

行列論講: 第 4 回 行列とベクトルの微分 2

松谷研究室

June 2, 2024

- 1 概要
- 2 行列のスカラーによる微分
- 3 スカラーの行列による微分
 - 線形変換, 二次式, 合成関数, 連鎖律
 - トレースを含む微分

目次

- 1 概要
- 2 行列のスカラーによる微分
- 3 スカラーの行列による微分

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
 - 行列のスカラによる微分
 - スカラの行列による微分
 - 逆行列, トレースのいった微分
- 以下の資料も大変参考になります:
 - math.uwaterloo.ca/~hwoikowi/matrixcookbook.pdf
 - comp.nus.edu.sg/cs5240/lecture/matrix-differentiation.pdf
 - en.wikipedia.org/wiki/Matrix_calculus

目次

- 1 概要
- 2 行列のスカラーによる微分
- 3 スカラーの行列による微分

行列のスカラーによる微分

行列のスカラーによる微分 (基本)

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} = \mathbf{0} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

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

$$\frac{\partial (\mathbf{U} + \mathbf{V})}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{V} = \mathbf{V}(x))$$

以下のように、要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial (\mathbf{U} + \mathbf{V})}{\partial x} \right)_{ij} &= \frac{\partial u_{ij} + v_{ij}}{\partial x} = \frac{\partial u_{ij}}{\partial x} + \frac{\partial v_{ij}}{\partial x} \\ &= \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right)_{ij} = \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right)_{ij} \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

行列のスカラーによる微分 (行列積)

$$\frac{\partial \mathbf{AU}}{\partial x} = \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{A} \text{ は定数})$$

以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathbf{AU}}{\partial x} \right)_{ij} &= \frac{\partial (\mathbf{AU})_{ij}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \sum_k a_{ik} u_{kj} = \sum_k a_{ik} \frac{\partial u_{kj}}{\partial x} \\ &= \sum_k a_{ik} \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right)_{kj} = \left(\mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right)_{ij} \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

行列のスカラーによる微分 (行列積)

$$\frac{\partial \mathbf{UB}}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{B} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{B} \text{ は定数})$$

以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathbf{UB}}{\partial x} \right)_{ij} &= \frac{\partial (\mathbf{UB})_{ij}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \sum_k u_{ik} b_{kj} = \sum_k \frac{\partial u_{ik}}{\partial x} b_{kj} \\ &= \sum_k \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right)_{ik} b_{kj} = \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{B} \right)_{ij} \end{aligned}$$

行列のスカラによる微分

行列のスカラによる微分 (行列積)

$$\frac{\partial \mathbf{AUB}}{\partial x} = \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{B} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{A}, \mathbf{B} \text{ は定数})$$

以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathbf{AUB}}{\partial x} \right)_{ij} &= \frac{\partial (\mathbf{AUB})_{ij}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \sum_k a_{ik} (\mathbf{UB})_{kj} \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \sum_k a_{ik} \left(\sum_l u_{kl} b_{lj} \right) = \sum_k a_{ik} \left(\sum_l \frac{\partial u_{kl}}{\partial x} b_{lj} \right) \\ &= \sum_k a_{ik} \left(\sum_l \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right)_{kl} b_{lj} \right) = \sum_k a_{ik} \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{B} \right)_{kj} = \left(\mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{B} \right)_{ij} \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

行列のスカラーによる微分 (行列積)

$$\frac{\partial \mathbf{UV}}{\partial x} = \mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{V} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{V} = \mathbf{V}(x))$$

以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathbf{UV}}{\partial x} \right)_{ij} &= \frac{\partial (\mathbf{UV})_{ij}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \sum_k u_{ik} v_{kj} = \sum_k \frac{\partial}{\partial x} (u_{ik} v_{kj}) \\ &= \sum_k \left(\frac{\partial u_{ik}}{\partial x} v_{kj} + u_{ik} \frac{\partial v_{kj}}{\partial x} \right) = \sum_k \frac{\partial u_{ik}}{\partial x} v_{kj} + \sum_k u_{ik} \frac{\partial v_{kj}}{\partial x} \\ &= \sum_k \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right)_{ik} v_{kj} + \sum_k u_{ik} \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right)_{kj} = \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{V} \right)_{ij} + \left(\mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right)_{ij} \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

行列のスカラーによる微分 (行列積)

$$\frac{\partial \mathbf{UVW}}{\partial x} = \mathbf{UV} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} + \mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \mathbf{W} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{VW}$$

$(\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{V} = \mathbf{V}(x), \mathbf{W} = \mathbf{W}(x))$

先ほど導出したものを使えば、以下のように示せる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{UVW}}{\partial x} &= \frac{\partial \mathbf{U}(\mathbf{VW})}{\partial x} = \mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{VW}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{VW} \\ &= \mathbf{U} \left(\mathbf{V} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \mathbf{W} \right) + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{VW} \\ &= \mathbf{UV} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} + \mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \mathbf{W} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{VW} \end{aligned}$$

行列のスカラによる微分

行列のスカラによる微分 (アダマール積)

$$\frac{\partial(\mathbf{U} \odot \mathbf{V})}{\partial x} = \mathbf{U} \odot \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \odot \mathbf{V} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{V} = \mathbf{V}(x))$$

以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial(\mathbf{U} \odot \mathbf{V})}{\partial x} \right)_{ij} &= \frac{\partial(\mathbf{U} \odot \mathbf{V})_{ij}}{\partial x} = \frac{\partial u_{ij} v_{ij}}{\partial x} = u_{ij} \frac{\partial v_{ij}}{\partial x} + \frac{\partial u_{ij}}{\partial x} v_{ij} \\ &= u_{ij} \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right)_{ij} v_{ij} \\ &= \left(\mathbf{U} \odot \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right)_{ij} + \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \odot \mathbf{V} \right)_{ij} \end{aligned}$$

行列のスカラによる微分

行列のスカラによる微分 (逆行列)

$$\frac{\partial \mathbf{U}^{-1}}{\partial x} = -\mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x))$$

$\frac{\partial \mathbf{U}\mathbf{V}}{\partial x} = \mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{V}$ に, $\mathbf{U}, \mathbf{V} = \mathbf{U}, \mathbf{U}^{-1}$ を代入する.

左辺は $\frac{\partial \mathbf{I}}{\partial x} = \mathbf{0}$, 右辺は $\mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{U}^{-1}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1}$ であるから,

$$\begin{aligned} \mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{U}^{-1}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{0} &\implies \mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{U}^{-1}}{\partial x} = -\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1} \\ &\implies \frac{\partial \mathbf{U}^{-1}}{\partial x} = -\mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1} \end{aligned}$$

重要な式の1つ. スカラの場合における, $\frac{d}{dx} \frac{1}{x} = -\frac{1}{x^2}$ に対応する.

行列のスカラーによる微分

行列のスカラーによる微分 (逆行列の線形変換)

$$\frac{\partial \mathbf{A} \mathbf{U}^{-1}}{\partial x} = -\mathbf{A} \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{A} \text{ は定数})$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}^{-1} \mathbf{A}}{\partial x} = -\mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{A} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{A} \text{ は定数})$$

$\frac{\partial \mathbf{A} \mathbf{U}}{\partial x} = \mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x}$, $\frac{\partial \mathbf{U} \mathbf{B}}{\partial x} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{B}$ と, 逆行列の微分の式から確認できる.

