行列輪講: 第 3 回 行列とベクトルの微分 1

松谷研究室

June 2, 2024

目次

目次

このスライドの概要

- 行列とベクトルの微分について確認する
  - 微分の種類, レイアウト (表記法)
  - ベクトルのスカラによる微分
  - スカラのベクトルによる微分
  - ベクトルのベクトルによる微分
- 以下の資料も大変参考になります:
  - math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf
  - comp.nus.edu.sg/cs5240/lecture/matrix-differentiation.pdf
  - en.wikipedia.org/wiki/Matrix_calculus

目次

行列, ベクトルの微分の種類

- 以下の 6 つの組み合わせがある.

	スカラ	ベクトル	行列
スカラ	$\frac{\partial y}{\partial x}$	$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x}$	$\frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial x}$
ベクトル	$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}}$	$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}}$	
行列	$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}}$		

- ベクトルの行列による微分, 行列の行列による微分などは, テンソルで表記される.

微分のレイアウト

- スカラの場合とは異なり, レイアウトが統一されていない.
- 幾つかの流派があり, 人によって異なる (明記されないことが多い).
- どのレイアウトによる表記なのかを理解しないと, 混乱の元になる.
- 以下の 2 つのレイアウトに大別される ($\mathbf{x}, \mathbf{y}$ を縦ベクトルとする).
- 分子レイアウト (Numerator Layout)
  - $\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial x}$ は, 縦ベクトル, $\dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{x}}$ は, 横ベクトル
- 分母レイアウト (Denominator Layout)
  - $\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial x}$ は, 横ベクトル, $\dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{x}}$ は, 縦ベクトル
- これらを, 混ぜて使うことも多々ある. 優劣はない.

スカラによる微分

分子レイアウト	分母レイアウト
$\dfrac{\partial y}{\partial x}$	$\dfrac{\partial y}{\partial x}$
$\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial x} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial y_m}{\partial x} \end{pmatrix}$	$\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial x} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x} & \cdots & \dfrac{\partial y_m}{\partial x} \end{pmatrix} \equiv \dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial x}^\top$
$\dfrac{\partial \mathbf{Y}}{\partial x} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_{11}}{\partial x} & \cdots & \dfrac{\partial y_{1n}}{\partial x} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial y_{m1}}{\partial x} & \cdots & \dfrac{\partial y_{mn}}{\partial x} \end{pmatrix}$	まれ

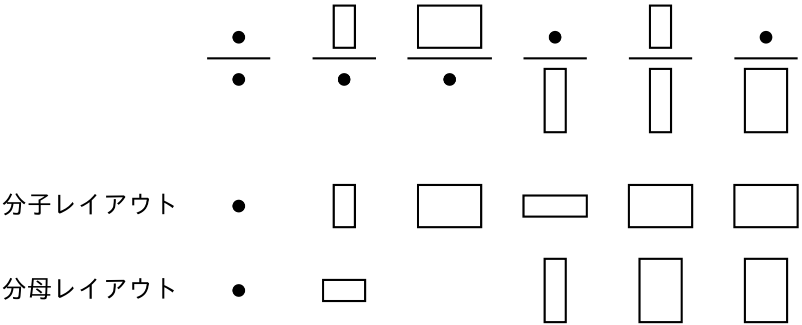
ベクトルによる微分

分子レイアウト	分母レイアウト
$\dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial y}{\partial x_n} \end{pmatrix} \equiv \dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{x}^\top}$	$\dfrac{\partial y}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y}{\partial x_1} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial y}{\partial x_n} \end{pmatrix}$
$\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial y_m}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \equiv \dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}^\top}$	$\dfrac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial y_m}{\partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial y_1}{\partial x_n} & \cdots & \dfrac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{pmatrix} \equiv \dfrac{\partial \mathbf{y}^\top}{\partial \mathbf{x}}$

行列による微分

分子レイアウト	分母レイアウト
$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_{m1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_{1n}} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix} \equiv \frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}^\top}$	$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_{11}} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_{1n}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_{m1}} & \cdots & \frac{\partial y}{\partial x_{mn}} \end{pmatrix} \equiv \frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}}$

微分の結果の形



- 分子レイアウト: 分子と同じ形 / 分母の転置と同じ形
- 分母レイアウト: 分母と同じ形 / 分子の転置と同じ形
- ここでは, 分子レイアウトを用いる.

