Vector Differential: 벡터 미분

Yonghee Lee

October 17, 2018

1 벡터미분의 표기

1.1 스칼라미분

벡터미분(Vector diffrential) 또는 행렬미분(Matrix differential)은 벡터와 행렬의 미분식에 대한 표기법을 정의하는 방법이다. 보통 스칼라(scalar)에 대한 미분은 일분수 함수 $f : \Re^1 \to \Re^1$ 또는 다변수 함수(function of several variables) $f : \Re^p \to \Re^1$에서 쉽게 정의된다. 만약 $y = f(x)$ 또는 $y = f(\boldsymbol{x})$라고 하면 다음과 같이 미분이 주어진다.

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \frac{\partial f(x)}{\partial x} = f'(x)$$

$$\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \left(\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1},\ \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2},\ \cdots, \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_p} \right) = \nabla f(x)$$

함수가 다변수함수일 경우 함수의 값을 각 축의 변수로 미분한 것(partial derivative)을 벡터로 표시하는 것을 gradient 라고 한다. 여기서 gradient 는 행벡터 또는 열벡터 중 하나로 표시할 수 있으며 분야에 따라 표기가 다르다.

1.2 벡터미분의 표기 방법

이제 다변량함수(multivariate function), $f : \Re^p \to \Re^q$에 대한 미분을 생각해보자. 앞 절에서 본것과 같이 스칼라 함수를 여러 변수로 미분하여 partial derivative를 구한 뒤 gradient를 만드는 경우 열벡터와 행벡터 중 하나를 선택해야 한다. 이러한 선택은 절대적인 것이 아니며 각 분야의 특성과 편의에 따라 다르게 선택 될 수 있다.

이제 간단한 예제를 고려해 보자. 두 열벡터 $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2)^t \in \Re_2$, $\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, y_3)^t \in \Re^3$를 고려하고 다음과 같은 함수로 두 벡터의 관계가 정의된다고 하자.

$$y_1 = x_1^2 + x_2, \quad y_2 = \exp(x_1) + 3x_2, \quad y_3 = \sin(x_1) + x_2^3$$

이러한 경우 벡터 $\boldsymbol{y}$를 벡터 $\boldsymbol{x}$로 미분하려면, 즉 다음의 미분 표기법을 이용하려면 그 결과 행렬의 형태를 정해야한다.

$$\frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}} = p \times q \text{ or } q \times p \text{ matrix?}$$

일단 각각의 partial derivative $\partial y_i / \partial x_j$를 구해야 하며 이는 scalar 미분으로 쉽게 구해진다.

$$\begin{array}{lll} \dfrac{\partial y_1}{\partial x_1} = 2x_1, & \dfrac{\partial y_2}{\partial x_1} = \exp(x_1), & \dfrac{\partial y_3}{\partial x_1} = \cos(x_1) \\ \dfrac{\partial y_1}{\partial x_2} = 1, & \dfrac{\partial y_2}{\partial x_1} = 3, & \dfrac{\partial y_3}{\partial x_1} = 3x_2^2 \end{array}$$

일반적으로 벡터 $\boldsymbol{y}$를 벡터 $\boldsymbol{x}$로 미분한 결과 행렬을 표기하는 방법에는 두 가지가 있다 (참조, `https://en.wikipedia.org/wiki/Matrix_calculus`)

- 분자 표기법 (Numerator layout)

$$\frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}} \equiv \frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}^t} \underset{def}{\equiv} \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_1}{\partial x_2} \\ \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} \\ \frac{\partial y_3}{\partial x_1} & \frac{\partial y_3}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 & 1 \\ \exp(x_1) & 3 \\ \cos(x_1) & 3x_2^2 \end{bmatrix}$$

- 분모 표기법 (Denominator layout)

$$\frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}} \equiv \frac{\partial \boldsymbol{y}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \underset{def}{\equiv} \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \frac{\partial y_3}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \frac{\partial y_3}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2x_1 & \exp(x_1) & \cos(x_1) \\ 1 & 3 & 3x_2^2 \end{bmatrix}$$

분자표기법의 결과와 분모표기법의 결과는 서로 전치(transpose)관계이다.

일반적으로 통계학에서는 분모표기법이 적절하다(마지막 절의 예제 참조). 모든 다변량 벡터는 열벡터로 정의하고 벡터미분에서 분자에 있는 벡터를 행로 보고 $(\partial \boldsymbol{y}/\partial \equiv \partial \boldsymbol{y}^t/\partial)$, 분모에 위치한 벡터를 열로 정렬한 다음$(\partial/\partial \boldsymbol{x} \equiv \partial/\partial \boldsymbol{x})$ 각각 대응하는 partial derivative 를 배치하여 벡터미분의 결과행렬을 정의한다. 즉, 만약 $\boldsymbol{x} \in \Re_p$, $\boldsymbol{y} \in \Re^q$ 이면

$$\frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}} \equiv \frac{\partial \boldsymbol{y}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \underset{def}{\equiv} \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial x_1} & \frac{\partial y_2}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial y_q}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_2} & \frac{\partial y_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial y_q}{\partial x_2} \\ & & \vdots & \\ \frac{\partial y_1}{\partial x_p} & \frac{\partial y_2}{\partial x_p} & \cdots & \frac{\partial y_q}{\partial x_p} \end{bmatrix} = p \times q \text{ matrix} \tag{1}$$