行列のスカラによる微分

行列のスカラによる微分 (逆行列の 2 次微分)

$$\frac{\partial^2 \mathbf{U}^{-1}}{\partial x \partial y} = \mathbf{U}^{-1} \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} - \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial x \partial y} + \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right) \mathbf{U}^{-1}$$

$(\mathbf{U} = \mathbf{U}(x, y))$

先ほどの結果 (逆行列, 行列積) を用いて, 以下のように示せる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathbf{U}^{-1}}{\partial x \partial y} &= \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{U}^{-1}}{\partial y} = -\frac{\partial}{\partial x} \left(\mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} \mathbf{U}^{-1} \right) \\ &= -\left(\frac{\partial \mathbf{U}^{-1}}{\partial x} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} \mathbf{U}^{-1} + \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial x \partial y} \mathbf{U}^{-1} + \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} \frac{\partial \mathbf{U}^{-1}}{\partial x} \right) \\ &= \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} \mathbf{U}^{-1} - \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial^2 \mathbf{U}}{\partial x \partial y} \mathbf{U}^{-1} + \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial y} \mathbf{U}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{U}^{-1} \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

行列のスカラーによる微分 (逆行列の, 成分による微分)

$\mathbf{X} = (x_{ij})$ の逆行列の (k, l) 成分を, \mathbf{X} の (i, j) 成分で微分すると,

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^{-1})_{kl}}{\partial x_{ij}} = - (\mathbf{X}^{-1})_{ki} (\mathbf{X}^{-1})_{jl}$$

逆行列の結果を用いて, 次のように示せる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{X}^{-1})_{kl}}{\partial x_{ij}} &= - \left(\mathbf{X}^{-1} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ij}} \mathbf{X}^{-1} \right)_{kl} \\ &= - \sum_m (\mathbf{X}^{-1})_{km} \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ij}} \mathbf{X}^{-1} \right)_{ml} \\ &= - \sum_m (\mathbf{X}^{-1})_{km} \left(\sum_n \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ij}} \right)_{mn} (\mathbf{X}^{-1})_{nl} \right) \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

ここで, $\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ij}}$ は, (i, j) 成分のみが 1, それ以外の成分が 0 である. $\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ij}}$ の (m, n) 成分は, クロネッカーのデルタを使って, $\delta_{im}\delta_{jn}$ とかける ($i, j = m, n$ のときのみ 1).

$$\begin{aligned}\frac{\partial (\mathbf{X}^{-1})_{kl}}{\partial x_{ij}} &= - \sum_m (\mathbf{X}^{-1})_{km} \left(\sum_n \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ij}} \right)_{mn} (\mathbf{X}^{-1})_{nl} \right) \\ &= - \sum_m (\mathbf{X}^{-1})_{km} \left(\sum_n \delta_{im}\delta_{jn} (\mathbf{X}^{-1})_{nl} \right) \\ &= - \sum_m (\mathbf{X}^{-1})_{km} \delta_{im} (\mathbf{X}^{-1})_{jl} \\ &= - (\mathbf{X}^{-1})_{ki} (\mathbf{X}^{-1})_{jl}\end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

行列の成分による微分

$$\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ij}} = \mathbf{J}^{ij}$$

\mathbf{J}^{ij} は, (i, j) 成分のみが 1 で, それ以外の成分が 0 であるような行列.

$$\mathbf{J}^{ij} \equiv \begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ & 0 & 0 & 0 & \\ & 0 & 1 & 0 & \\ & 0 & 0 & 0 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}, \quad (\mathbf{J}^{ij})_{kl} = \delta_{ik}\delta_{jl} = \delta_{ki}\delta_{lj}$$

行列のスカラーによる微分

行列積の、成分による微分

$$\frac{\partial (\mathbf{XA})_{kl}}{\partial x_{ij}} = \delta_{ki} a_{jl} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{A})_{kl}}{\partial x_{ij}} = \delta_{kj} a_{il} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

以下のように示せる. ここで, $\frac{\partial x_{km}}{\partial x_{ij}} = \delta_{ki} \delta_{mj}$ を用いる.

$$\frac{\partial (\mathbf{XA})_{kl}}{\partial x_{ij}} = \frac{\partial}{\partial x_{ij}} \sum_m x_{km} a_{ml} = \sum_m \frac{\partial x_{km}}{\partial x_{ij}} a_{ml} = \sum_m \delta_{ki} \delta_{mj} a_{ml} = \delta_{ki} a_{jl}$$

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{A})_{kl}}{\partial x_{ij}} = \frac{\partial}{\partial x_{ij}} \sum_m x_{mk} a_{ml} = \sum_m \frac{\partial x_{mk}}{\partial x_{ij}} a_{ml} = \sum_m \delta_{mi} \delta_{kj} a_{ml} = \delta_{kj} a_{il}$$

行列のスカラーによる微分

行列積の、成分による微分

$$\frac{\partial (\mathbf{XA})_{kl}}{\partial x_{ij}} = (\mathbf{J}^{ij} \mathbf{A})_{kl} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{A})_{kl}}{\partial x_{ij}} = (\mathbf{J}^{ji} \mathbf{A})_{kl} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

先ほどの結果を用いて、以下のように示せる.

$$\frac{\partial (\mathbf{XA})_{kl}}{\partial x_{ij}} = \delta_{ki} a_{jl} = \sum_m \delta_{ki} \delta_{mj} a_{ml} = \sum_m (\mathbf{J}^{ij})_{km} a_{ml} = (\mathbf{J}^{ij} \mathbf{A})_{kl}$$

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{A})_{kl}}{\partial x_{ij}} = \delta_{kj} a_{il} = \sum_m \delta_{kj} \delta_{mi} a_{ml} = \sum_m (\mathbf{J}^{ji})_{km} a_{ml} = (\mathbf{J}^{ji} \mathbf{A})_{kl}$$

\mathbf{J}^{ij} は、 (i, j) 成分のみが 1 で、それ以外の成分が 0 であるような行列.

行列のスカラーによる微分

行列の累乗の、成分による微分

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^n)_{kl}}{\partial x_{ij}} = \sum_{r=0}^{n-1} (\mathbf{X}^r \mathbf{J}^{ij} \mathbf{X}^{n-r-1})_{kl}$$

(\mathbf{J}^{ij} は, (i, j) 成分のみが 1 で, それ以外の成分が 0 である行列)

以下のように示せる. ここでの項の展開は, 第 1 回の行列積で確認した.

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^n)_{kl}}{\partial x_{ij}} = \frac{\partial}{\partial x_{ij}} \underbrace{\sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{n-1}}}_{n-1 \text{ 個}} \underbrace{x_{k,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l}}_{n \text{ 個の項}}$$

\mathbf{J}^{ij} は, (i, j) 成分のみが 1 であるから, 次のようにかける.

$$(\mathbf{J}^{ij})_{kl} = \delta_{ki} \delta_{lj}$$

行列のスカラーによる微分

合成関数の微分と, $\frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ij}} = \delta_{ki}\delta_{lj}$ から,

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{X}^n)_{kl}}{\partial x_{ij}} &= \sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{n-1}} \left(\delta_{k,i}\delta_{u_1,j} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l} \right. \\ &\quad + x_{k,u_1} \delta_{u_1,i}\delta_{u_2,j} x_{u_2,u_3} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l} \\ &\quad \left. + \cdots + x_{k,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} \delta_{u_{n-1},i}\delta_{l,j} \right) \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

クロネッカーのデルタと、 $\delta_{ki}\delta_{lj} = (\mathbf{J}^{ij})_{kl}$ から、

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{X}^n)_{kl}}{\partial x_{ij}} &= \sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{n-1}} \left((\mathbf{J}^{ij})_{k,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l} \right. \\ &\quad + x_{k,u_1} (\mathbf{J}^{ij})_{u_1,u_2} x_{u_2,u_3} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l} \\ &\quad \left. + \cdots + x_{k,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} (\mathbf{J}^{ij})_{u_{n-1},l} \right) \end{aligned}$$

これを書き直せば、

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{X}^n)_{kl}}{\partial x_{ij}} &= (\mathbf{J}^{ij} \mathbf{X}^{n-1})_{kl} + (\mathbf{X} \mathbf{J}^{ij} \mathbf{X}^{n-2})_{kl} + \cdots + (\mathbf{X}^{n-1} \mathbf{J}^{ij})_{kl} \\ &= \sum_{r=0}^{n-1} (\mathbf{X}^r \mathbf{J}^{ij} \mathbf{X}^{n-r-1})_{kl} \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