分子レイアウトによる微分の結果 (インデックス表示)

- $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ を n 次, m 次の縦ベクトル, $\mathbf{X}, \mathbf{Y}$ を $m \times n$ 行列とする.
- $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ の各成分を x_i, y_i, $\mathbf{X}, \mathbf{Y}$ の各成分を x_{ij}, y_{ij} とする.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x}\right)_i = \frac{\partial y_i}{\partial x} \qquad (m \text{ 次, 縦ベクトル})$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{Y}}{\partial x}\right)_{ij} = \frac{\partial y_{ij}}{\partial x} \qquad (m \times n \text{ 行列})$$

$$\left(\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}}\right)_j = \frac{\partial y}{\partial x_j} \qquad (n \text{ 次, 横ベクトル})$$

$$\left(\frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}}\right)_{ij} = \frac{\partial y}{\partial x_{ji}} \qquad ({\color{red} n \times m \text{ 行列}})$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} = \frac{\partial y_i}{\partial x_j} \qquad (m \times n \text{ 行列})$$

微分の計算

- ここからは, (本当に) 様々な微分を計算する.
- 微分操作に慣れましょう.
- 採用するレイアウトによって結果が変わるので, 公式とはいえなさそうです.
- 以下の資料を基に作成しました.
  - math.uwaterloo.ca/~hwolkowi/matrixcookbook.pdf
  - en.wikipedia.org/wiki/Matrix_calculus

目次

ベクトルのスカラによる微分

ベクトルのスカラによる微分 (基本)

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial x} = \mathbf{0} \qquad (\mathbf{a}\ \text{は定数})$$

$$\frac{\partial a\mathbf{u}}{\partial x} = a\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(x),\ a\ \text{は定数})$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}\mathbf{u}}{\partial x} = \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(x),\ \mathbf{A}\ \text{は定数})$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{A}\mathbf{u}}{\partial x}\right)_i = \frac{\partial}{\partial x}\sum_k a_{ik}u_k = \sum_k a_{ik}\frac{\partial u_k}{\partial x} = \sum_k a_{ik}\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)_k = \left(\mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)_i$$

ベクトルのスカラによる微分

ベクトルのスカラによる微分 (転置, 和)

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\top}{\partial x} = \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)^\top \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(x))$$

$$\frac{\partial (\mathbf{u} + \mathbf{v})}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(x), \mathbf{v} = \mathbf{v}(x))$$

- 分子レイアウトでは, 分子が縦ベクトルなら, 結果も縦ベクトル
- 分子が横ベクトルなら, 結果も横ベクトル

ベクトルのスカラによる微分

ベクトルのスカラによる微分 (合成関数, 連鎖律)

$$\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(x))$$

$\mathbf{g}(\mathbf{u})$ の各成分を g_i, $\mathbf{u}$ の各成分を u_i とする.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial x}\right)_i = \frac{\partial g_i}{\partial x} = \sum_k \frac{\partial g_i}{\partial u_k} \frac{\partial u_k}{\partial x} = \sum_k \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\right)_{ik} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)_k$$

$$= \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)_i$$

ベクトルのスカラによる微分

ベクトルのスカラによる微分 (合成関数, 連鎖律)

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(x))$$

$\mathbf{f}(\mathbf{g})$ の各成分を f_i, $\mathbf{g}(\mathbf{u})$ の各成分を g_i, そして $\mathbf{u}$ の各成分を u_i とする.

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial x}\right)_i &= \frac{\partial f_i}{\partial x} = \sum_k \frac{\partial f_i}{\partial g_k} \frac{\partial g_k}{\partial x} = \sum_k \frac{\partial f_i}{\partial g_k} \left(\sum_l \frac{\partial g_k}{\partial u_l} \frac{\partial u_l}{\partial x} \right) \\
&= \sum_k \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}}\right)_{ik} \left(\sum_l \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\right)_{kl} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)_l \right) \\
&= \sum_k \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}}\right)_{ik} \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)_k = \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)_i
\end{aligned}$$

目次

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (基本)

$$\frac{\partial a}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{0}^\top \qquad (a \text{ は定数})$$

$$\frac{\partial au}{\partial \mathbf{x}} = a\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}} \qquad (u = u(\mathbf{x}),\ a \text{ は定数})$$

$$\frac{\partial (u+v)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}} \qquad (u = u(\mathbf{x}),\ v = v(\mathbf{x}))$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (合成関数)

$$\frac{\partial uv}{\partial \mathbf{x}} = u\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}} + v\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}} \qquad (u = u(\mathbf{x}),\ v = v(\mathbf{x}))$$

$\mathbf{x}$ の各成分を x_i とする.

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial uv}{\partial \mathbf{x}}\right)_i &= \frac{\partial uv}{\partial x_i} = u\frac{\partial v}{\partial x_i} + v\frac{\partial u}{\partial x_i} = u\left(\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}}\right)_i + v\left(\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}}\right)_i \\ &= \left(u\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}} + v\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}}\right)_i\end{aligned}$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (合成関数, 連鎖律)

$$\frac{\partial g(u)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial g(u)}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}} \qquad (u = u(\mathbf{x}))$$

$\mathbf{x}$ の各成分を x_i とする.

$$\left(\frac{\partial g(u)}{\partial \mathbf{x}}\right)_i = \frac{\partial g(u)}{\partial x_i} = \frac{\partial g(u)}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{\partial g(u)}{\partial u}\left(\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}}\right)_i = \left(\frac{\partial g(u)}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}}\right)_i$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (合成関数, 連鎖律)

$$\frac{\partial f(g(u))}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial f(g)}{\partial g}\frac{\partial g(u)}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}} \qquad (u = u(\mathbf{x}))$$

$\mathbf{x}$ の各成分を x_i とする.

