ガウス分布のμ, Σについての微分

(B.37)よりD次元のガウス分布

$$N(x|\mu,\Sigma)=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}$$

(μについて微分)

$$\frac{\partial N}{\partial \mu}=\frac{\partial}{\partial \mu}\frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}$$

スカラーの微分なのでチェーンルールが使える

$$=\frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}\frac{\partial}{\partial \mu}\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}$$

$$=N(x|\mu,\Sigma)\,\Sigma^{-1}(x-\mu)$$

$$\frac{\partial}{\partial \mu}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)$$

$$=\frac{\partial}{\partial \mu}\left(x^T\Sigma^{-1}x-2\mu^T\Sigma^{-1}x+\mu^T\Sigma^{-1}\mu\right)$$

$$=-2\Sigma^{-1}x+2\Sigma^{-1}\mu=-2\Sigma^{-1}(x-\mu)$$

$\frac{\partial}{\partial \mu}\mu^T\Sigma^{-1}x=\Sigma^{-1}x$ ← (C.19)より

$\frac{\partial}{\partial \mu}\mu^T\Sigma^{-1}\mu=\frac{\partial}{\partial \mu}\mathrm{Tr}(\mu^T\Sigma^{-1}\mu)$ ← スカラーのTr

$=\left\{\frac{\partial}{\partial \mu^T}\mathrm{Tr}(\mu^T\Sigma^{-1}\mu)\right\}^T$ ← 成分比較より

$=\left[\mu^T\left\{\Sigma^{-1}+(\Sigma^{-1})^T\right\}\right]^T$ ← (C.27)

$=2\Sigma^{-1}\mu$ ← Σ^{-1}は対称なので

（Σについての微分）

$$\frac{\partial N}{\partial \Sigma} = \frac{\partial}{\partial \Sigma}\frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}$$

スカラーの微分なので積の微分が使える

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\left(\frac{\partial}{\partial \Sigma}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\right)\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\} + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\frac{1}{|\Sigma|^{\frac{1}{2}}}\frac{\partial}{\partial \Sigma}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}\left(-\frac{1}{2}\right)|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}\Sigma^{-1}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\} + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{D}{2}}}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}\frac{1}{2}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\Sigma^{-1}$$

$$= -\frac{1}{2}\Sigma^{-1}N(x|\mu,\Sigma) + \frac{1}{2}\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\Sigma^{-1}N(x|\mu,\Sigma)$$

$$= -\frac{1}{2}\left\{\Sigma^{-1} - \Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\Sigma^{-1}\right\}N(x|\mu,\Sigma)$$

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}$$ ← スカラーの微分なのでチェーンルールが使える

$$= \exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}\frac{\partial}{\partial \Sigma}\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\exp\left\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right\}\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\Sigma^{-1}$$

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu) = -\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\Sigma^{-1}$$

$\frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}(x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu) = \frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}\mathrm{Tr}\left((x-\mu)^T\Sigma^{-1}(x-\mu)\right)$ ← スカラーのTr

$= \frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}\mathrm{Tr}\left(\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\right)$ ← (C.9)

$= \mathrm{Tr}\left(\frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\right)$ ← 成分計算よりTrとスカラー微分は交換可

$= \mathrm{Tr}\left(-\Sigma^{-1}\frac{\partial \Sigma}{\partial \Sigma_{ij}}\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\right)$ ← (C.21)

$= \mathrm{Tr}\left(-\Sigma^{-1}J^{ij}\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\right)$ ← J^{ij}はシングルエントリ行列

$= -\mathrm{Tr}\left(J^{ij}\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\Sigma^{-1}\right)$ ← (C.9)

$= -\left[\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\Sigma^{-1}\right]_{ji}$ ←

$\mathrm{Tr}\left(J^{12}\begin{pmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}\right) = \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}\right)$

$= \mathrm{Tr}\begin{pmatrix}a_{21} & a_{22}\\ 0 & 0\end{pmatrix} = a_{21}$

$\therefore \mathrm{Tr}(J^{ij}A) = A_{ji}$

$= -\left[\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\Sigma^{-1}\right]_{ij}$ ← $\Sigma^{-1}(x-\mu)(x-\mu)^T\Sigma^{-1}$は対称なので

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}\Sigma^{-1}$$

$$\frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}\ln|\Sigma|^{-\frac{1}{2}} = \frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}\ln|\Sigma|^{-\frac{1}{2}} = \frac{\frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}}{|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}}$$

一方

$\frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}\ln|\Sigma|^{-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}\ln|\Sigma| = -\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\Sigma^{-1}\frac{\partial \Sigma}{\partial \Sigma_{ij}}\right)$

$= -\frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\Sigma^{-1}J^{ij}\right)$ ← J^{ij}はシングルエントリ行列

$= -\frac{1}{2}(\Sigma^{-1})_{ji}$ ←

$\mathrm{Tr}(AJ^{12})$

$= \mathrm{Tr}\left(\begin{pmatrix}a_{11} & a_{12}\\ a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{pmatrix}\right)$

$= \mathrm{Tr}\begin{pmatrix}0 & a_{11}\\ 0 & a_{21}\end{pmatrix} = a_{21}$

$\therefore \mathrm{Tr}(AJ^{ij}) = A_{ji}$

$= -\frac{1}{2}(\Sigma^{-1})_{ij}$ ← Σ^{-1}は対称なので

よって

$$\frac{\frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}}{|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}} = -\frac{1}{2}(\Sigma^{-1})_{ij}$$

$$\therefore \frac{\partial}{\partial \Sigma_{ij}}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}|\Sigma|^{-\frac{1}{2}}(\Sigma^{-1})_{ij}$$