2^+} (x_\theta - x_i)$$

が成立する。

証明. 最初、観測値の数が奇数である場合、双対問題の最適解 u_i^* に対して定理 11 より $u_\theta^* = 0$ であり、 L_1 回帰直線 (8) と (10) の凸結合として表される L_1 回帰直線から (x_θ, y_θ) だけを通して、他の観測値を通らないものを選ぶことができる。定理 9 より双対問題の最適解が一意であることに注意し、このような L_1 回帰直線に対して相補弛緩定理を適用すると、

$$u_i^* = 1 \quad (i \in G^+), \quad u_i^* = -1 \quad (i \in G^-)$$

であり、(7) より

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= \sum_{i \in G^+} x_i - \sum_{i \in G^-} x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= H^+ - H^- = 0 \end{aligned}$$

をえる。この最初の式を用いて

$$\sum_{i \in G^+} (x_i - x_\theta) + H^+ x_\theta = \sum_{i \in G^-} (x_i - x_\theta) + H^- x_\theta$$

をえる。2番目の式を用いると、これより (45) あるいは (46) をえる。

次に、観測値の数が偶数である場合、主問題の最適解が多重解であることから、定理 15 より

$$|u_\theta^*| = 1$$

が成立する。これより、(i) $u_\theta^* = 1$ である場合、(7) より、

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m x_i u_i^* &= x_\theta + \sum_{i \in G^+} x_i - \sum_{i \in G^-} x_i = 0 \\ \sum_{i=1}^m u_i^* &= 1 + H^+ - H^- = 0 \end{aligned}$$

をえる。最初の式を用いて

$$x_g + \sum_{i \in G^+} (x_i - x_g) + H^+ x_g = \sum_{i \in G^-} (x_i - x_g) + H^- x_g$$

と表せる. 2 番目の式を用いると, これから (45) あるいは (46) をえる. (ii) $u_g^* = -1$ である場合も, 同様に証明できる. $\square$

4. 数値例

本節で最小絶対値法による回帰直線を数値例で求め, それらの特徴について検証する.