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial f(g(u))}{\partial \mathbf{x}}\right)_i &= \frac{\partial f(g(u))}{\partial x_i} = \frac{\partial f(g)}{\partial g}\frac{\partial g(u)}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial x_i} = \frac{\partial f(g)}{\partial g}\frac{\partial g(u)}{\partial u}\left(\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}}\right)_i \\ &= \left(\frac{\partial f(g)}{\partial g}\frac{\partial g(u)}{\partial u}\frac{\partial u}{\partial \mathbf{x}}\right)_i\end{aligned}$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (内積)

$$\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{a}^\top \qquad (\mathbf{a} \text{ は定数})$$

$\mathbf{a}, \mathbf{x}$ の各成分を a_i, x_i とする.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i = \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{x}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k a_k x_k = \sum_k a_k \frac{\partial x_k}{\partial x_i}$$
$$= \sum_k a_k \delta_{ki} = a_i = \left(\mathbf{a}^\top\right)_i$$

δ_{ki} は, クロネッカーのデルタである ($i = k$ のときだけ 1).
$\mathbf{a}, \mathbf{x}$ が縦ベクトルなので, 結果は横ベクトルとなる.

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (内積)

$$\frac{\partial \mathbf{b}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{b}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{b}^\top \mathbf{A} \qquad (\mathbf{A}, \mathbf{b}\text{ は定数})$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial \mathbf{b}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i &= \frac{\partial \mathbf{b}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k b_k \left(\mathbf{A}\mathbf{x}\right)_k = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k b_k \sum_l a_{kl} x_l \\
&= \sum_k b_k \sum_l a_{kl} \frac{\partial x_i}{\partial x_l} = \sum_k b_k \sum_l a_{kl} \delta_{il} = \sum_k b_k a_{ki} \\
&= \left(\mathbf{b}^\top \mathbf{A}\right)_i
\end{aligned}$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (二次形式)

$$\frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{x}^\top \left(\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top\right) \qquad (\mathbf{A}\ \text{は定数})$$

以下のように，要素ごとに確認できる．

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i &= \frac{\partial^2 \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x} \partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k x_k \left(\mathbf{A}\mathbf{x}\right)_k = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k x_k \sum_l a_{kl} x_l \\
&= \sum_k \sum_l a_{kl} \frac{\partial}{\partial x_i} x_k x_l = \sum_k \sum_l a_{kl} \left(x_k \frac{\partial x_l}{\partial x_i} + x_l \frac{\partial x_k}{\partial x_i} \right) \\
&= \sum_k \sum_l a_{kl} \left(x_k \delta_{il} + x_l \delta_{ik} \right) = \sum_k x_k a_{ki} + \sum_l x_l a_{il} \\
&= \left(\mathbf{x}^\top \mathbf{A}\right)_i + \left(\mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top\right)_i = \left(\mathbf{x}^\top \left(\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top\right)\right)_i
\end{aligned}$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (二次形式)

$$\frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{x}^\top \left(\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top\right) \qquad (\mathbf{A}\text{ は定数})$$

特に, $\mathbf{A}$ が対称行列 ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^\top$) であれば,

$$\frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^\top \mathbf{A} \qquad (\mathbf{A}\text{ は定数})$$

また,

$$\frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \|\mathbf{x}\|^2}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^\top$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (合成関数, 内積)

$$\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{a}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}),\ \mathbf{a}\ \text{は定数})$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i &= \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{u}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k a_k u_k = \sum_k a_k \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \\ &= \sum_k a_k \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ki} = \left(\mathbf{a}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i\end{aligned}$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (合成関数, 内積)

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{v}^\top \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{u}^\top \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{v}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}),\ \mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}))$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i &= \frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{v}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \sum_k u_k v_k = \sum_k \left(u_k \frac{\partial v_k}{\partial x_i} + v_k \frac{\partial u_k}{\partial x_i} \right) \\
&= \sum_k u_k \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ki} + \sum_k v_k \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ki} = \left(\mathbf{u}^\top \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i + \left(\mathbf{v}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i \\
&= \left(\mathbf{u}^\top \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{v}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i
\end{aligned}$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (合成関数, 内積)