行列積の、成分による微分

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X})_{kl}}{\partial x_{ij}} = \delta_{kj} (\mathbf{A} \mathbf{X})_{il} + \delta_{lj} (\mathbf{X}^\top \mathbf{A})_{ki} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

以下のように示せる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X})_{kl}}{\partial x_{ij}} &= \frac{\partial}{\partial x_{ij}} \sum_m x_{mk} (\mathbf{A} \mathbf{X})_{ml} = \frac{\partial}{\partial x_{ij}} \sum_m x_{mk} \sum_n a_{mn} x_{nl} \\ &= \sum_m \sum_n a_{mn} \left(x_{nl} \frac{\partial x_{mk}}{\partial x_{ij}} + x_{mk} \frac{\partial x_{nl}}{\partial x_{ij}} \right) \\ &= \sum_m \sum_n a_{mn} (\delta_{mi} \delta_{kj} x_{nl} + \delta_{ni} \delta_{lj} x_{mk}) \\ &= \delta_{kj} \sum_n a_{in} x_{nl} + \delta_{lj} \sum_m a_{mi} x_{mk} = \delta_{kj} (\mathbf{A} \mathbf{X})_{il} + \delta_{lj} (\mathbf{X}^\top \mathbf{A})_{ki} \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

行列のスカラーによる微分 (合成関数)

$g(\mathbf{A}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \mathbf{A}^n$ について (\mathbf{A}, c は定数. 例えば, 行列指数関数 $\exp(\mathbf{A})$),

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

以下のように示せる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(x\mathbf{A})}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \sum_{n=0}^{\infty} c_n (x\mathbf{A})^n = \sum_{n=1}^{\infty} c_n n x^{n-1} \mathbf{A}^n \\ &= \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n n (x\mathbf{A})^{n-1} \right) \mathbf{A} = \mathbf{A} \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n n (x\mathbf{A})^{n-1} \right) \end{aligned}$$

$$\left. \frac{\partial g(x\mathbf{A})}{\partial x} \right|_{x=1} \equiv g'(\mathbf{A}) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n n \mathbf{A}^{n-1} \text{ とすれば, 成り立つ.}$$

目次

- 1 概要
- 2 行列のスカラーによる微分
- 3 **スカラーの行列による微分**

スカラの行列による微分

- パターンが多く, 最も大変な部分.
- 行列式, トレース, 対数などが入った微分を扱う.
- 誤差逆伝播法で扱うのは, スカラの行列による微分.
- 損失関数 (スカラ) の重みパラメータ (行列) による微分.

③ スカラの行列による微分

- 線形変換, 二次式, 合成関数, 連鎖律
- トレースを含む微分

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (基本)

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

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

$$\frac{\partial (u + v)}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}} + \frac{\partial v}{\partial \mathbf{X}} \quad (u = u(\mathbf{X}), v = v(\mathbf{X}))$$

分子レイアウトを使っているので、 \mathbf{X} を $m \times n$ 行列とすると、微分 $\frac{\partial a}{\partial \mathbf{X}}$ は $n \times m$ 行列になることに注意 (転置記号 \top を付けた). $\frac{\partial a}{\partial \mathbf{X}}$ の (i, j) 成分は、 \mathbf{X} の (j, i) 成分 x_{ji} による微分 $\frac{\partial a}{\partial x_{ji}}$ である.

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (合成関数, 連鎖律)

$$\frac{\partial uv}{\partial \mathbf{X}} = u \frac{\partial v}{\partial \mathbf{X}} + v \frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}} \quad (u = u(\mathbf{X}), v = v(\mathbf{X}))$$
$$\frac{\partial g(u)}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial g(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}} \quad (u = u(\mathbf{X}))$$

以下のように, 要素ごとに示せる.

$$\left(\frac{\partial uv}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} = \frac{\partial uv}{\partial x_{ji}} = u \frac{\partial v}{\partial x_{ji}} + v \frac{\partial u}{\partial x_{ji}} = u \left(\frac{\partial v}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} + v \left(\frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij}$$
$$\left(\frac{\partial g(u)}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} = \frac{\partial g(u)}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial g(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial g(u)}{\partial u} \left(\frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij}$$

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (合成関数, 連鎖律)

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

以下のように, 要素ごとに示せる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f(g(u))}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial f(g(u))}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial f(g)}{\partial g} \frac{\partial g(u)}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x_{ji}} \\ &= \frac{\partial f(g)}{\partial g} \frac{\partial g(u)}{\partial u} \left(\frac{\partial u}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} \end{aligned}$$

スカラーの行列による微分

スカラーの行列による微分 (合成関数, 連鎖律)

$$\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{ij}} = \text{tr} \left(\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_{ij}} \right) \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{X}))$$

以下のように示せる. \mathbf{U} の各成分を, u_{ij} とする.

$$\begin{aligned} \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial x_{ij}} &= \sum_k \sum_l \frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial u_{kl}} \frac{\partial u_{kl}}{\partial x_{ij}} = \sum_k \sum_l \left(\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \right)_{lk} \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_{ij}} \right)_{kl} \\ &= \sum_l \left(\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_{ij}} \right)_{ll} = \text{tr} \left(\frac{\partial g(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{U}} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x_{ij}} \right) \end{aligned}$$

$\frac{\partial a}{\partial \mathbf{X}}$ の (i, j) 成分は $\frac{\partial a}{\partial x_{ji}}$, $\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x}$ の (i, j) 成分は $\frac{\partial a_{ij}}{\partial x}$ となることに注意. トレース $\text{tr}(\mathbf{A})$ は, 行列 \mathbf{A} の対角成分の総和である.

スカラーの行列による微分

スカラーの行列による微分 (行列, ベクトル積)

$$\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X} \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{b} \mathbf{a}^\top \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b} \text{ は定数})$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X} \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X} \mathbf{b}}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k a_k (\mathbf{X} \mathbf{b})_k \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k a_k \sum_l x_{kl} b_l = \sum_k a_k \sum_l b_l \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} \\ &= \sum_k a_k \sum_l b_l \delta_{kj} \delta_{li} = a_j b_i = (\mathbf{b} \mathbf{a}^\top)_{ij} \end{aligned}$$

$\frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}}$ は, $k, l = j, i$ のときのみ 1 であるから, $\delta_{kj} \delta_{li}$ とかける.

スカラーの行列による微分

スカラーの行列による微分 (行列, ベクトル積)

$$\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{a} \mathbf{b}^\top \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b} \text{ は定数})$$

以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{b}}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k a_k \left(\mathbf{X}^\top \mathbf{b} \right)_k \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k a_k \sum_l x_{lk} b_l = \sum_k a_k \sum_l b_l \frac{\partial x_{lk}}{\partial x_{ji}} \\ &= \sum_k a_k \sum_l b_l \delta_{lj} \delta_{ki} = a_i b_j = \left(\mathbf{a} \mathbf{b}^\top \right)_{ij} \end{aligned}$$

$\frac{\partial x_{lk}}{\partial x_{ji}}$ は, $l, k = j, i$ のときのみ 1 であるから, $\delta_{lj} \delta_{ki}$ とかける.

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (行列, ベクトル積)

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

$\mathbf{a}^\top \mathbf{X} \mathbf{b}$, $\mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{b}$ の微分の式から確認できる.