例題 1. 5 個の観測値を順に

$$(1, 1), (2, 3), (4, 1), (5, 4), (7, 4)$$

として L_1 回帰直線を求める. このために,

$$f = \sum_{i=1}^5 (e_i^+ + e_i^-)$$

を次の制約条件の下で最小にする

$$a + b + e_1^+ - e_1^- = 1$$

$$2a + b + e_2^+ - e_2^- = 3$$

$$4a + b + e_3^+ - e_3^- = 1$$

$$5a + b + e_4^+ - e_4^- = 4$$

$$7a + b + e_5^+ - e_5^- = 4$$

$$e_i^+ \geq 0, e_i^- \geq 0 \quad (i = 1, \dots, 5)$$

というリニアール・プログラミングの問題を解く. この双対問題は,

$$u_1 + 3u_2 + u_3 + 4u_4 + 4u_5$$

を次の制約条件の下で最大にする

$$u_1 + 2u_2 + 4u_3 + 5u_4 + 7u_5 = 0$$

$$u_1 + u_2 + u_3 + u_4 + u_5 = 0$$

$$u_i \leq 1, -u_i \leq 1 \quad (i = 1, \dots, 5)$$

と表せる. この問題を解くと L_1 回帰直線は,

$$y = \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}$$

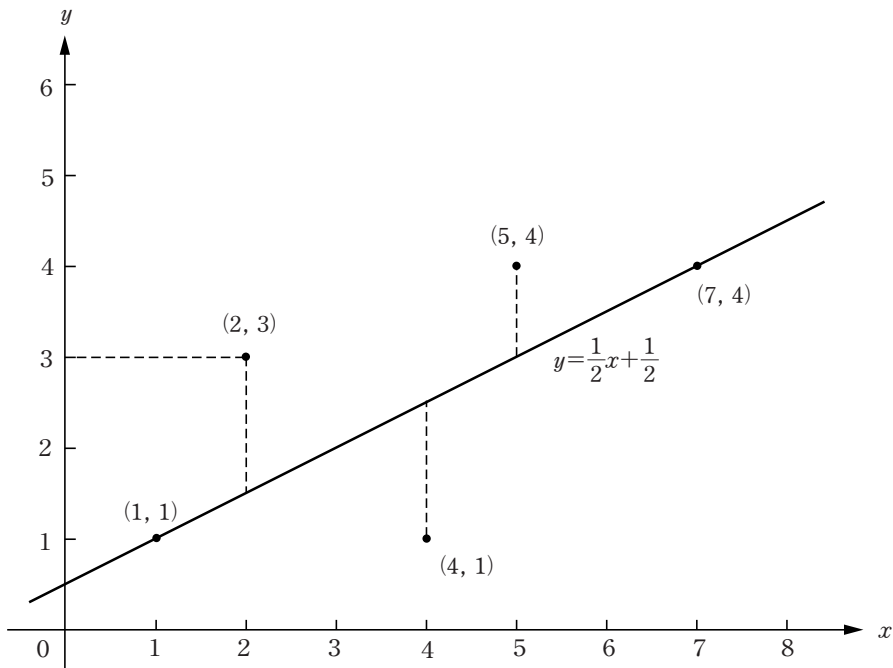
であり, 各々の観測値に対する偏差と主問題の目的関数の最小値 f^* は,

$$e_1^* = 0, e_2^* = \frac{3}{2}, e_3^* = -\frac{3}{2}, e_4^* = 1, e_5^* = 0, f^* = 4$$

である (第 1 図参照). 双対問題の最適解は,

