12.15

($\mathrm{Tr}(\cdot)$ の2次形式の微分)

シングルエントリ (ij成分のみ1、他は0)

$Q(X) = \mathrm{Tr}(AX^TX)$ とすると $h = hJ^{ij}$ として

$$Q(X+h) = \mathrm{Tr}(A(X+h)^T(X+h))$$
$$= \mathrm{Tr}(A(X^TX + X^Th + h^TX + h^Th))$$

となる。これより h の2次の項を無視して

$$Q(X+h) - Q(X) \sim \mathrm{Tr}(A(X^Th + h^TX))$$
$$= \mathrm{Tr}(AX^Th) + \mathrm{Tr}(Ah^TX)$$

Trは転置しても変わらない

$$= \mathrm{Tr}(AX^Th) + \mathrm{Tr}(X^ThA^T)$$
$$= \mathrm{Tr}(hAX^T) + \mathrm{Tr}(hA^TX^T)$$

← Trの回転則

$$= \mathrm{Tr}(h(A+A^T)X^T)$$

これより $\left(\frac{\partial Q(X)}{\partial X}\right)_{ij} = \frac{\partial Q(X)}{\partial X_{ij}}$ (つまり denominator layout)

$$\frac{\partial Q(X)}{\partial X_{ij}} = \frac{Q(X+hJ^{ij}) - Q(X)}{h} = \frac{\mathrm{Tr}(hJ^{ij}(A+A^T)X^T)}{h}$$
$$= \mathrm{Tr}(J^{ij}(A+A^T)X^T)$$
$$= \{X(A+A^T)^T\}_{ij}$$

シングルエントリの性質 $\mathrm{Tr}(J^{ij}A) = (A^T)_{ij}$

$$= \{X(A^T+A)\}_{ij}$$

よって

$$\frac{\partial \mathrm{Tr}(AX^TX)}{\partial X} = \frac{\partial Q(X)}{\partial X} = X(A^T+A) \quad (\text{denominator layout})$$

を得る。

(行列の線形積の微分)

$Q(\mathbb{X}) = \mathbb{a}^T \mathbb{X}^T \mathbb{b}$ とすると、$\mathbb{H} = h \mathbb{J}^{ij}$ ($\mathbb{J}^{ij}$はシングルエントリ) として

$Q(\mathbb{X}+\mathbb{H}) = \mathbb{a}^T (\mathbb{X}+\mathbb{H})^T \mathbb{b}$

となる。これより

$$Q(\mathbb{X}+\mathbb{H}) - Q(\mathbb{X}) = \mathbb{a}^T \mathbb{H}^T \mathbb{b}$$

よって

成分計算より

$$\frac{\partial Q(\mathbb{X})}{\partial X_{ij}} = \frac{Q(\mathbb{X}+h\mathbb{J}^{ij}) - Q(\mathbb{X})}{h} = \frac{\mathbb{a}^T h \mathbb{J}^{ij\,T} \mathbb{b}}{h} = \mathbb{a}^T \mathbb{J}^{ij\,T} \mathbb{b} = \mathbb{a}^T \mathbb{J}^{ji} \mathbb{b} = b_i a_j = (\mathbb{b}\mathbb{a}^T)_{ij}$$

よって

$\frac{\partial Q(\mathbb{X})}{\partial X_{ij}} = \left(\frac{\partial Q(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}}\right)_{ij}$ denominator layout としている

$$\frac{\partial\, \mathbb{a}^T \mathbb{X}^T \mathbb{b}}{\partial \mathbb{X}} = \frac{\partial Q(\mathbb{X})}{\partial \mathbb{X}} = \mathbb{b}\,\mathbb{a}^T$$

((12.56)式の導出)

(12.53)を$\mathbb{W}$で微分して0とおく

$$0 = \frac{\partial E}{\partial \mathbb{W}} = -\sum_{n=1}^{N} \left\{ -\frac{1}{\sigma^2} \frac{\partial}{\partial \mathbb{W}} E[\mathbb{z}_n]^T \mathbb{W}^T (\mathbb{x}_n - \mathbb{\mu}) + \frac{1}{2\sigma^2} \frac{\partial}{\partial \mathbb{W}} \mathrm{Tr}\left(E[\mathbb{z}_n \mathbb{z}_n^T] \mathbb{W}^T \mathbb{W}\right) \right\}$$

上の微分の式を使って

$E[\mathbb{z}_n \mathbb{z}_n^T]$対称なので ($\mathbb{z}_n \mathbb{z}_n^T$の成分計算より)

$$0 = \sum_{n=1}^{N} \left\{ -\frac{1}{\sigma^2} (\mathbb{x}_n - \mathbb{\mu}) E[\mathbb{z}_n]^T + \frac{1}{2\sigma^2} \mathbb{W} \cdot 2 E[\mathbb{z}_n \mathbb{z}_n^T] \right\}$$

よって

$$\mathbb{W} \sum_{n=1}^{N} E[\mathbb{z}_n \mathbb{z}_n^T] = \sum_{n=1}^{N} (\mathbb{x}_n - \mathbb{\mu}) E[\mathbb{z}_n]^T$$

$$\therefore \quad \mathbb{W} = \left\{ \sum_{n=1}^{N} (\mathbb{x}_n - \mathbb{\mu}) E[\mathbb{z}_n]^T \right\} \left\{ \sum_{n=1}^{N} E[\mathbb{z}_n \mathbb{z}_n^T] \right\}^{-1}$$

を得る。

(12.57)式の導出

(12.53)式をσ^2で微分して0とおく

$$0 = -\sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{D}{2}\frac{2\pi}{2\pi\sigma^2} + \frac{1}{2}\frac{-1}{\sigma^4}\|\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}\|^2 - \frac{-1}{\sigma^4}\mathbb{E}[\mathbf{z}_n]^T\mathbf{W}^T(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}) + \frac{1}{2}\frac{-1}{\sigma^4}\mathrm{Tr}\left(\mathbb{E}[\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^T]\mathbf{W}^T\mathbf{W}\right)\right\}$$

両辺にσ^4を掛けて

$$0 = \sum_{n=1}^{N}\left\{\frac{D}{2}\sigma^2 - \frac{1}{2}\|\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}\|^2 + \mathbb{E}[\mathbf{z}_n]^T\mathbf{W}^T(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}) - \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\left(\mathbb{E}[\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^T]\mathbf{W}^T\mathbf{W}\right)\right\}$$

よって

$$-ND\sigma^2 = \sum_{n=1}^{N}\left\{-\|\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}\|^2 + 2\mathbb{E}[\mathbf{z}_n]^T\mathbf{W}^T(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}) - \mathrm{Tr}\left(\mathbb{E}[\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^T]\mathbf{W}^T\mathbf{W}\right)\right\}$$

$\boldsymbol{\mu} = \bar{\mathbf{x}}$である。(P.291の厳密解より)

$$\therefore\ \sigma^2 = \frac{1}{ND}\sum_{n=1}^{N}\left\{\|\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}\|^2 - 2\mathbb{E}[\mathbf{z}_n]^T\mathbf{W}^T(\mathbf{x}_n-\boldsymbol{\mu}) + \mathrm{Tr}\left(\mathbb{E}[\mathbf{z}_n\mathbf{z}_n^T]\mathbf{W}^T\mathbf{W}\right)\right\}$$

を得る。