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (二次式)

$$\frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{Xb}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{Xb}}{\partial \mathbf{X}} = (\mathbf{ab}^\top + \mathbf{ba}^\top) \mathbf{X}^\top \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b} \text{ は定数})$$

以下のように、要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{Xb}}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{Xb}}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{Xa})_k (\mathbf{Xb})_k \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \left(\sum_l x_{kl} a_l \right) \left(\sum_m x_{km} b_m \right) \\ &= \sum_k \sum_l a_l \sum_m b_m \left(x_{km} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{km}}{\partial x_{ji}} \right) \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

ここで, $\frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} = \delta_{kj}\delta_{li}$, $\frac{\partial x_{km}}{\partial x_{ji}} = \delta_{kj}\delta_{mi}$ を代入すれば,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{Xb}}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \sum_k \sum_l a_l \sum_m b_m \left(x_{km} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{km}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= \sum_k \sum_l a_l \sum_m b_m (x_{km} \delta_{kj} \delta_{li} + x_{kl} \delta_{kj} \delta_{mi}) \\ &= a_i \sum_m b_m x_{jm} + b_i \sum_l a_l x_{jl} = a_i (\mathbf{Xb})_j + b_i (\mathbf{Xa})_j \\ &= \left(\mathbf{a} (\mathbf{Xb})^\top \right)_{ij} + \left(\mathbf{b} (\mathbf{Xa})^\top \right)_{ij} = \left(\mathbf{ab}^\top \mathbf{X}^\top + \mathbf{ba}^\top \mathbf{X}^\top \right)_{ij} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (二次式)

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X} \mathbf{X}^\top \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{X}^\top (\mathbf{a} \mathbf{b}^\top + \mathbf{b} \mathbf{a}^\top) \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b} \text{ は定数})$$

先ほどと同様に、要素ごとに確認できる (練習問題).

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{b}}{\partial x_{ji}} \\ &= \sum_k \sum_l a_l \sum_m b_m \left(x_{mk} \frac{\partial x_{lk}}{\partial x_{ji}} + x_{lk} \frac{\partial x_{mk}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= a_j \sum_m b_m x_{mi} + b_j \sum_l a_l x_{li} = \left(\mathbf{X}^\top \mathbf{b} \mathbf{a}^\top + \mathbf{X}^\top \mathbf{a} \mathbf{b}^\top \right)_{ij} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (二次式)

$$\frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xb})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C} \mathbf{Xb}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{ab}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C}^\top + \mathbf{ba}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C}$$

(a, b, C は定数)

以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xb})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xb})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{Xa})_k (\mathbf{CXb})_k \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \left(\sum_l x_{kl} a_l \right) \left(\sum_m c_{km} (\mathbf{Xb})_m \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} a_l \sum_m c_{km} \sum_n x_{mn} b_n \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

式変形を続けると、次のようになる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xb})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} a_l \sum_m c_{km} \sum_n x_{mn} b_n \\ &= \sum_k \sum_l a_l \sum_m c_{km} \sum_n b_n \left(x_{mn} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{mn}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= \sum_k \sum_l a_l \sum_m c_{km} \sum_n b_n (\delta_{kj} \delta_{li} x_{mn} + \delta_{mj} \delta_{ni} x_{kl}) \\ &= a_i \sum_m c_{jm} \sum_n b_n x_{mn} + b_i \sum_k c_{kj} \sum_l a_l x_{kl} \\ &= a_i \sum_m c_{jm} (\mathbf{Xb})_m + b_i \sum_k c_{kj} (\mathbf{Xa})_k \\ &= a_i (\mathbf{CXb})_j + b_i (\mathbf{C}^\top \mathbf{Xa})_j = \left(\mathbf{a} (\mathbf{CXb})^\top \right)_{ij} + \left(\mathbf{b} (\mathbf{C}^\top \mathbf{Xa})^\top \right)_{ij} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (二次式)

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{C} (\mathbf{X}^\top \mathbf{b})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X} \mathbf{C} \mathbf{X}^\top \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{C}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{a} \mathbf{b}^\top + \mathbf{C} \mathbf{X}^\top \mathbf{b} \mathbf{a}^\top$$

(a, b, C は定数)

以下のように、要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{C} (\mathbf{X}^\top \mathbf{b})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{C} (\mathbf{X}^\top \mathbf{b})}{\partial x_{ji}} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})_k (\mathbf{C} \mathbf{X}^\top \mathbf{b})_k \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{lk} a_l \sum_m c_{km} \sum_n x_{nm} b_n \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

式変形を続けると、次のようになる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{C} (\mathbf{X}^\top \mathbf{b})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{lk} a_l \sum_m c_{km} \sum_n x_{nm} b_n \\ &= \sum_k \sum_l a_l \sum_m c_{km} \sum_n b_n \left(x_{nm} \frac{\partial x_{lk}}{\partial x_{ji}} + x_{lk} \frac{\partial x_{nm}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= \sum_k \sum_l a_l \sum_m c_{km} \sum_n b_n (\delta_{lj} \delta_{ki} x_{nm} + \delta_{nj} \delta_{mi} x_{lk}) \\ &= a_j \sum_m c_{im} \sum_n b_n x_{nm} + b_j \sum_k c_{ki} \sum_l a_l x_{lk} \\ &= a_j \sum_m c_{im} (\mathbf{X}^\top \mathbf{b})_m + b_j \sum_k c_{ki} (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})_k \\ &= a_j (\mathbf{C} \mathbf{X}^\top \mathbf{b})_i + b_j (\mathbf{C}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{a})_i = (\mathbf{C} \mathbf{X}^\top \mathbf{b} \mathbf{a}^\top + \mathbf{C}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{a} \mathbf{b}^\top)_{ij} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (二次式)

$$\frac{\partial (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xd} + \mathbf{e})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{a} (\mathbf{Xd} + \mathbf{e})^\top \mathbf{C}^\top + \mathbf{d} (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C}$$

($\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{C}, \mathbf{d}, \mathbf{e}$ は定数)

$\mathbf{a}^\top \mathbf{Xb}$, $\mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{b}$, $\mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C} \mathbf{Xb}$ についての微分の式を使えばよい (大変!).

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xd} + \mathbf{e})}{\partial \mathbf{X}} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} (\mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C} \mathbf{Xd} + \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C} \mathbf{e} + \mathbf{b}^\top \mathbf{C} \mathbf{Xd} + \mathbf{b}^\top \mathbf{C} \mathbf{e}) \\ &= \mathbf{ad}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C}^\top + \mathbf{da}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C} + \mathbf{a} (\mathbf{C} \mathbf{e})^\top + \mathbf{d} (\mathbf{b}^\top \mathbf{C}) \\ &= \mathbf{a} (\mathbf{d}^\top \mathbf{X}^\top + \mathbf{e}^\top) \mathbf{C}^\top + \mathbf{d} (\mathbf{a} \mathbf{X}^\top + \mathbf{b}^\top) \mathbf{C} \\ &= \mathbf{a} (\mathbf{Xd} + \mathbf{e})^\top \mathbf{C}^\top + \mathbf{d} (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (二次式)

$$\frac{\partial (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{a} (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top (\mathbf{C} + \mathbf{C}^\top) \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{C} \text{ は定数})$$

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

$$\frac{\partial (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{a} (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C} \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{C} \text{ は定数})$$

以下の式について, $\mathbf{d}, \mathbf{e} \rightarrow \mathbf{a}, \mathbf{b}$ とすればよい.

$$\frac{\partial (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xd} + \mathbf{e})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{a} (\mathbf{Xd} + \mathbf{e})^\top \mathbf{C}^\top + \mathbf{d} (\mathbf{Xa} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C}$$

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (二次式)

$$\frac{\partial (\mathbf{a} - \mathbf{X}\mathbf{b})^\top \mathbf{C} (\mathbf{a} - \mathbf{X}\mathbf{b})}{\partial \mathbf{X}} = -\mathbf{b} (\mathbf{a} - \mathbf{X}\mathbf{b})^\top (\mathbf{C} + \mathbf{C}^\top) \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{C} \text{ は定数})$$

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

$$\frac{\partial (\mathbf{a} - \mathbf{X}\mathbf{b})^\top \mathbf{C} (\mathbf{a} - \mathbf{X}\mathbf{b})}{\partial \mathbf{X}} = -2\mathbf{b} (\mathbf{a} - \mathbf{X}\mathbf{b})^\top \mathbf{C} \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{C} \text{ は定数})$$