$$u_1^* = -\frac{2}{3}, u_2^* = 1, u_3^* = -1, u_4^* = 1, u_5^* = -\frac{1}{3}$$

である. この L_1 回帰直線は 2 つの観測値 (1, 1) と (7, 4) を通り (定理 5), (2, 3) と (5, 4) はこの回帰直線の上方に, (4, 1) は下方にあるので, $N^+ - N^- = 1$ である (定理 6). また, 双対問題の最適解は一意であり (定理 9), $u_1^* + u_5^* = -\frac{2}{3} - \frac{1}{3} = -1$ であるから, L_1 回帰直線も一意である (定理 12).



第1図

例題2. 4個の観測値を順に

$$(1, 1), (2, 1), (3, 4), (5, 5)$$

として L_1 回帰直線を求める. これらより L_1 回帰直線は

$$y = x$$

であり, 各々の観測値に対する偏差と偏差の絶対値の和 f^* は,

$$e_1^* = 0, e_2^* = -1, e_3^* = 1, e_4^* = 0, f^* = 2$$

である(第2図を参照). 双対問題の最適解は,

$$u_1^* = \frac{1}{4}, u_2^* = -1, u_3^* = 1, u_4^* = -\frac{1}{4}$$

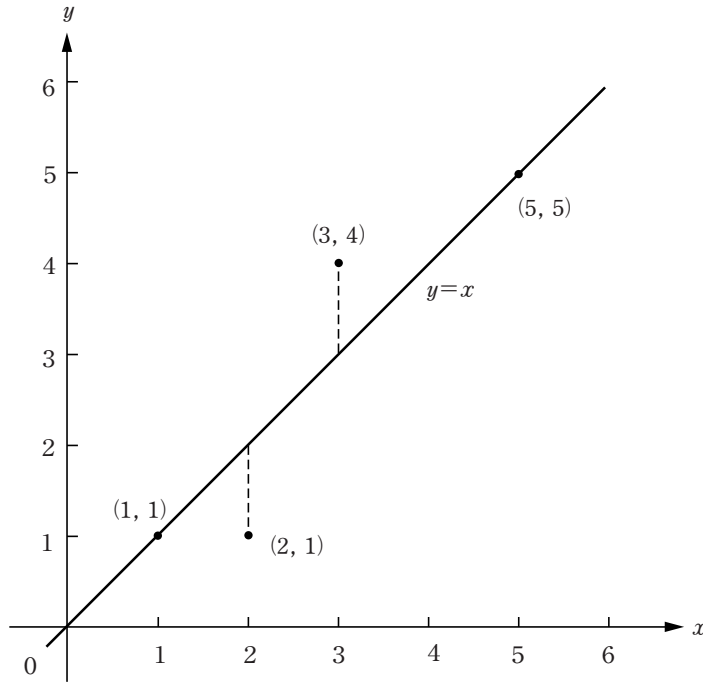
である. この L_1 回帰直線は2つの観測値 $(1, 1)$ と $(5, 5)$ を通り(定理5), $(3, 4)$ はこの上方に, $(2, 1)$ は下方にあるので, $N^+ = N^-$ が成立する(定理6). 双対問題の最適解は一意であり(定理9), $-1 < u_1^* = -u_4^* = \frac{1}{4} < 1$ であるから, L_1 回帰直線は一意である(定理17).

