ニューラルネットワークにおける Affine レイヤの逆伝播導出

成分計算と行列微分の 2 つの視点から

Math & AI Note

2026 年 1 月 28 日

1　はじめに：問題の設定

本資料では、ニューラルネットワークの全結合層（Affine レイヤ）における誤差逆伝播法の導出を行う。順伝播の計算式は以下の通り定義する。

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{W} + \boldsymbol{B} \tag{1}$$

ここで、各変数の形状（シェイプ）は以下の通りとする。

- 入力 $\boldsymbol{X}$: $1 \times n$ の行ベクトル $(x_1, \ldots, x_n)$
- 重み $\boldsymbol{W}$: $n \times m$ の行列 (w_{ij})
- バイアス $\boldsymbol{B}$: $1 \times m$ の行ベクトル $(b_1, \ldots, b_m)$
- 出力 $\boldsymbol{Y}$: $1 \times m$ の行ベクトル $(y_1, \ldots, y_m)$

損失関数を L とし、出力層からの勾配 $\dfrac{\partial L}{\partial \boldsymbol{Y}}$ は既知であるとする。このとき、入力 $\boldsymbol{X}$ および重み $\boldsymbol{W}$ に対する勾配 $\dfrac{\partial L}{\partial \boldsymbol{X}}, \dfrac{\partial L}{\partial \boldsymbol{W}}$ を導出する。

2　アプローチ 1：成分ごとの偏微分による導出

多変数関数の連鎖律（チェーンルール）を用い、成分ごとに計算してから行列の形に復元する方法である。

2.1　入力 $\boldsymbol{X}$ に関する微分

順伝播の第 j 成分 y_j は以下で表される。

$$y_j = \sum_{k=1}^{n} x_k w_{kj} + b_j \tag{2}$$

連鎖律より、入力の第 i 成分 x_i に対する勾配は、

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial L}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial x_i} \tag{3}$$

ここで、$\dfrac{\partial y_j}{\partial x_i} = w_{ij}$ であるため、

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{m} \frac{\partial L}{\partial y_j} w_{ij} \tag{4}$$

この総和は、行ベクトル $\dfrac{\partial L}{\partial \boldsymbol{Y}}$ と 行列 $\boldsymbol{W}$ の転置 $\boldsymbol{W}^T$ の積の第 i 成分に他ならない。したがって、

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{Y}} \boldsymbol{W}^T \tag{5}$$

となる。

2.2　重み $\boldsymbol{W}$ に関する微分

重みの (i, j) 成分 w_{ij} は y_j にのみ影響を与える。よって連鎖律は、

$$\frac{\partial L}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial L}{\partial y_j} \frac{\partial y_j}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial L}{\partial y_j} x_i \tag{6}$$

となる。これをすべての i, j について並べると、$(n \times 1)$ の縦ベクトル $\boldsymbol{X}^T$ と $(1 \times m)$ の横ベクトル $\dfrac{\partial L}{\partial \boldsymbol{Y}}$ の積となる。

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{W}} = \boldsymbol{X}^T \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{Y}} \tag{7}$$

3　アプローチ 2：行列微分（全微分とトレース）による導出

行列計算における勾配を、全微分形式の線形近似係数として定義する方法である。成分計算を行わず、代数的な操作のみで導出が可能である。

3.1 行列微分の定義

スカラー関数 $f(\boldsymbol{X})$ の行列 $\boldsymbol{X}$ による勾配 $\dfrac{\partial f}{\partial \boldsymbol{X}}$ を、以下の全微分 df を満たす行列 $\boldsymbol{A}$ として定義する。

$$df = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{A}^T d\boldsymbol{X}\right) \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{A} \tag{8}$$

ここで $\mathrm{tr}(\cdot)$ はトレース（対角和）を表す。

3.2 導出

損失関数 L の全微分は、出力勾配 $\boldsymbol{G} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{Y}}$ を用いて以下のように書ける。

$$dL = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{G}^T d\boldsymbol{Y}\right) \tag{9}$$

ここで、順伝播式 $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{W} + \boldsymbol{B}$ の全微分をとる。

$$d\boldsymbol{Y} = (d\boldsymbol{X})\boldsymbol{W} + \boldsymbol{X}(d\boldsymbol{W}) + d\boldsymbol{B} \tag{10}$$

3.2.1 1. $\boldsymbol{X}$ による勾配

$\boldsymbol{W}, \boldsymbol{B}$ を固定し、$d\boldsymbol{Y} = (d\boldsymbol{X})\boldsymbol{W}$ を代入する。

$$\begin{aligned} dL &= \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{G}^T (d\boldsymbol{X})\boldsymbol{W}\right) && (11)\\ &= \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{W}\boldsymbol{G}^T d\boldsymbol{X}\right) \quad (\because \text{トレースの巡回性 } \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A})) && (12)\\ &= \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{G}\boldsymbol{W}^T)^T d\boldsymbol{X}\right) && (13) \end{aligned}$$

定義と比較して、$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{W}^T$ となるため、

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{X}} = \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{Y}} \boldsymbol{W}^T \tag{14}$$

3.2.2 2. $\boldsymbol{W}$ による勾配

$\boldsymbol{X}, \boldsymbol{B}$ を固定し、$d\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{X}(d\boldsymbol{W})$ を代入する。

$$\begin{aligned} dL &= \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{G}^T \boldsymbol{X}(d\boldsymbol{W})\right) && (15)\\ &= \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{G}(d\boldsymbol{W})\right)^T \quad (\text{スカラーの転置は不変}) && (16)\\ &= \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}^T \boldsymbol{G})^T d\boldsymbol{W}\right) && (17) \end{aligned}$$

定義と比較して、

$$\frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{W}} = \boldsymbol{X}^T \frac{\partial L}{\partial \boldsymbol{Y}} \tag{18}$$

4　まとめ

どちらのアプローチを用いても、結果は一致する。

- 成分計算アプローチ：直感的であり、微分の意味（感度解析）を理解しやすい。
- 行列微分アプローチ：記号操作のみで完結し、複雑な計算やテンソル計算において見通しが良い。