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{v}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{v}^\top \mathbf{A}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}$$

$$(\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}),\ \mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}),\ \mathbf{A}\ \text{は定数})$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i = \frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\sum_k u_k\left(\mathbf{A}\mathbf{v}\right)_k = \frac{\partial}{\partial x_i}\sum_k u_k \sum_l a_{kl} v_l$$

$$= \sum_{k,l} a_{kl}\left(u_k \frac{\partial v_l}{\partial x_i} + v_l \frac{\partial u_k}{\partial x_i}\right) = \sum_k u_k \sum_l a_{kl}\left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{li} + \sum_l v_l \sum_k a_{kl}\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ki}$$

$$= \sum_k u_k\left(\mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ki} + \sum_l v_l\left(\mathbf{A}^\top\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{li} = \left(\mathbf{u}^\top\mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i + \left(\mathbf{v}^\top\mathbf{A}^\top\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_i$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (内積同士の積)

$$\frac{\partial\left(\mathbf{a}^\top\mathbf{x}\right)\left(\mathbf{b}^\top\mathbf{x}\right)}{\partial\mathbf{x}} = \frac{\partial\mathbf{a}^\top\mathbf{x}\mathbf{x}^\top\mathbf{b}^\top}{\partial\mathbf{x}} = \frac{\partial\mathbf{x}^\top\mathbf{a}\mathbf{b}^\top\mathbf{x}}{\partial\mathbf{x}} = \mathbf{x}^\top\left(\mathbf{a}\mathbf{b}^\top + \mathbf{b}\mathbf{a}^\top\right)$$

($\mathbf{a}, \mathbf{b}$ は定数)

$\dfrac{\partial\mathbf{x}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial\mathbf{x}} = \mathbf{x}^\top\left(\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top\right)$ に，$\mathbf{A} = \mathbf{a}\mathbf{b}^\top$ を代入すればよい．
実際に代入して，確かめてみましょう．

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (内積同士の積)

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \frac{(\mathbf{A}\mathbf{x})^\top (\mathbf{A}\mathbf{x})}{(\mathbf{B}\mathbf{x})^\top (\mathbf{B}\mathbf{x})} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \frac{\mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{B}\mathbf{x}} \\
&= 2 \frac{\mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}}{\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{B}\mathbf{x}} - 2 \frac{\left(\mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}\right) \mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{B}}{\left(\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{B}\mathbf{x}\right)^2} \\
&= 2 \frac{\left(\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{B}\mathbf{x}\right) \mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A} - \left(\mathbf{x}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}\mathbf{x}\right) \mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{B}}{\left(\mathbf{x}^\top \mathbf{B}^\top \mathbf{B}\mathbf{x}\right)^2}
\end{aligned}
$$

($\mathbf{A}, \mathbf{B}$ は定数)

スカラにおける合成関数の微分を用いる.

$$
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \frac{f(x)}{g(x)} = \frac{1}{g(x)} \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} - \frac{f(x)}{g(x)^2} \frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}
$$

スカラのベクトルによる微分

$\mathbf{x}$ の各成分 x_i についての微分をみると,

$$\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\mathbf{x}} = \frac{1}{\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\mathbf{x}}\frac{\partial\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial x_i} - \frac{\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}}{\left(\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\mathbf{x}\right)^2}\frac{\partial\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\mathbf{x}}{\partial x_i}$$

$\dfrac{\partial\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial\mathbf{x}} = 2\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}$ であるから, $\dfrac{\partial\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial x_i} = 2\left(\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\right)_i$.

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}}{\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\mathbf{x}} &= 2\frac{1}{\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\right)_i - 2\frac{\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}}{\left(\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\mathbf{x}\right)^2}\left(\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\right)_i \\ &= \left(2\frac{\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}}{\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\mathbf{x}} - 2\frac{\left(\mathbf{x}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}\right)\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}}{\left(\mathbf{x}^\top\mathbf{B}^\top\mathbf{B}\mathbf{x}\right)^2}\right)_i\end{aligned}$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (二次関数)

$$\frac{\partial\left(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}\right)^{\top}\mathbf{C}\left(\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{e}\right)}{\partial\mathbf{x}} = \left(\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{e}\right)^{\top}\mathbf{C}^{\top}\mathbf{A} + \left(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}\right)^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}$$

$(\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{C}, \mathbf{D}, \mathbf{e}$ は定数$)$

