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

$$L(\mu, \Sigma) = \log \prod_{n=1}^{N} \mathcal{N}(x^{(n)}; \mu, \Sigma) \quad \cdots ②$$

$$= \log\left\{\mathcal{N}(x^{(1)}; \mu, \Sigma) \cdot \mathcal{N}(x^{(2)}; \mu, \Sigma) \cdot \cdots \cdot \mathcal{N}(x^{(N)}; \mu, \Sigma)\right\}$$

$$= \log \mathcal{N}(x^{(1)}; \mu, \Sigma) + \log \mathcal{N}(x^{(2)}; \mu, \Sigma) + \cdots + \log \mathcal{N}(x^{(N)}; \mu, \Sigma)$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \underbrace{\log \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^D |\Sigma|}}}_{①} \underbrace{\exp\left\{-\frac{1}{2}(x^{(n)}-\mu)^T \Sigma^{-1} (x^{(n)}-\mu)\right\}}_{②}$$

$$① = \log\left\{(2\pi)^D |\Sigma|\right\}^{-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}\left\{\log (2\pi)^D + \log |\Sigma|\right\}$$

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

$$= -\frac{1}{2}(x^{(n)}-\mu)^T \Sigma^{-1} (x^{(n)}-\mu)$$ より,

$$= \sum_{n=1}^{N}(① + ②) = -\frac{N}{2}\log(2\pi)^D - \frac{N}{2}\log|\Sigma| - \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}(x^{(n)}-\mu)^T \Sigma^{-1} (x^{(n)}-\mu)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \mu} = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \mu}\left(\sum_{n=1}^{N}(x^{(n)}-\mu)^T \Sigma^{-1} (x^{(n)}-\mu)\right)$$ (μのない項は微分0)

$$= -\frac{1}{2} \cdot \sum_{n=1}^{N}(-2)\Sigma^{-1}(x^{(n)}-\mu) = \sum_{n=1}^{N}\Sigma^{-1}(x^{(n)}-\mu)$$ より,

$$\frac{\partial L}{\partial \mu} = 0 \Leftrightarrow \sum_{n=1}^{N}\Sigma^{-1}(x^{(n)}-\mu) = \Sigma^{-1}\left\{(x^{(1)}-\mu) + (x^{(2)}-\mu) + \cdots + (x^{(N)}-\mu)\right\} = 0$$

$$\Leftrightarrow \Sigma^{-1}\sum_{n=1}^{N}(x^{(n)}-\mu) = 0 \Leftrightarrow \underbrace{\Sigma\Sigma^{-1}}_{=I}\sum_{n=1}^{N}(x^{(n)}-\mu) = \Sigma \cdot 0 = 0$$

$$\Leftrightarrow \sum_{n=1}^{N}(x^{(n)}-\mu) = 0 \Leftrightarrow \sum_{n=1}^{N}x^{(n)} = \sum_{n=1}^{N}\mu = N\mu$$

$$\therefore \mu = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}x^{(n)}$$

(A.6) $\frac{\partial L}{\partial \mu} = \sum_{n=1}^{N} \Sigma^{-1}(x^{(n)}-\mu)$ において $N=1$ のとき.

$L = \log \mathcal{N}(x;\mu,\Sigma)$ より.

混合ガウスモデル利用時

$$\frac{\partial L}{\partial \mu} = \frac{\partial}{\partial \mu}\log \mathcal{N}(x;\mu,\Sigma) = \Sigma^{-1}(x-\mu)$$

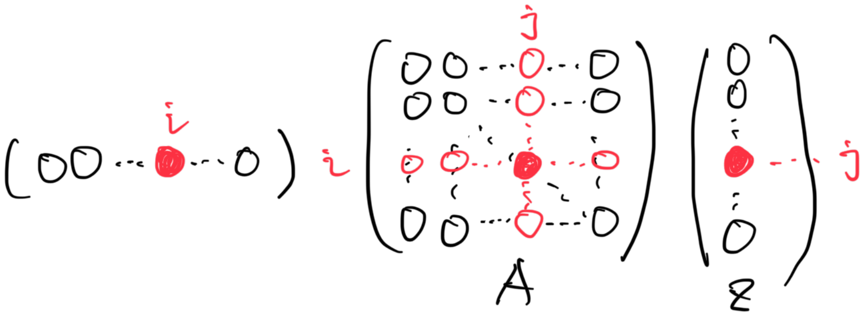
$\frac{\partial}{\partial \mu}\left(\underbrace{(x-\mu)^T}_{z^T}\underbrace{\Sigma^{-1}}_{A}\underbrace{(x-\mu)}_{z}\right) = -2\Sigma^{-1}(x-\mu)$ について、

z^T, A, z としてみて、 z^TAz = 2次形式.
$\begin{cases} z : D\times 1 \\ A : D\times D \end{cases}$

A を a_{ij} で表すと.