例題3. 5個の観測値を順に

$$(1, 1), (3, 3), (4, 2), (6, 5), (8, 2)$$

として L_1 回帰直線を求める. このとき, L_1 回帰直線は多重解で,

$$y = \frac{1}{3}x + \frac{2}{3}$$



第2図

に対する偏差と偏差の絶対値の和は,

$$e_1^* = 0, e_2^* = \frac{4}{3}, e_3^* = 0, e_4^* = \frac{7}{3}, e_5^* = -\frac{4}{3}, f^* = 5$$

である. また, 別の L_1 回帰直線

$$y = 2$$

に対して

$$e_1^{**} = -1, e_2^{**} = 1, e_3^{**} = 0, e_4^{**} = 3, e_5^{**} = 0, f^{**} = 5$$

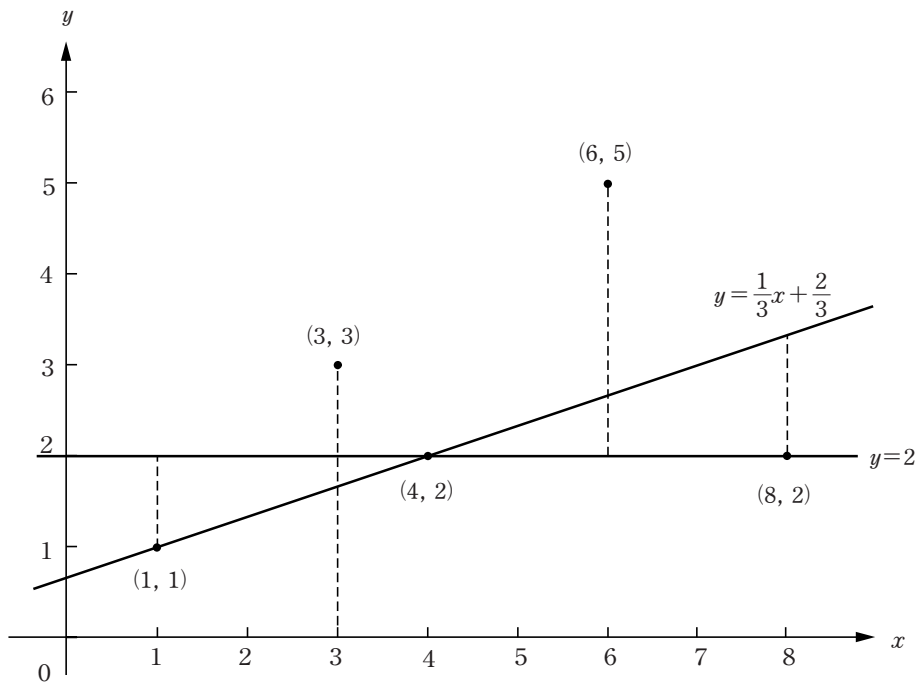
である(第3図を参照). 双対問題の最適解は,

$$u_1^* = -1, u_2^* = 1, u_3^* = 0, u_4^* = 1, u_5^* = -1$$

であり, 一意である(定理9). 前者の L_1 回帰直線は(1, 1)と(4, 2)を通り(定理5), (3, 3)と(6, 5)はこれより上方に, (8, 2)は下方にあるので, $N^+ - N^- = 1$ が成立する(定理6). 後者の L_1 回帰直線は(4, 2)と(8, 2)を通り, (3, 3)と(6, 5)はこれより上方にあり, また(1, 1)は下方にあるので, やはり $N^+ - N^- = 1$ が成立する. これら2つの L_1 回帰直線の間に観測値は存在しない(定理8). この場合, L_1 回帰直線はすべて(4, 2)を通り(定理10), この観測値に対応する最適な双対変数は $u_3^* = 0$ である(定理11). 最適な基底解は2つあり(定理18), $g = 3$ であり, $G_1^+ = \{4\}$, $G_1^- = \{5\}$, $G_2^+ = \{2\}$, $G_2^- = \{1\}$ であるから,

$$(x_4 - x_3) + (x_3 - x_1) = 5 = (x_5 - x_3) + (x_3 - x_2)$$

が成立する(定理20).