$\mathbf{x}^{\top}\mathbf{A}\mathbf{x}$, $\mathbf{a}^{\top}\mathbf{x}$, $\mathbf{x}^{\top}\mathbf{a}$ についての微分の式を使えばよい.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\left(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}\right)^{\top}\mathbf{C}\left(\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{e}\right)}{\partial\mathbf{x}} &= \frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^{\top}\mathbf{A}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{x}^{\top}\mathbf{A}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{e}+\mathbf{b}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{b}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{e}\right)\\
&= \mathbf{x}^{\top}\left(\mathbf{A}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}+\left(\mathbf{A}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}\right)^{\top}\right)+\left(\mathbf{A}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{e}\right)^{\top}+\mathbf{b}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}\\
&= \mathbf{x}^{\top}\mathbf{A}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}+\mathbf{x}^{\top}\mathbf{D}^{\top}\mathbf{C}^{\top}\mathbf{A}+\mathbf{e}^{\top}\mathbf{C}^{\top}\mathbf{A}+\mathbf{b}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}\\
&= \left(\mathbf{A}\mathbf{x}\right)^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}+\mathbf{b}^{\top}\mathbf{C}\mathbf{D}+\left(\mathbf{D}\mathbf{x}\right)^{\top}\mathbf{C}^{\top}\mathbf{A}+\mathbf{e}^{\top}\mathbf{C}^{\top}\mathbf{A}
\end{aligned}$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (二次関数)

$$\frac{\partial \left(\mathbf{x}+\mathbf{A}\mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C}\left(\mathbf{x}+\mathbf{D}\mathbf{e}\right)}{\partial \mathbf{x}} = \left(\mathbf{x}+\mathbf{A}\mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C} + \left(\mathbf{x}+\mathbf{D}\mathbf{e}\right)^\top \mathbf{C}^\top$$

$$(\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{C}, \mathbf{D}, \mathbf{e}\ \text{は定数})$$

$\mathbf{x}^\top\mathbf{A}\mathbf{x}$, $\mathbf{a}^\top\mathbf{x}$, $\mathbf{x}^\top\mathbf{a}$ についての微分の式を使えばよい.

$$\frac{\partial \left(\mathbf{x}+\mathbf{A}\mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C}\left(\mathbf{x}+\mathbf{D}\mathbf{e}\right)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}\left(\mathbf{x}^\top\mathbf{C}\mathbf{x}+\mathbf{x}^\top\mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{e}+\mathbf{b}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{C}\mathbf{x}+\mathbf{b}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{e}\right)$$

$$= \mathbf{x}^\top\left(\mathbf{C}+\mathbf{C}^\top\right) + \left(\mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{e}\right)^\top + \mathbf{b}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{C}$$

$$= \mathbf{x}^\top\mathbf{C} + \mathbf{x}^\top\mathbf{C}^\top + \mathbf{e}^\top\mathbf{D}^\top\mathbf{C}^\top + \mathbf{b}^\top\mathbf{A}^\top\mathbf{C}$$

$$= \mathbf{x}^\top\mathbf{C} + \left(\mathbf{A}\mathbf{b}\right)^\top\mathbf{C} + \mathbf{x}^\top\mathbf{C}^\top + \left(\mathbf{D}\mathbf{e}\right)^\top\mathbf{C}^\top$$

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (二次関数)

$$\frac{\partial (\mathbf{x}-\mathbf{Ab})^\top \mathbf{C} (\mathbf{x}-\mathbf{Ab})}{\partial \mathbf{x}} = (\mathbf{x}-\mathbf{Ab})^\top \left(\mathbf{C}+\mathbf{C}^\top\right)$$

($\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{C}$ は定数)

特に, $\mathbf{C}$ が対称行列 ($\mathbf{C} = \mathbf{C}^\top$) であれば,

$$\frac{\partial (\mathbf{x}-\mathbf{Ab})^\top \mathbf{C} (\mathbf{x}-\mathbf{Ab})}{\partial \mathbf{x}} = 2 (\mathbf{x}-\mathbf{Ab})^\top \mathbf{C}$$

以下の式について, $\mathbf{A}, \mathbf{D}, \mathbf{e} \to -\mathbf{A}, -\mathbf{A}, \mathbf{b}$ とすればよい.

$$\frac{\partial (\mathbf{x}+\mathbf{Ab})^\top \mathbf{C} (\mathbf{x}+\mathbf{De})}{\partial \mathbf{x}} = (\mathbf{x}+\mathbf{Ab})^\top \mathbf{C} + (\mathbf{x}+\mathbf{De})^\top \mathbf{C}^\top$$

ガウス分布に関する計算で頻出します.

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (二次関数)

$$\frac{\partial \left(\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}\right)^\top \mathbf{C}\left(\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}\right)}{\partial \mathbf{x}} = -\left(\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}\right)^\top \left(\mathbf{C}+\mathbf{C}^\top\right)\mathbf{A}$$

$$(\mathbf{A}, \mathbf{b}, \mathbf{C} \text{ は定数})$$

特に, $\mathbf{C}$ が対称行列 ($\mathbf{C}=\mathbf{C}^\top$) であれば,

$$\frac{\partial \left(\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}\right)^\top \mathbf{C}\left(\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}\right)}{\partial \mathbf{x}} = -2\left(\mathbf{b}-\mathbf{A}\mathbf{x}\right)^\top \mathbf{C}\mathbf{A}$$

以下の式について, $\mathbf{A}, \mathbf{D}, \mathbf{e} \to -\mathbf{A}, -\mathbf{A}, \mathbf{b}$ とすればよい.

$$\frac{\partial \left(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C}\left(\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{e}\right)}{\partial \mathbf{x}} = \left(\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{e}\right)^\top \mathbf{C}^\top \mathbf{A} + \left(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C}\mathbf{D}$$

ガウス分布に関する計算で頻出します.