$$z^TAz = \sum_{i=1}^{D} z_i\left(\sum_{j=1}^{D} a_{ij}z_j\right)$$

$$= \sum_{i=1}^{D}\sum_{j=1}^{D} z_i a_{ij} z_j$$



$\frac{\partial}{\partial z}(z^TAz)$ を求めるために、z_k でまず考える。

z_i と z_j の2つの z による積 $\Rightarrow (f(x)g(x))'$

$$\frac{\partial}{\partial z_k}(z^TAz) = \frac{\partial}{\partial z_k}\left(\sum_{i=1}^{D}\sum_{j=1}^{D} z_i a_{ij} z_j\right) = f(x)'g(x) + f(x)g(x)'$$

$$= \sum_{i=1}^{D}\sum_{j=1}^{D} a_{ij}\frac{\partial z_i}{\partial z_k}z_j + \sum_{i=1}^{D}\sum_{j=1}^{D} a_{ij}z_i\frac{\partial z_j}{\partial z_k}$$

$$= \sum_{j=1}^{D} a_{kj}z_j + \sum_{i=1}^{D} a_{ik}z_i = (Az)_k + (A^Tz)_k$$

$$= (Az + A^Tz)_k$$

$$\frac{z_i}{z_k} = \begin{cases} 1 & (i=k) \\ 0 & (i\neq k) \end{cases} = \delta_{ik}$$ のクロネッカーデルタ.より.

$$\sum_{i=1}^{D}\sum_{j=1}^{D} a_{ij}\delta_{ik}z_j + \sum_{i=1}^{D}\sum_{j=1}^{D} a_{ij}z_i\delta_{jk}$$

iに関する和 $=1$
$i=k$ のみのこる

jに関する和 $=1$.
$j=k$ のみのこる.

つまり、 $\frac{\partial}{\partial z}(z^T A z) = (A + A^T) z$ （k番目の要素で微分式より）

今回 $A=\Sigma^{-1}$ で対称行列より、 $A = A^T$ だから、

$$\frac{\partial}{\partial z}(z^T A z) = 2Az$$

$$\frac{\partial}{\partial z}(z^T \Sigma^{-1} z) = 2\Sigma^{-1} z$$

$z = x - \mu$ より

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mu}\left((x-\mu)^T \Sigma^{-1} (x-\mu)\right) &= \frac{\partial}{\partial \mu}(z^T \Sigma^{-1} z) \\
&= \underbrace{\frac{\partial z}{\partial \mu} \cdot \frac{\partial}{\partial z}}_{\text{連鎖律}} (z^T \Sigma^{-1} z) \\
&= -I \cdot 2\Sigma^{-1} z \\
&= -2\Sigma^{-1}(x-\mu)
\end{aligned}$$

成立.

$$\left(\frac{\partial z}{\partial \mu}\right)_{ij} = \frac{\partial z_i}{\partial \mu_j}$$

$$\begin{pmatrix}
\frac{\partial z_1}{\partial \mu_1} & \cdots & \frac{\partial z_i}{\partial \mu_1} & \cdots & \frac{\partial z_n}{\partial \mu_1} \\
\vdots & \ddots & & & \vdots \\
\frac{\partial z_1}{\partial \mu_i} & \cdots & \frac{\partial z_i}{\partial \mu_i} & \cdots & \frac{\partial z_n}{\partial \mu_i} \\
\vdots & & & \ddots & \vdots \\
\frac{\partial z_1}{\partial \mu_n} & \cdots & \frac{\partial z_i}{\partial \mu_n} & \cdots & \frac{\partial z_n}{\partial \mu_n}
\end{pmatrix}$$

$$\frac{\partial z_i}{\partial \mu_i} = \frac{\partial}{\partial \mu_i}(x_i - \mu_i) = -1$$

より. $\frac{\partial z_i}{\partial \mu_j} = \begin{cases} -1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$

$$\frac{\partial L}{\partial \Sigma} = \underbrace{-\frac{N}{2}\frac{\partial}{\partial \Sigma}\log|\Sigma|}_{③} \underbrace{- \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \Sigma}\sum_{n=1}^{N}(x^{(n)}-\mu)^T \Sigma^{-1} (x^{(n)}-\mu)}_{④}$$

③について、

$$|\Sigma| = \prod_{i=1}^{D} \lambda_i \Leftrightarrow \log|\Sigma| = \sum_{i=1}^{D} \log \lambda_i = \mathrm{Tr}(\log \Sigma)$$

☆ $\mathrm{Tr}(A) = \sum_{i=1}^{D} a_{ii} = a_{11} + a_{22} + \cdots$

$$\Leftrightarrow d\log|\Sigma| = d\,\mathrm{Tr}(\log \Sigma) = \mathrm{Tr}(d(\log \Sigma))$$

スカラーで $\log(x+dx) \fallingdotseq \log x + \frac{1}{x} \cdot dx$

※ $f(x)$ の $x=a$ 周りのテイラー展開が

$$f(x) = f(a) + \frac{df(x)}{dx}(x-a) + \frac{1}{2!}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}(x-a)^2 + \cdots$$

$\Rightarrow$ $x = x + dx$, $a = x$ としてみると $\Rightarrow$ $f(x+dx) \fallingdotseq f(x) + \frac{df(x)}{dx} dx$ 近似.

dx = 微小 だから.