以下の式について, $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{d}, \mathbf{e} \rightarrow -\mathbf{b}, \mathbf{a}, -\mathbf{b}, \mathbf{a}$ とすればよい.

$$\frac{\partial (\mathbf{X}\mathbf{a} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C} (\mathbf{X}\mathbf{d} + \mathbf{e})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{a} (\mathbf{X}\mathbf{d} + \mathbf{e})^\top \mathbf{C}^\top + \mathbf{d} (\mathbf{X}\mathbf{a} + \mathbf{b})^\top \mathbf{C}$$

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (ノルムの二乗)

$$\frac{\partial \|\mathbf{Xa}\|^2}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{Xa}}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{a}\mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \quad (\mathbf{a} \text{ は定数})$$

$$\frac{\partial \|\mathbf{X}^\top \mathbf{a}\|^2}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{a}}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{X}^\top \mathbf{a}\mathbf{a}^\top \quad (\mathbf{a} \text{ は定数})$$

$(\mathbf{Xa})^\top \mathbf{Xb}$, $(\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{b}$ の微分の式から確認できる.

スカラの行列による微分

スカラの行列による微分 (二次式)

$$\frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xa})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C} \mathbf{Xa}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{aa}^\top \mathbf{X}^\top (\mathbf{C} + \mathbf{C}^\top)$$
$$\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{C} (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X} \mathbf{C} \mathbf{X}^\top \mathbf{a}}{\partial \mathbf{X}} = (\mathbf{C} + \mathbf{C}^\top) \mathbf{X}^\top \mathbf{aa}^\top$$

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

$$\frac{\partial (\mathbf{Xa})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xa})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C} \mathbf{Xa}}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{aa}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{C}$$
$$\frac{\partial (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{C} (\mathbf{X}^\top \mathbf{a})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X} \mathbf{C} \mathbf{X}^\top \mathbf{a}}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{C} \mathbf{X}^\top \mathbf{aa}^\top \quad (\mathbf{a}, \mathbf{C} \text{ は定数})$$

$(\mathbf{Xa})^\top \mathbf{C} (\mathbf{Xb})$, $(\mathbf{X}^\top \mathbf{a})^\top \mathbf{C} (\mathbf{X}^\top \mathbf{b})$ の微分の式から確認できる.

行列のスカラーによる微分

行列の累乗の、成分による微分

$$\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^n \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} = \sum_{r=0}^{n-1} \mathbf{X}^{n-r-1} \mathbf{b} \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^r \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b} \text{ は定数})$$

以下のように、要素ごとに確認できる。ここでの項の展開は、第1回の行列積で確認した。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^n \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^n \mathbf{b}}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l a_k (\mathbf{X}^n)_{kl} b_l \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \underbrace{\sum_k \underbrace{\sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{n-1}}}_{n-1 \text{ 個}}}_{n-1 \text{ 個}} \sum_l a_k \underbrace{x_{k,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l}}_{n \text{ 個の項}} b_l \end{aligned}$$

行列のスカラーによる微分

合成関数の微分と, $\frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} = \delta_{kj}\delta_{li}$ から,

$$\left(\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^n \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} = \sum_k \sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{n-1}} \sum_l \left(\begin{aligned} & a_k \delta_{k,j} \delta_{u_1,i} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l} b_l \\ & + a_k x_{k,u_1} \delta_{u_1,j} \delta_{u_2,i} x_{u_2,u_3} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l} b_l \\ & + \cdots + a_k x_{k,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} \delta_{u_{n-1},j} \delta_{l,i} b_l \end{aligned} \right)$$

行列のスカラーによる微分

クロネッカーのデルタを適用して,

$$\left(\frac{\partial \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^n \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} = \sum_k \sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{n-1}} \sum_l \left(a_j x_{i,u_2} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l} b_l \right. \\ \left. + a_k x_{k,j} x_{i,u_3} \cdots x_{u_{n-2},u_{n-1}} x_{u_{n-1},l} b_l + \cdots + a_k x_{k,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{n-2},j} b_i \right)$$

これを書き直せば,

$$= \sum_l (\mathbf{X}^{n-1})_{il} b_l a_j + \sum_l (\mathbf{X}^{n-2})_{il} b_l (\mathbf{a}^\top \mathbf{X})_j + \cdots + b_i (\mathbf{a}^\top \mathbf{X}^{n-1})_j \\ = (\mathbf{X}^{n-1} \mathbf{b} \mathbf{a}^\top)_{ij} + (\mathbf{X}^{n-2} \mathbf{b} \mathbf{a}^\top \mathbf{X})_{ij} + \cdots + (\mathbf{b} \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^{n-1})_{ij} \\ = \sum_{r=0}^{n-1} \mathbf{X}^{n-r-1} \mathbf{b} \mathbf{a}^\top \mathbf{X}^r$$

行列のスカラーによる微分

行列の累乗の、成分による微分

$$\frac{\partial \mathbf{a}^\top (\mathbf{X}^n)^\top \mathbf{X}^n \mathbf{b}}{\partial \mathbf{X}} = \sum_{r=0}^{n-1} \left((\mathbf{X}^r)^\top \mathbf{X}^n \mathbf{b} \mathbf{a}^\top (\mathbf{X}^{n-r-1})^\top + \mathbf{X}^{n-r-1} \mathbf{b} \mathbf{a}^\top (\mathbf{X}^n)^\top \mathbf{X}^r \right) \quad (\mathbf{a}, \mathbf{b} \text{ は定数})$$

先ほどと同様の議論によって導出できる (証明は省略).

③ スカラの行列による微分

- 線形変換, 二次式, 合成関数, 連鎖律
- トレースを含む微分

行列のトレース (再掲)

- \mathbf{A} を, n 次正方行列とする.
- \mathbf{A} の対角成分 a_{ii} の和を, \mathbf{A} の**トレース**とよぶ.
- トレースを, $\text{tr}(\mathbf{A})$ とかく.

$$\text{tr}(\mathbf{A}) = \sum_i a_{ii}$$

- 単位行列 \mathbf{I}_n のトレースは n .
- 和: $\text{tr}(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \text{tr}(\mathbf{A}) + \text{tr}(\mathbf{B})$
- 転置: $\text{tr}(\mathbf{A}^\top) = \text{tr}(\mathbf{A})$
- 循環性: $\text{tr}(\mathbf{AB}) = \text{tr}(\mathbf{BA})$
- 循環性: $\text{tr}(\mathbf{ABC}) = \text{tr}(\mathbf{BCA}) = \text{tr}(\mathbf{CAB})$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (基本)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{I}$$

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{U} + \mathbf{V})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{X}} + \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{V})}{\partial \mathbf{X}} \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(\mathbf{X}), \mathbf{V} = \mathbf{V}(\mathbf{X}))$$

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(a\mathbf{U})}{\partial \mathbf{X}} = a \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{U})}{\partial \mathbf{X}}$$

最初の式については、以下のように、要素ごとに確認できる (\mathbf{I} の (i, j) 成分は、クロネッカーのデルタ δ_{ij}).