スカラのベクトルによる微分

スカラのベクトルによる微分 (二次関数)

$\mathbf{b}, \mathbf{C}$ を定数, $\mathbf{C}$ を対称行列 $(\mathbf{C} = \mathbf{C}^\top)$ とすると,

$$\frac{\partial \left(\mathbf{x} - \mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C} \left(\mathbf{x} - \mathbf{b}\right)}{\partial \mathbf{x}} = 2\left(\mathbf{x} - \mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C}$$

$$\frac{\partial \left(\mathbf{b} - \mathbf{x}\right)^\top \mathbf{C} \left(\mathbf{b} - \mathbf{x}\right)}{\partial \mathbf{x}} = 2\left(\mathbf{x} - \mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C}$$

スカラのベクトルによる微分 (ノルム)

$$\frac{\partial \|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|}{\partial \mathbf{x}} = \frac{(\mathbf{x}-\mathbf{a})^\top}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|}$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|}{\partial \mathbf{x}}\right)_i &= \frac{\partial \|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\sum_k (x_k - a_k)^2\right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{1}{2}\left(\sum_k (x_k - a_k)^2\right)^{-\frac{1}{2}} \frac{\partial}{\partial x_i}\sum_k (x_k - a_k)^2 \\ &= \frac{1}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|}(x_i - a_i) = \frac{1}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|}\left((\mathbf{x}-\mathbf{a})^\top\right)_i\end{aligned}$$

目次

ベクトルのベクトルによる微分

ベクトルのベクトルによる微分 (基本)

$$\frac{\partial \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{0} \qquad (\mathbf{a}\text{ は定数})$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{I}$$

$$\frac{\partial a\mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = a\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}),\ a\text{ は定数})$$

$$\frac{\partial\left(\mathbf{u}+\mathbf{v}\right)}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}),\ \mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}))$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial x_j} = \delta_{ij} = (\mathbf{I})_{ij}$$

ベクトルのベクトルによる微分

ベクトルのベクトルによる微分 (行列とベクトルの積)

$$\frac{\partial \mathbf{A}\mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}),\ \mathbf{A}\ \text{は定数})$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \mathbf{A}\mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} &= \frac{\partial\left(\mathbf{A}\mathbf{u}\right)_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\sum_k a_{ik}u_k = \sum_k a_{ik}\frac{\partial u_k}{\partial x_j} \\ &= \sum_k a_{ik}\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{kj} = \left(\mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij}\end{aligned}$$

ベクトルのベクトルによる微分

ベクトルのベクトルによる微分 (行列とベクトルの積)

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}),\ \mathbf{A}\ \text{は定数})$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} = \frac{\partial \left(\mathbf{u}^\top \mathbf{A}\right)_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \sum_k u_k a_{ki} = \sum_k a_{ki} \frac{\partial u_k}{\partial x_j}$$
$$= \sum_k a_{ki} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{kj} = \left(\mathbf{A}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij}$$

分子が横ベクトルであるときは, 縦ベクトルとみなして ($\mathbf{u}^\top \mathbf{A}$ ではなく $\mathbf{A}^\top \mathbf{u}$ として) 計算している. 従って, $\dfrac{\partial \mathbf{A}^\top \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}$ と同一である.

ベクトルのベクトルによる微分

ベクトルのベクトルによる微分 (行列とベクトルの積)

$$\frac{\partial \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A} \qquad (\mathbf{A}\text{ は定数})$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{A}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top \qquad (\mathbf{A}\text{ は定数})$$

以下のように確認できる.

$$\frac{\partial \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}\mathbf{I} = \mathbf{A}$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}^\top \mathbf{A}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^\top\mathbf{I} = \mathbf{A}^\top$$

ベクトルのベクトルによる微分

ベクトルのベクトルによる微分 (合成関数)

$$\frac{\partial v\mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{a}\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}} \qquad (u = u(\mathbf{x}),\ \mathbf{a}\ \text{は定数})$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\left(\frac{\partial v\mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} = \frac{\partial v a_i}{\partial x_j} = a_i\frac{\partial v}{\partial x_j} = a_i\left(\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}}\right)_j = \left(\mathbf{a}\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij}$$

$\mathbf{a}$ と $\mathbf{x}$ は縦ベクトル, $\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}}$ は横ベクトルであることに注意する. $\mathbf{a}$ の i 行目の成分 a_i と, $\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}}$ の j 列目の成分 $\frac{\partial v}{\partial x_j}$ の積が, $\frac{\partial v\mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}}$ の (i, j) 成分になる.