スカラーxと同様に、 $\log(\Sigma + d\Sigma) \fallingdotseq \log\Sigma + \Sigma^{-1} d\Sigma$ だから、

また $\log(\Sigma + d\Sigma) \fallingdotseq \log\Sigma + d(\log\Sigma)$ という式もあり、比較して、

$$d(\log\Sigma) = \Sigma^{-1} d\Sigma$$

つまり、 $d\log|\Sigma| = \mathrm{Tr}(\Sigma^{-1} d\Sigma)$

$d\log|\Sigma| = \mathrm{Tr}\left(\frac{\partial \log|\Sigma|}{\partial\Sigma}^{T} d\Sigma\right)$ という式もあり、比較して、

$$\frac{\partial \log|\Sigma|}{\partial\Sigma}^{T} = (\Sigma^{-1})^{T} \quad \square$$

④について、

$$\mathrm{Tr}(A+B) = \mathrm{Tr}(A) + \mathrm{Tr}(B) \quad \cdots (i)$$

$$\mathrm{Tr}(AB) = \mathrm{Tr}(BA) \quad \cdots (ii)$$

$$\frac{\partial}{\partial a_{ij}} \mathrm{Tr}(AB) = b_{ji} \quad \cdots (iii)$$

$$\frac{\partial A^{-1}}{\partial x} = -A^{-1}\frac{\partial A}{\partial x}A^{-1}$$ も利用。

$$\frac{\partial}{\partial x}(A^{-1}A) = \frac{\partial A^{-1}}{\partial x}A + A^{-1}\frac{\partial A}{\partial x} \quad (積の微分)$$

$\frac{\partial}{\partial x} I = 0$ より、

$$\frac{\partial A^{-1}}{\partial x}AA^{-1} + A^{-1}\frac{\partial A}{\partial x}A^{-1} = 0 \cdot A^{-1} = 0$$

$$\therefore \frac{\partial A^{-1}}{\partial x} = -A^{-1}\frac{\partial A}{\partial x}A^{-1}$$

スカラーのトレースより、

$$④ = \sum_{n=1}^{N} \mathrm{Tr}\left((x^{(n)}-\mu)^{T}\Sigma^{-1}(x^{(n)}-\mu)\right)$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \mathrm{Tr}\left(\Sigma^{-1}(x^{(n)}-\mu)^{T}(x^{(n)}-\mu)\right) \quad ((ii)より)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\Sigma^{-1}\underbrace{\sum_{n=1}^{N}(x^{(n)}-\mu)^{T}(x^{(n)}-\mu)}_{\to S}\right) \quad ((i)より)$$

$$= \mathrm{Tr}(\Sigma^{-1} S)$$

Σ_{ij} 要素微分 $\quad \frac{\partial}{\partial \sigma_{ij}} \sum_{n=1}^{N} (x^{(n)}-\mu)^T \Sigma^{-1} (x^{(n)}-\mu) = \frac{\partial}{\partial \sigma_{ij}} \mathrm{Tr}(\Sigma^{-1} S)$

$$= \mathrm{Tr}\left(\left(\frac{\partial}{\partial \sigma_{ij}} \Sigma^{-1}\right) S\right)$$

$$= \mathrm{Tr}\left(\left(-\Sigma^{-1}\left(\frac{\partial}{\partial \sigma_{ij}} \Sigma\right) \Sigma^{-1}\right) S\right)$$

$$= -\mathrm{Tr}\left(\left(\frac{\partial}{\partial \sigma_{ij}} \Sigma\right) \underbrace{\Sigma^{-1} S \Sigma^{-1}}_{=C}\right) \qquad \text{(ii) より}$$

$$= -\mathrm{Tr}\left(\left(\frac{\partial}{\partial \sigma_{ij}} \Sigma\right) C\right) = -C_{ji}$$

つまり、$\frac{\partial}{\partial \Sigma} \sum_{n=1}^{N} (x^{(n)}-\mu)^T \Sigma^{-1} (x^{(n)}-\mu) = -C^T$

$$= -(\Sigma^{-1} S \Sigma^{-1})^T$$

$$= -\left(\Sigma^{-1} \sum_{n=1}^{N} (x^{(n)}-\mu)(x^{(n)}-\mu)^T \Sigma^{-1}\right)^T$$

$$\frac{\partial L}{\partial \Sigma} = -\frac{N}{2} (\Sigma^{-1})^T + \frac{1}{2} (\Sigma^{-1} S \Sigma^{-1})^T = 0$$

$\Leftrightarrow N(\Sigma^{-1})^T = (\Sigma^{-1} S \Sigma^{-1})^T \Leftrightarrow N\Sigma^{-1} = \Sigma^{-1} S \Sigma^{-1}$ (転置をとる)

$\Leftrightarrow N\Sigma^{-1}\Sigma = \Sigma\Sigma^{-1} S \Sigma^{-1} \Leftrightarrow NI = S\Sigma^{-1}$

$\Leftrightarrow N\Sigma = S\Sigma^{-1}\Sigma = S \Leftrightarrow \Sigma = \frac{1}{N} S$

$$\therefore \Sigma = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x^{(n)}-\hat{\mu})(x^{(n)}-\hat{\mu})^T \quad \square.$$