1.3 행렬미분의 표기법

이제 행렬에 대한 미분에 대한 표기법을 고려하자. 일반적으로 행렬에 대한 미분표기법은 분모와 분자가 하나는 행렬, 다른 하나는 스칼라일 경우만 고려한다. 즉, 다음과 같은 경우만 고려한다.

$$\frac{\partial \boldsymbol{Y}}{\partial x} \quad \frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{X}}$$

통계학에서는 분모가 행렬이고 분자가 스칼라인 미분식이 주로 사용되며 먼저 $\partial \boldsymbol{Y}/\partial x$ 의 표기법에 대해서 논의하겠다.

만약 앞 절에서 논의한 분모표기법을 행렬-스칼라 미분 표기에 그대로 적용하면 모든 차원이 뒤바뀌게 된다 (즉 $\partial \boldsymbol{Y}/\partial x = \partial \boldsymbol{Y}^t/\partial x$). 따라서 행렬-스칼라 미분 표기는 예외적으로 분자표기법을 적용한다. 즉 $\boldsymbol{Y}$가 $p \times q$ 행렬이면 $\partial \boldsymbol{Y}/\partial x$는 다음과 같이 표기한다.

$$\frac{\partial \boldsymbol{Y}}{\partial x} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_{11}}{\partial x} & \frac{\partial y_{12}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial y_{1q}}{\partial x} \\ \frac{\partial y_{21}}{\partial x} & \frac{\partial y_{22}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial y_{2q}}{\partial x} \\ \cdots & & \vdots & \cdots \\ \frac{\partial y_{p1}}{\partial x} & \frac{\partial y_{p2}}{\partial x} & \cdots & \frac{\partial y_{pq}}{\partial x} \end{bmatrix} = p \times q \text{ matrix} \tag{2}$$

이제 스칼라를 행렬로 미분하는 경우는 드물지만 대표적인 예가 Hessian 행렬이 이에 해당한다. Hessian 행렬의 경우 미분을 하는 행렬이 대칭행렬이므로 하나의 표기법으로 쉽게 표시할 수 있다. 즉 $y = f(\boldsymbol{x})$를 $\Re^p$에서 정의된 일변량함수라고 하자.

함수 f의 gradient 벡터 $\boldsymbol{\nabla} f$를 다음과 같이 정의 하면

$$\boldsymbol{\nabla} f = \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_p} \end{bmatrix}$$

함수 f의 Hessian 행렬 $\boldsymbol{H} f$를 다음과 같이 여러 방식으로 표시할 수 있고 또한 계산된다.

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{H}f &\equiv \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^t} \quad \text{layout 1} \\
&\equiv \frac{\partial^2 y}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^t} \quad \text{layout 2} \\
&\equiv \frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^t} \quad \text{layout 3} \\
&\equiv \frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{X}} \quad \text{layout 4} \\
&= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \left[\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{x}} \right] \quad \text{computation} \\
&= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} [\boldsymbol{\nabla} f] \\
&= \frac{\partial \boldsymbol{\nabla} f}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&= \frac{\partial \boldsymbol{\nabla}^t f}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&= \begin{bmatrix}
\frac{\partial^2 y}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 y}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 y}{\partial x_1 \partial x_p} \\
\frac{\partial^2 y}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 y}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 y}{\partial x_2 \partial x_p} \\
\cdots & & \vdots & \cdots \\
\frac{\partial^2 y}{\partial x_p \partial x_1} & \frac{\partial^2 y}{\partial x_p \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 y}{\partial x_p \partial x_p}
\end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

여기서 행렬 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^t$이다.

다음 장에서는 (1) 과 (2)에서 정의된 벡터와 행렬 미분표기법을 사용하는 경우 통계학에서 자주 쓰이고 유용한 공식과 결과들을 살펴보자.

2 벡터미분의 기본 공식들

2.1 핵심공식

다음은 (1)에서 정의된 분모표기법을 응용한 가장 기본적이고 핵심적인 미분 공식들이다. 공식을 유도하는 경우 분모표기법에서는 $\partial \boldsymbol{y}/\partial \boldsymbol{x} \equiv \partial \boldsymbol{y}^t/\partial \boldsymbol{x}$ 임을 이용한다. 변환이 있거나 여러가지 곱이 있는 경우 미분할 대상 벡터를 가장 왼쪽에 전치형태(즉, 행벡터의 형태로)로 놓는 것이 필요하다. 예를 들어

$$
\frac{\partial \boldsymbol{a}^t \boldsymbol{V} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^t \boldsymbol{V}^t \boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^t}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{V}^t \boldsymbol{a} = \frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{V}^t \boldsymbol{a}
$$

또한 행렬은 교환법칙이 성립하지 않기 때문에 연산의 순서를 유지해야 하는 것을 유념하자.