第3図

例題4. 4個の観測値を順に

$$(0, 4), (2, 3), (2, 4), (4, 0)$$

として L_1 回帰直線を求める. この場合, L_1 回帰直線は多重解で,

$$y = -\frac{1}{2}x + 4$$

に対する偏差と偏差の絶対値の和は,

$$e_1^* = 0, e_2^* = 0, e_3^* = 1, e_4^* = -2, f^* = 3$$

であり, 別の L_1 回帰直線

$$y = -x + 4$$

に対して偏差とその絶対値の和は,

$$e_1^{**} = 0, e_2^{**} = 1, e_3^{**} = 2, e_4^{**} = 0, f^{**} = 3$$

であり, さらに別の L_1 回帰直線

$$y = -\frac{3}{2}x + 6$$

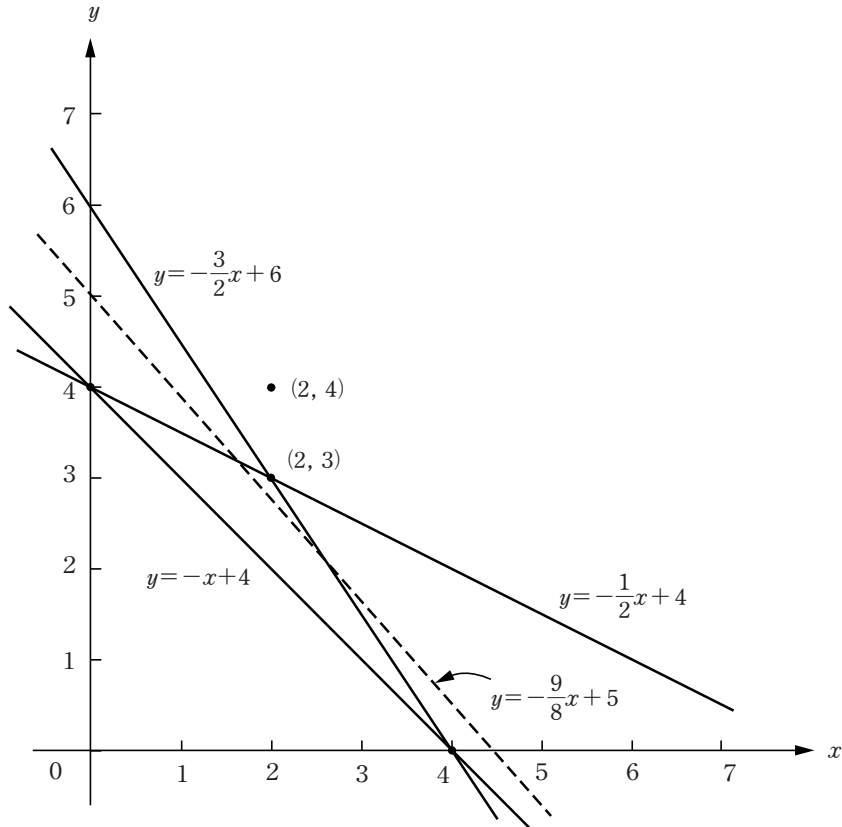
に対して

$$\hat{e}_1 = -2, \hat{e}_2 = 0, \hat{e}_3 = 1, \hat{e}_4 = 0, \hat{f} = 3$$

である(第4図を参照). 双対問題の最適解は,

$$u_1^* = -1, u_2^* = 1, u_3^* = 1, u_4^* = -1$$

であり, これは一意である(定理9). 最初の L_1 回帰直線は2つの観測値 $(0, 4)$ と $(2, 3)$ を通り(定



第4図

理5), 他の観測値 $(2, 4)$ はこの上方に, $(4, 0)$ は下方にあるので, $N^+ = N^-$ が成立する(定理6). 2番目の L_1 回帰直線は $(0, 4)$ と $(4, 0)$ を通り, 他の2つの観測値がこの上方にあるので, $N^+ - N^- = 2$ が成立し, 3番目の L_1 回帰直線は $(2, 3)$ と $(4, 0)$ を通り, これに対して $N^+ = N^-$ が成立する. これら3つの L_1 回帰直線の間に観測値は存在しない(定理8). また, すべての i について $|u_i^*| = 1$ であるから, L_1 回帰直線が多重解であることが確認できる(定理14). この問題には3つの異なった基底解に対応する L_1 回帰直線が存在し(定理19), 上の3つの L_1 回帰直線の凸結合である, たとえば

$$y = -\frac{9}{8}x + 5$$

のように観測値を全く通らない L_1 回帰直線が存在し(定理13), この L_1 回帰直線に対して定理2の(12)が成立する. 異なった基底解に対応する2つの L_1 回帰直線の交点である3つの観測値 $(0, 4)$, $(2, 3)$, $(4, 0)$ の各々に関して(45)と(46)が成立している(定理20).

参考文献

- [1] Appa, G., and Smith, C., "On L_1 and Chebyshev Estimation," *Mathematical Programming*, Vol. 5 (1973), pp.