ベクトルのベクトルによる微分

ベクトルのベクトルによる微分 (合成関数)

$$\frac{\partial v\mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} = v\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{u}\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}),\ v = v(\mathbf{x}))$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial v\mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} &= \frac{\partial v u_i}{\partial x_j} = v\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + u_i\frac{\partial v}{\partial x_j} = v\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} + u_i\left(\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}}\right)_j \\ &= v\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} + \left(\mathbf{u}\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} = \left(v\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{u}\frac{\partial v}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij}\end{aligned}$$

真面目に計算しなくても, 微分の結果の形を考えれば, 上記のような結果になることを予想できる.

ベクトルのベクトルによる微分

ベクトルのベクトルによる微分 (合成関数, 連鎖律)

$$\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}$$

$\mathbf{g}(\mathbf{u})$ の各成分を g_i, $\mathbf{u}$ の各成分を u_i とする.

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} &= \frac{\partial g_i}{\partial x_j} = \sum_k \frac{\partial g_i}{\partial u_k} \frac{\partial u_k}{\partial x_j} = \sum_k \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\right)_{ik} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{kj} \\ &= \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij}\end{aligned}$$

ベクトルのベクトルによる微分

ベクトルのベクトルによる微分 (合成関数, 連鎖律)

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}$$

$\mathbf{f}(\mathbf{g})$ の各成分を f_i, $\mathbf{g}(\mathbf{u})$ の各成分を g_i, そして $\mathbf{u}$ の各成分を u_i とする.

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij} &= \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = \sum_k \frac{\partial f_i}{\partial g_k} \frac{\partial g_k}{\partial x_j} = \sum_k \frac{\partial f_i}{\partial g_k} \left(\sum_l \frac{\partial g_k}{\partial u_l} \frac{\partial u_l}{\partial x_j} \right) \\
&= \sum_k \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}}\right)_{ik} \left(\sum_l \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\right)_{kl} \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{lj} \right) \\
&= \sum_k \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}}\right)_{ik} \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{kj} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\right)_{ij}
\end{aligned}$$

ベクトルのベクトルによる微分

ベクトルのベクトルによる微分 (正規化されたベクトル)

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \frac{\mathbf{x}-\mathbf{a}}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|} = \frac{\mathbf{I}}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|} - \frac{(\mathbf{x}-\mathbf{a})(\mathbf{x}-\mathbf{a})^\top}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|^3} \qquad (\mathbf{a}\text{ は定数})$$

最初に, 以下を確認する.

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\| = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\sum_k (x_k - a_k)^2\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{x_j - a_j}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|}$$

ベクトルのベクトルによる微分

従って, 以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$
\begin{aligned}
\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \frac{\mathbf{x}-\mathbf{a}}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|}\right)_{ij} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{(\mathbf{x}-\mathbf{a})_i}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|} = \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{x_i - a_i}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|} \\
&= \frac{1}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|} \frac{\partial x_i}{\partial x_j} - \frac{x_i - a_i}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|^2} \frac{\partial}{\partial x_j} \|\mathbf{x}-\mathbf{a}\| \\
&= \frac{1}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|} \delta_{ij} - \frac{(x_i - a_i)(x_j - a_j)}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|^3} \\
&= \left(\frac{\mathbf{I}}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|}\right)_{ij} - \left(\frac{(\mathbf{x}-\mathbf{a})(\mathbf{x}-\mathbf{a})^\top}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|^3}\right)_{ij} \\
&= \left(\frac{\mathbf{I}}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|} - \frac{(\mathbf{x}-\mathbf{a})(\mathbf{x}-\mathbf{a})^\top}{\|\mathbf{x}-\mathbf{a}\|^3}\right)_{ij}
\end{aligned}
$$

まとめ

- ここまでで, 以下の 3 パターンを確認した.
  - ベクトルのスカラによる微分
  - スカラのベクトルによる微分
  - ベクトルのベクトルによる微分
- 要素ごとに調べる (スカラの微分に帰着させる) ことで, 微分の結果を示した.
- 基本的なものだけ覚えて, あとは必要に応じて, 適宜導出すればいいと思う.
- まだ, 以下のパターンが残っている.
  - 行列のスカラによる微分
  - スカラの行列による微分
  - スカラのスカラによる微分 (ベクトルや行列を関数として含む場合)
  - 逆行列, 行列式, トレースを含んだ微分
- ものによっては, 導出がかなり煩雑になる.

分子レイアウトと分母レイアウト

- 分子, 分母レイアウトでは, 微分の形が, 転置の関係になっている.
- $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ は縦ベクトルとする.