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k x_{kk} = \sum_k \frac{\partial x_{ji}}{\partial x_{kk}} \\ &= \sum_k \delta_{ik} \delta_{jk} = \delta_{ij} \quad (\because k = j \text{ のときのみ } \delta_{jk} = 1) \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

行列積のトレースを含む微分

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{UV})}{\partial x} = \operatorname{tr}\left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{V} + \mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x}\right) \quad (\mathbf{U} = \mathbf{U}(x), \mathbf{V} = \mathbf{V}(x))$$

以下のように示せる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{UV})}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \sum_k (\mathbf{UV})_{kk} = \frac{\partial}{\partial x} \sum_k \sum_l u_{kl} v_{lk} \\ &= \sum_k \sum_l \left(\frac{\partial u_{kl}}{\partial x} v_{lk} + u_{kl} \frac{\partial v_{lk}}{\partial x} \right) = \sum_k \sum_l \left(\left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \right)_{kl} v_{lk} + u_{kl} \left(\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right)_{lk} \right) \\ &= \sum_k \left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{V} \right)_{kk} + \sum_k \left(\mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x} \right)_{kk} = \operatorname{tr}\left(\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} \mathbf{V}\right) + \operatorname{tr}\left(\mathbf{U} \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial x}\right) \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (行列積)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

$\operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \operatorname{tr}(\mathbf{B}\mathbf{A})$ であることに注意. 以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{A}\mathbf{X})_{kk} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l a_{kl} x_{lk} = \sum_k \sum_l a_{kl} \frac{\partial x_{lk}}{\partial x_{ji}} \\ &= \sum_k \sum_l a_{kl} \delta_{ki} \delta_{lj} = a_{ij} \quad (\because k, l = i, j \text{ のとき以外は } 0) \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (行列積)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^\top)}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^\top \mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^\top \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

$\operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{B}) = \operatorname{tr}(\mathbf{B}\mathbf{A})$ であることに注意. 以下のように, 要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^\top)}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^\top)}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{A}\mathbf{X}^\top)_{kk} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l a_{kl} x_{kl} = \sum_k \sum_l a_{kl} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} \\ &= \sum_k \sum_l a_{kl} \delta_{kj} \delta_{li} = a_{ji} \quad (\because k, l = j, i \text{ のとき以外は } 0) \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (行列積)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{AXB})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XBA})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{BAX})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{BA} \quad (\mathbf{A}, \mathbf{B} \text{ は定数})$$

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{AX}^\top \mathbf{B})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^\top \mathbf{BA})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{BAX}^\top)}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^\top \mathbf{B}^\top \quad (\mathbf{A}, \mathbf{B} \text{ は定数})$$

$\operatorname{tr}(\mathbf{ABC}) = \operatorname{tr}(\mathbf{BCA}) = \operatorname{tr}(\mathbf{CAB})$ であることに注意.

トレースの循環性とよばれる. $\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{AX})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}$, $\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{AX}^\top)}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A}^\top$ より確認できる.

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (逆行列)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-1}\mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} = -\mathbf{X}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

以下のように、要素ごとに確認できる (逆行列の微分の式を用いる).

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})_{kk} \\ &= \sum_k \left(\mathbf{A} \frac{\partial \mathbf{X}^{-1}}{\partial x_{ji}} \right)_{kk} = - \sum_k \left(\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ji}} \mathbf{X}^{-1} \right)_{kk} \\ &= - \sum_k \sum_l (\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})_{kl} \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ji}} \mathbf{X}^{-1} \right)_{lk} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

式変形を続けると、次のようになる。

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})}{\partial \mathbf{X}}\right)_{ij} &= -\sum_k \sum_l (\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})_{kl} \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ji}} \mathbf{X}^{-1}\right)_{lk} \\ &= -\sum_k \sum_l (\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})_{kl} \sum_m \left(\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial x_{ji}}\right)_{lm} (\mathbf{X}^{-1})_{mk} \\ &= -\sum_k \sum_l (\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})_{kl} \sum_m \frac{\partial x_{lm}}{\partial x_{ji}} (\mathbf{X}^{-1})_{mk} \\ &= -\sum_k \sum_l (\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})_{kl} \sum_m \delta_{lj} \delta_{mi} (\mathbf{X}^{-1})_{mk} \\ &= -\sum_k (\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})_{kj} (\mathbf{X}^{-1})_{ik} \quad (\because l, m = j, i) \\ &= -(\mathbf{X}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{X}^{-1})_{ij}\end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (逆行列)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-1})}{\partial \mathbf{X}} = -\mathbf{X}^{-2}$$

$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})}{\partial \mathbf{X}} = -\mathbf{X}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1}$ に, $\mathbf{A} = \mathbf{I}$ を代入すればよい.

スカラの場合における, $\frac{d}{dx} \frac{1}{x} = -\frac{1}{x^2}$ とそっくりである.

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (逆行列)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1}\mathbf{B})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})}{\partial \mathbf{X}} = -\mathbf{X}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1}$$

(A は定数)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1})}{\partial \mathbf{X}} = -\mathbf{X}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{X}^{-1} \text{ に, } \mathbf{A} = \mathbf{B}\mathbf{A} \text{ を代入すればよい.}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二乗)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^2)}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{X}$$

以下のように、要素ごとに確認できる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^2)}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^2)}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{X}^2)_{kk} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} x_{lk} \\ &= \sum_k \sum_l \left(x_{lk} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{lk}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= \sum_k \sum_l (\delta_{li} \delta_{kj} x_{lk} + \delta_{ki} \delta_{lj} x_{kl}) = 2x_{ij} \end{aligned}$$

スカラの場合における, $(x^2)' = 2x$ とそっくりである.

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^2 \mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X} \mathbf{A} \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A} \mathbf{X}^2)}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{X} \mathbf{A} + \mathbf{A} \mathbf{X} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^2 \mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^2 \mathbf{A})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{X}^2 \mathbf{A})_{kk} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} (\mathbf{X} \mathbf{A})_{lk} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} \sum_m x_{lm} a_{mk} \\ &= \sum_k \sum_l \sum_m a_{mk} \left(x_{lm} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{lm}}{\partial x_{ji}} \right) \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

式変形を続けると、次のようになる。

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^2 \mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}}\right)_{ij} &= \sum_k \sum_l \sum_m a_{mk} \left(x_{lm} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{lm}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= \sum_k \sum_l \sum_m a_{mk} (\delta_{kj} \delta_{li} x_{lm} + \delta_{lj} \delta_{mi} x_{kl}) \\ &= \sum_m a_{mj} x_{im} + \sum_k a_{ik} x_{kj} = (\mathbf{X} \mathbf{A})_{ij} + (\mathbf{A} \mathbf{X})_{ij}\end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^\top \mathbf{A} \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A} \mathbf{X} \mathbf{X}^\top)}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X} \mathbf{X}^\top \mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{X}^\top (\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top)$$

(A は定数)

以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X} \mathbf{X}^\top \mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X} \mathbf{X}^\top \mathbf{A})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{X} \mathbf{X}^\top \mathbf{A})_{kk} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} (\mathbf{X}^\top \mathbf{A})_{lk} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} \sum_m x_{ml} a_{mk} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

式変形を続けると、次のようになる。

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top \mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}}\right)_{ij} &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} \sum_m x_{ml} a_{mk} \\ &= \sum_k \sum_l \sum_m a_{mk} \left(x_{ml} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{ml}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= \sum_k \sum_l \sum_m a_{mk} (\delta_{kj} \delta_{li} x_{ml} + \delta_{mj} \delta_{li} x_{kl}) \\ &= \sum_m a_{mj} x_{mi} + \sum_k a_{jk} x_{ki} = (\mathbf{X}^\top \mathbf{A})_{ij} + (\mathbf{X}^\top \mathbf{A}^\top)_{ij}\end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAX}^\top)}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{AX}^\top \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^\top \mathbf{XA})}{\partial \mathbf{X}} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top) \mathbf{X}^\top$$

(A は定数)

先ほどと同様に、要素ごとに確認できる (練習問題).