- 73-87.
- [2] Bertsimas, D., and Tsitsiklis, J. N., *Introduction to Linear Optimization*. Belmont, Mass.: Athena Scientific, 1997.
 - [3] Dufton, A. F., "Correlation," *Nature*, Vol. 121 (June 2, 1928), p. 866.
 - [4] Edgeworth, F. Y., "On Observations Relating to Several Quantities," *Hermathena*, Vol. 6 (1887), pp. 279-85.
 - [5] Edgeworth, F. Y., "A New Method of Reducing Observations Relating to Several Quantities," *Philosophical Magazine*, 5th Series, Vol. 24 (1887), pp. 222-3.
 - [6] Edgeworth, F. Y., "On a New Method of Reducing Observations Relating to Several Quantities," *Philosophical Magazine*, 5th Series, Vol. 25 (1888), pp. 184-91.
 - [7] Edgeworth, F. Y., "On the Use of Medians for Reducing Observations Relating to Several Quantities," *Philosophical Magazine*, 6th Series, Vol. 46 (1923), pp. 1074-88.
 - [8] Eisenhart, C., "Boscovich and the Combination of Observations," in Whyte, L. L. (ed.), *Roger Joseph Boscovich: Studies of His Life and Work on the 250th Anniversary of His Birth*. London: George Allen & Unwin, 1961, pp. 200-12.
 - [9] Farebrother, R. W., "The Historical Development of the L_1 and L_∞ Estimation Procedures," in Dodge, Y. (ed.), *Statistical Data Analysis Based on the L_1 -Norm and Related Methods*. Amsterdam: North-Holland, 1987, pp. 37-63.
 - [10] Gale, D., *The Theory of Linear Economic Models*. New York: McGraw-Hill Book Co., 1960.
 - [11] Gass, S. I., *Linear Programming: Methods and Applications*. 5th Edition, New York: McGraw-Hill Book Co., 1985.
 - [12] Gentle, J. E., Kennedy, W. J., and Sposito, V. A., "Properties of the L_1 -Estimate Space," in American Statistical Association, *Proceedings of the Statistical Computing Section*. Washington, D.C.: American Statistical Association, 1976, pp. 163-4.
 - [13] Gentle, J. E., Kennedy, W. J., and Sposito, V. A., "On Least Absolute Values Estimation," *Communications in Statistics—Theory and Methods*, Vol. A6 (1977), pp. 839-45.
 - [14] Harris, T. E., "Regression Using Minimum Absolute Deviations," *American Statistician*, Vol. 4 (1950), pp. 14-5.
 - [15] Harter, H. L., "The Method of Least Squares and Some Alternatives," Part I, *International Statistical Review*, Vol. 42 (1974), pp. 147-74; Part II, *International Statistical Review*, Vol. 42 (1974), pp. 235-64.
 - [16] Karst, O. J., "Linear Curve Fitting Using Least Deviations," *Journal of the American Statistical Association*, Vol. 53 (1958), pp. 118-32.
 - [17] Kelley, J. E., Jr., "An Application of Linear Programming to Curve Fitting," *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, Vol. 6 (1958), pp. 15-22.
 - [18] Kolman, B., and Beck, R. E., *Elementary Linear Programming with Applications*. 2nd Edition, San Diego, Calif.: Academic Press, 1995.
 - [19] Murty, K. G., *Linear Programming*. New York: John Wiley & Sons, 1983.
 - [20] 尾崎雄一郎, 「最小絶対値法による原点を通る回帰直線」, 『名城商学』, 第47巻, 第1号(1997年), pp. 29-52.
 - [21] Rhodes, E. C., "Reducing Observations by the Method of Minimum Deviations," *Philosophical Magazine*, 7th Series, Vol. 9 (1930), pp. 974-92.
 - [22] Sheynin, O. B., "R. J. Boscovich's Work on Probability," *Archive for History of Exact Sciences*, Vol. 9 (1973), pp. 306-24.
 - [23] Sposito, V. A., *Linear and Nonlinear Programming*. Ames, Iowa: Iowa State University Press, 1975.
 - [24] Sposito, V. A., *Linear Programming with Statistical Applications*. Ames, Iowa: Iowa State University Press, 1989.

- [25] Sposito, V. A., and Smith, W. C., "On a Sufficient Condition and a Necessary Condition for L_1 Estimation," *Journal of the Royal Statistical Society*, Series C, Vol. 25 (1976), pp. 154-7.
- [26] Sposito, V. A., Smith, W., and McCormick, G., *Minimizing the Sum of Absolute Deviations*. Göttingen: Vandenhoeck & Ruprecht, 1978.
- [27] Stigler, S. M., "Laplace, Fisher, and the Discovery of the Concept of Sufficiency," *Biometrika*, Vol. 60 (1973), pp. 439-45.
- [28] Stigler, S. M., *The History of Statistics: The Measurement of Uncertainty before 1900*. Cambridge, Mass.: The Belknap Press of Harvard University Press, 1986.
- [29] Todhunter, I., *A History of the Mathematical Theories of Attraction and the Figure of the Earth from the Time of Newton to That of Laplace*. London: Macmillan, 1873. Reprinted in New York: Dover Publications, 1962.
- [30] Turner, H. H., "On Mr. Edgeworth's *Method of Reducing Observations Relating Several Quantities*," *Philosophical Magazine*, 5th Series, Vol. 24 (1887), pp. 466-70.
- [31] Wagner, H. M., "Linear Programming Techniques for Regression Analysis," *Journal of the American Statistical Association*, Vol. 54 (1959), pp. 206-12.