表記	実際の意味	
	分子レイアウト	分母レイアウト
$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x}$	$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial x}$	$\frac{\partial \mathbf{y}^\top}{\partial x}$
$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}}$	$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}^\top}$	$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{x}}$
$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}}$	$\frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}^\top}$	$\frac{\partial \mathbf{y}^\top}{\partial \mathbf{x}}$
$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}}$	$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}^\top}$	$\frac{\partial y}{\partial \mathbf{X}}$

分子レイアウトと分母レイアウト

- 分子レイアウトを採用した.
- 分母レイアウトの場合の式は, 基本的には, 分子レイアウトで得られた式を転置すれば得られる.
- 幾つかの例を示す.

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{cases} \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{v}^\top \mathbf{A}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} & (\text{分子レイアウト}) \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{A}^\top \mathbf{u} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{A}\mathbf{v} & (\text{分母レイアウト}) \end{cases}$$

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial \mathbf{x}} = \begin{cases} \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}}\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} & (\text{分子レイアウト}) \\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} & (\text{分母レイアウト}) \end{cases}$$

$$\frac{\partial \left(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C}\left(\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{e}\right)}{\partial \mathbf{x}} = \begin{cases} \left(\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{e}\right)^\top \mathbf{C}^\top \mathbf{A} + \left(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}\right)^\top \mathbf{C}\mathbf{D} & (\text{分子}) \\ \mathbf{A}^\top \mathbf{C}\left(\mathbf{D}\mathbf{x}+\mathbf{e}\right) + \mathbf{D}^\top \mathbf{C}^\top \left(\mathbf{A}\mathbf{x}+\mathbf{b}\right) & (\text{分母}) \end{cases}$$

分子レイアウトと分母レイアウト

- 例えば, 分子レイアウトにおける, 以下の式を考える.

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(x))$$

- この式の実際の意味は, 次のようになる (分母に転置を入れた).

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}^\top} \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}^\top} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} \qquad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(x))$$

- 転置すれば, 次を得る.

$$\left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial x}\right)^\top = \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))^\top}{\partial x} = \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}^\top} \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}^\top} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)^\top$$

$$= \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\right)^\top \left(\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}^\top}\right)^\top \left(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}^\top}\right)^\top = \frac{\partial \mathbf{u}^\top}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})^\top}{\partial \mathbf{u}} \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})^\top}{\partial \mathbf{g}}$$

分子レイアウトと分母レイアウト

- 分母レイアウトの表記に直すと，次を得る (分子から転置を取り去る).

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}}$$

- 分子，分母レイアウトの結果を比べると，ちょうど入れ替わっている.

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g}(\mathbf{u}))}{\partial x} = \begin{cases} \dfrac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}}\dfrac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial x} & \text{(分子レイアウト)} \\ \dfrac{\partial \mathbf{u}}{\partial x}\dfrac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{u})}{\partial \mathbf{u}}\dfrac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{g})}{\partial \mathbf{g}} & \text{(分母レイアウト)} \end{cases}$$

分子レイアウトと分母レイアウト

- もう 1 つの例として，分子レイアウトにおける，以下の式を考える．

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{v}^\top \mathbf{A}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \quad (\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}),\ \mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{x}),\ \mathbf{A}\ \text{は定数})$$

- この式の実際の意味は，次のようになる (分母に転置を入れた)．

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}^\top} + \mathbf{v}^\top \mathbf{A}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}^\top}$$

- 転置すれば，次を得る．

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\right)^\top &= \frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}^\top} = \left(\mathbf{u}^\top \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}^\top}\right)^\top + \left(\mathbf{v}^\top \mathbf{A}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}^\top}\right)^\top \\ &= \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}^\top}\right)^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{u} + \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}^\top}\right)^\top \mathbf{A}\mathbf{v} = \frac{\partial \mathbf{v}^\top}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{A}^\top \mathbf{u} + \frac{\partial \mathbf{u}^\top}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{A}\mathbf{v}\end{aligned}$$

分子レイアウトと分母レイアウト

- 分母レイアウトの表記に直すと, 次を得る (分子から転置を取り去る).

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}^\top} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{A}^\top \mathbf{u} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{A}\mathbf{v}$$

- 分子, 分母レイアウトの結果を比べると, 左右が入れ替わって, 行列やベクトルは転置されている.

$$\frac{\partial \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}^\top} = \begin{cases} \mathbf{u}^\top \mathbf{A}\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{v}^\top \mathbf{A}^\top \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} & \text{(分子レイアウト)} \\ \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{A}^\top \mathbf{u} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}\mathbf{A}\mathbf{v} & \text{(分母レイアウト)} \end{cases}$$

- The Matrix Cookbook などの資料は分母レイアウトを採用している.
- 上記のような方法で入れ替えることで, 分子, 分母レイアウトを交換できる.