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^\top \mathbf{XA})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^\top \mathbf{XA})}{\partial x_{ji}} \\ &= \sum_k \sum_l \sum_m a_{mk} \left(x_{lm} \frac{\partial x_{lk}}{\partial x_{ji}} + x_{lk} \frac{\partial x_{lm}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= \sum_m a_{mi} x_{jm} + \sum_k a_{ik} x_{jk} = (\mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top)_{ij} + (\mathbf{AX}^\top)_{ij} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}\mathbf{X}^\top)}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^\top\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{X}^\top$$

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^\top\mathbf{A}\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{X}^\top (\mathbf{A} + \mathbf{A}^\top) \text{ に, } \mathbf{A} = \mathbf{I} \text{ を代入すればよい.}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\begin{aligned}\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})}{\partial \mathbf{X}} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{AX}^\top \mathbf{BX})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^\top \mathbf{BXA})}{\partial \mathbf{X}} \\ &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{BXAX}^\top)}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{AX}^\top \mathbf{B} + \mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B}^\top \\ &\quad (\mathbf{A}, \mathbf{B} \text{ は定数})\end{aligned}$$

多少煩雑であるが、以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})_{kk}$$

スカラの行列による微分

順に展開すると,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})_{kk} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} (\mathbf{AX}^\top \mathbf{B})_{lk} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} \sum_m a_{lm} (\mathbf{X}^\top \mathbf{B})_{mk} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} \sum_m a_{lm} \sum_n x_{nm} b_{nk} \\ &= \sum_k \sum_l \sum_m \sum_n a_{lm} b_{nk} \left(x_{nm} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{nm}}{\partial x_{ji}} \right) \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

微分を行って、項を整えると、

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \sum_k \sum_l \sum_m \sum_n a_{lm} b_{nk} \left(x_{nm} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{nm}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= \sum_k \sum_l \sum_m \sum_n a_{lm} b_{nk} (\delta_{kj} \delta_{li} x_{nm} + \delta_{mi} \delta_{nj} x_{kl}) \\ &= \sum_m \sum_n a_{im} b_{nj} x_{nm} + \sum_k \sum_l a_{li} b_{jk} x_{kl} \\ &= \sum_m a_{im} (\mathbf{X}^\top \mathbf{B})_{mj} + \sum_l a_{li} (\mathbf{X}^\top \mathbf{B}^\top)_{lj} \\ &= (\mathbf{AX}^\top \mathbf{B})_{ij} + (\mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B}^\top)_{ij} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\begin{aligned}\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAXB})}{\partial \mathbf{X}} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{AXBX})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XBXA})}{\partial \mathbf{X}} \\ &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{BXAX})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{AXB} + \mathbf{BXA} \quad (\mathbf{A}, \mathbf{B} \text{ は定数})\end{aligned}$$

こちらも多少煩雑であるが、以下のように、要素ごとに確認できる。

$$\left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAXB})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} = \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAXB})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{XAXB})_{kk}$$

スカラの行列による微分

式変形を続けると、次のようになる。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAXB})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAXB})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k (\mathbf{XAXB})_{kk} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_k \sum_l x_{kl} \sum_m a_{lm} \sum_n x_{mn} b_{nk} \\ &= \sum_k \sum_l \sum_m \sum_n a_{lm} b_{nk} \left(x_{mn} \frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} + x_{kl} \frac{\partial x_{mn}}{\partial x_{ji}} \right) \\ &= \sum_k \sum_l \sum_m \sum_n a_{lm} b_{nk} (\delta_{kj} \delta_{li} x_{mn} + \delta_{mj} \delta_{ni} x_{kl}) \\ &= \sum_m \sum_n a_{im} b_{nj} x_{mn} + \sum_k \sum_l a_{lj} b_{ik} x_{kl} \\ &= (\mathbf{AXB})_{ij} + (\mathbf{BXA})_{ij} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B} \mathbf{X} \mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A} \mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top (\mathbf{B} + \mathbf{B}^\top) \quad (\mathbf{A}, \mathbf{B} \text{ は定数})$$

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X} \mathbf{A} \mathbf{X}^\top \mathbf{B})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{A} \mathbf{X}^\top \mathbf{B} + \mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B}^\top \text{ を用いる.}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B} \mathbf{X} \mathbf{A})}{\partial \mathbf{X}} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X} \mathbf{A} \mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B})}{\partial \mathbf{X}} \quad (\because \text{循環性}) \\ &= (\mathbf{A} \mathbf{A}^\top) \mathbf{X}^\top \mathbf{B} + (\mathbf{A} \mathbf{A}^\top)^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B}^\top \quad (\because \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} \mathbf{A}^\top) \\ &= \mathbf{A} \mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B} + \mathbf{A} \mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B}^\top \\ &= \mathbf{A} \mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top (\mathbf{B} + \mathbf{B}^\top) \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{AXBX}^\top \mathbf{C})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{BX}^\top \mathbf{CA} + \mathbf{B}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{C}^\top \quad (\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C} \text{ は定数})$$

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{AX}^\top \mathbf{B} + \mathbf{A}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{B}^\top \text{ と, トレーズの循環性を用いる (練習問題).}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}((\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{B})\mathbf{C}(\mathbf{D}\mathbf{X} + \mathbf{E}))}{\partial \mathbf{X}} = (\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{B})\mathbf{C}\mathbf{D} + \mathbf{C}(\mathbf{D}\mathbf{X} + \mathbf{E})\mathbf{A}$$

($\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}, \mathbf{E}$ は定数)

$\operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B})$, $\operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X})$, $\operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{B}\mathbf{X})$ の微分の式から確認できる.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \operatorname{tr}((\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{B})\mathbf{C}(\mathbf{D}\mathbf{X} + \mathbf{E}))}{\partial \mathbf{X}} \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} (\operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{X}) + \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{C}\mathbf{E}) + \operatorname{tr}(\mathbf{B}\mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{X}) + \operatorname{tr}(\mathbf{B}\mathbf{C}\mathbf{E})) \\ &= (\mathbf{A}\mathbf{X}\mathbf{C}\mathbf{D} + \mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{X}\mathbf{A}) + \mathbf{C}\mathbf{E}\mathbf{A} + \mathbf{B}\mathbf{C}\mathbf{D} \\ &= (\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{B})\mathbf{C}\mathbf{D} + \mathbf{C}(\mathbf{D}\mathbf{X} + \mathbf{E})\mathbf{A} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (二次式)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}((\mathbf{AXB} + \mathbf{C})(\mathbf{AXB} + \mathbf{C})^\top)}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{B}(\mathbf{AXB} + \mathbf{C})^\top \mathbf{A}$$

(A, B, C は定数)

$\operatorname{tr}(\mathbf{XAX}^\top \mathbf{B})$, $\operatorname{tr}(\mathbf{AXB})$ の微分の式から確認できる.

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} (\operatorname{tr}(\mathbf{AXB} \mathbf{B}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{A}^\top) + \operatorname{tr}(\mathbf{AXB} \mathbf{C}^\top) + \operatorname{tr}(\mathbf{C} \mathbf{B}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{A}^\top) + \operatorname{tr}(\mathbf{C} \mathbf{C}^\top)) \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}} (\operatorname{tr}(\mathbf{X} \mathbf{B} \mathbf{B}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A}) + 2 \operatorname{tr}(\mathbf{AXB} \mathbf{C}^\top)) \quad (\because \operatorname{tr}(\mathbf{P}) = \operatorname{tr}(\mathbf{P}^\top), \text{循環性}) \\ &= (\mathbf{B} \mathbf{B}^\top \mathbf{X}^\top \mathbf{A}^\top \mathbf{A} + (\mathbf{B} \mathbf{B}^\top)^\top \mathbf{X}^\top (\mathbf{A}^\top \mathbf{A})^\top) + 2\mathbf{B} \mathbf{C}^\top \mathbf{A} = 2\mathbf{B}(\mathbf{AXB} + \mathbf{C})^\top \mathbf{A} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

- $\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-1})}{\partial \mathbf{X}} = -\mathbf{X}^{-2}$, $\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{I}$, $\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^2)}{\partial \mathbf{X}} = 2\mathbf{X}$ であった.
- スカラにおける微分 $(x^{-1})' = -x^{-2}$, $x' = 1$, $(x^2)' = 2x$ に対応している.
- この観測から, 以下が成り立つことが予想される:

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^k)}{\partial \mathbf{X}} = k\mathbf{X}^{k-1}$$

- $k > 0$, $k < 0$ の 2 つに場合分けして確認する.

