

最小二乗法を行う際、

$$y \sim Xa + b \quad (1)$$

というモデルがあるとする、

$$\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - (x_i^T a + b))^2 = \|y - (Xa + b)\|^2 \quad (2)$$

を最小にするように a と b を求めればよい。

$b = 0$ のとき、

$$\|y - Xa\|^2 \quad (3)$$

を最小にする a を求めるには上記の式を a で偏微分すればよい。

$M = y - Xa$ とおくと、

$$\frac{\partial}{\partial a} \|M\|^2 = \frac{\partial}{\partial a} M^T M = 2M^T \frac{\partial}{\partial a} (Xa - y) = 2X^T (Xa - y) \quad (4)$$

以上の式が 0 になるときの a を求めればよいので、

$$2X^T (Xa - y) = 0 \quad (5)$$

$$X^T Xa = X^T y \quad (6)$$

この式に左から $(X^T X)^{-1}$ をかけることで、

$$a = (X^T X)^{-1} X^T y \quad (7)$$

が求められる。