スカラの行列による微分

以下が、 $k > 0$ で成立することを確認する.

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^k)}{\partial \mathbf{X}} = k\mathbf{X}^{k-1}$$

以下のように、要素ごとに確認する.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^k)}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^k)}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_l (\mathbf{X}^k)_{ll} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_l \underbrace{\sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{k-1}}}_{k-1 \text{ 個}} x_{l,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{k-2},u_{k-1}} x_{u_{k-1},l} \end{aligned}$$

このような項の展開は、第 1 回の行列積で確認した.

スカラの行列による微分

合成関数の微分を考えると ($\frac{\partial x_{kl}}{\partial x_{ji}} = \delta_{kj}\delta_{li}$ を使って),

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_l \underbrace{\sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{k-1}}}_{k-1 \text{ 個}} \underbrace{x_{l,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{k-2},u_{k-1}} x_{u_{k-1},l}}_{\text{項が } k \text{ 個}} \\ &= \sum_l \sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{k-1}} \left(\delta_{lj} \delta_{u_1,i} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{k-2},u_{k-1}} x_{u_{k-1},l} \right. \\ & \quad + x_{l,u_1} \delta_{u_1,j} \delta_{u_2,i} x_{u_2,u_3} \cdots x_{u_{k-1},l} \\ & \quad \left. + \cdots + x_{l,u_1} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{k-2},u_{k-1}} \delta_{u_{k-1},j} \delta_{l,i} \right) \\ &= k \sum_l \sum_{u_1} \cdots \sum_{u_{k-1}} \delta_{lj} \delta_{u_1,i} x_{u_1,u_2} \cdots x_{u_{k-2},u_{k-1}} x_{u_{k-1},l} \quad (\because \text{対称性}) \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

クロネッカーのデルタを適用して,

$$\begin{aligned} & k \sum_l \sum_{u_1} \cdots \sum_{u_{k-1}} \delta_{lj} \delta_{u_1, i} x_{u_1, u_2} \cdots x_{u_{k-2}, u_{k-1}} x_{u_{k-1}, l} \\ &= k \underbrace{\sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{k-1}} x_{i, u_2} \cdots x_{u_{k-2}, u_{k-1}} x_{u_{k-1}, j}}_{k-2 \text{ 個}} \end{aligned}$$

インデックスを置き換えると,

$$\begin{aligned} &= k \underbrace{\sum_{v_1} \cdots \sum_{v_{k-2}} x_{i, v_1} x_{v_1, v_2} \cdots x_{v_{k-3}, v_{k-2}} x_{v_{k-2}, j}}_{k-2 \text{ 個}} \\ &= k \left(\mathbf{X}^{k-1} \right)_{ij} = \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^k)}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

続いて、以下が $k > 0$ で成立することを確認する。

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-k})}{\partial \mathbf{X}} = -k\mathbf{X}^{-k-1}$$

先ほどと同じように、要素ごとに確認する。 \mathbf{X}^{-1} の各成分を、 y_{ij} とする。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-k})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} &= \frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-k})}{\partial x_{ji}} = \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \sum_l (\mathbf{X}^{-k})_{ll} \\ &= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \underbrace{\sum_l \sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{k-1}} y_{l,u_1} y_{u_1,u_2} \cdots y_{u_{k-2},u_{k-1}} y_{u_{k-1},l}}_{k-1 \text{ 個}} \end{aligned}$$

$$\frac{\partial (\mathbf{X}^{-1})_{kl}}{\partial x_{ij}} = -(\mathbf{X}^{-1})_{ki} (\mathbf{X}^{-1})_{jl} \text{ であるので, } \frac{\partial y_{kl}}{\partial x_{ij}} = -y_{ki} y_{jl}.$$

スカラの行列による微分

合成関数の微分を考えると ($\frac{\partial y_{kl}}{\partial x_{ji}} = -y_{kj}y_{il}$ を使って),

$$= \frac{\partial}{\partial x_{ji}} \underbrace{\sum_l \sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{k-1}}}_{k-1 \text{ 個}} \underbrace{y_{l,u_1} y_{u_1,u_2} \cdots y_{u_{k-2},u_{k-1}} y_{u_{k-1},l}}_{k \text{ 個}}$$

$$= - \sum_l \sum_{u_1} \sum_{u_2} \cdots \sum_{u_{k-1}} \left(\begin{aligned} & y_{lj} y_{i,u_1} y_{u_1,u_2} \cdots y_{u_{k-2},u_{k-1}} y_{u_{k-1},l} \\ & + y_{l,u_1} y_{u_1,j} y_{i,u_2} y_{u_2,u_3} \cdots y_{u_{k-2},u_{k-1}} y_{u_{k-1},l} \\ & + \cdots + \underbrace{y_{l,u_1} y_{u_1,u_2} \cdots y_{u_{k-2},u_{k-1}} y_{u_{k-1},j} y_{il}}_{\text{項が } k+1 \text{ 個}} \end{aligned} \right)$$

$$= -k \sum_l \sum_{u_1} \cdots \sum_{u_{k-1}} y_{i,u_1} y_{u_1,u_2} \cdots y_{u_{k-2},u_{k-1}} y_{u_{k-1},l} y_{lj} \quad (\because \text{対称性})$$

スカラの行列による微分

インデックスを置き換えると (y_{ij} は \mathbf{X}^{-1} の各成分であるので),

$$\begin{aligned} & -k \sum_l \sum_{u_1} \cdots \sum_{u_{k-1}} y_{i,u_1} y_{u_1,u_2} \cdots y_{u_{k-2},u_{k-1}} y_{u_{k-1},l} y_{lj} \\ &= -k \underbrace{\sum_{v_1} \sum_{v_2} \cdots \sum_{v_k}}_{k \text{ 個}} \underbrace{y_{i,v_1} y_{v_1,v_2} \cdots y_{v_{k-2},v_{k-1}} y_{v_{k-1},v_k} y_{v_k,j}}_{k+1 \text{ 個}} \\ &= -k \left(\mathbf{X}^{-(k+1)} \right)_{ij} = -k \left(\mathbf{X}^{-k-1} \right)_{ij} = \left(\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-k})}{\partial \mathbf{X}} \right)_{ij} \end{aligned}$$

スカラの行列による微分

- 以上より, $k > 0$ のとき, 次の 2 つが成り立つ.

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^k)}{\partial \mathbf{X}} = k\mathbf{X}^{k-1}$$
$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^{-k})}{\partial \mathbf{X}} = -k\mathbf{X}^{-k-1}$$

- また $k = 0$ のときは, $\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{I})}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{0}$ である.
- これらをまとめると, 任意の k について, 次がいえる.

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^k)}{\partial \mathbf{X}} = k\mathbf{X}^{k-1}$$

スカラの行列による微分

トレースを含む微分 (累乗)

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{X}^k)}{\partial \mathbf{X}} = k\mathbf{X}^{k-1}$$
$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^k)}{\partial \mathbf{X}} = \sum_{r=0}^{k-1} \mathbf{X}^r \mathbf{A} \mathbf{X}^{k-r-1} \quad (\mathbf{A} \text{ は定数})$$

2行目の式については、1行目と同様の議論によって導出できる。

2行目について、 $k=2$ とすると、先ほど確認した以下の式が得られる。

$$\frac{\partial \operatorname{tr}(\mathbf{A}\mathbf{X}^2)}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{X}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{X}$$

このスライドの概要

- ここまでで、以下の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
 - 行列のスカラによる微分
 - スカラの行列による微分
 - 逆行列, トレースのいった微分
- Wikipedia や The Matrix Cookbook に載っている式の、かなりの部分をみてきた。
- まだ、以下のパターンが残っている。
 - 行列式のいった微分
 - 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)
- 行列式のいった微分では、ヤコビの公式が重要である。