1. 기본행렬 미분 벡터 $\boldsymbol{c}$를 상수벡터하고 하자.

$$\frac{\partial \boldsymbol{c}}{\partial \boldsymbol{x}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{I}$$

2. 벡터-스칼라 미분

이 경우는 $\boldsymbol{x} \in \Re^1$, $\boldsymbol{y} \in \Re^q$ 인 경우이며 결과는 다음과 같이 행벡터로 결과가 주어진다.

$$\frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial x} \underset{def}{\equiv} \frac{\partial \boldsymbol{y}^t}{\partial x} = \left[\frac{\partial y_1}{\partial x}, \ \frac{\partial y_2}{\partial x}, \ \cdots, \frac{\partial y_q}{\partial x}\right]$$

3. 스칼라-벡터 미분

이 경우는 $\boldsymbol{x} \in \Re^p$, $\boldsymbol{y} \in \Re^1$ 인 경우이며 결과는 다음과 같이 열벡터로 결과가 주어진다.

$$\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial x_1} \\ \frac{\partial y}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial y}{\partial x_p} \end{bmatrix}$$

4. 상수벡터와 내적에 대한 미분

열벡터 $\boldsymbol{a}$를 $p \times 1$ 상수벡터이라고 하고 $y = \boldsymbol{a}^t\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a}$라 하자.

$$\frac{\partial y}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{a}^t\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{a}^t\boldsymbol{x}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \boldsymbol{a}^t\boldsymbol{x}}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial \boldsymbol{a}^t\boldsymbol{x}}{\partial x_p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_p \end{bmatrix} = \boldsymbol{a}$$

5. 선형변환에 대한 미분

행렬 $\boldsymbol{A}$를 $q \times p$ 행렬이라고 하고 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$라 하자. 여기서 행렬 $\boldsymbol{A}$를 다음과 같이 나타내자.

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1^t \\ \boldsymbol{a}_2^t \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_q^t \end{bmatrix} \text{ or } \boldsymbol{A}^t = [\boldsymbol{a}_1 \ \boldsymbol{a}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_q]$$

위의 내적에 대한 미분 결과를 이용하면 다음은 결과를 얻는다.

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}} &= \frac{\partial \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&\equiv \frac{\partial \boldsymbol{x}^t \boldsymbol{A}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}[\boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a}_1 \ \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a}_q] \\
&= [\frac{\partial \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a}_1}{\partial \boldsymbol{x}} \ \frac{\partial \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a}_2}{\partial \boldsymbol{x}} \ \cdots \ \frac{\partial \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a}_q}{\partial \boldsymbol{x}}] \\
&= [\boldsymbol{a}_1 \ \boldsymbol{a}_2 \ \cdots \ \boldsymbol{a}_q] \\
&= \boldsymbol{A}^t
\end{aligned}$$

위의 결과를 응용하면 다음의 결과를 얻는다.

$$\frac{\partial \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}^t \text{ and } \frac{\partial \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}$$

6. 곱셈에 대한 미분

p 차원 벡터 $\boldsymbol{x}$를 인자로 하는 두 개의 함수(하나는 일변량 함수, 다른 하나는 다변량 함수) 를 고려하자.

$$\boldsymbol{u} : \Re^p \rightarrow \Re^1, \quad \boldsymbol{g} : \Re^p \rightarrow \Re^q$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u(\boldsymbol{x})\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} &= \frac{\partial u\boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&\equiv \frac{\partial u\boldsymbol{g}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{\partial u g_1}{\partial x_1} & \frac{\partial u g_2}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial u g_q}{\partial x_1} \\ \frac{\partial u g_1}{\partial x_2} & \frac{\partial u g_2}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial u g_q}{\partial x_2} \\ & & \vdots & \\ \frac{\partial u g_1}{\partial x_p} & \frac{\partial u g_2}{\partial x_p} & \cdots & \frac{\partial u g_q}{\partial x_p} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x_1} g_1 & \frac{\partial u}{\partial x_1} g_2 & \cdots & \frac{\partial u}{\partial x_1} g_q \\ \frac{\partial u}{\partial x_2} g_1 & \frac{\partial u}{\partial x_2} g_2 & \cdots & \frac{\partial u}{\partial x_2} g_q \\ & & \vdots & \\ \frac{\partial u}{\partial x_p} g_1 & \frac{\partial u}{\partial x_p} g_2 & \cdots & \frac{\partial u}{\partial x_p} g_q \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} u\frac{\partial g_1}{\partial x_1} & u\frac{\partial g_2}{\partial x_1} & \cdots & u\frac{\partial g_q}{\partial x_1} \\ u\frac{\partial g_1}{\partial x_2} & u\frac{\partial g_2}{\partial x_2} & \cdots & u\frac{\partial g_q}{\partial x_2} \\ & & \vdots & \\ u\frac{\partial g_1}{\partial x_p} & u\frac{\partial g_2}{\partial x_p} & \cdots & u\frac{\partial g_q}{\partial x_p} \end{bmatrix} \\
&= \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{g}^t + u\frac{\partial \boldsymbol{g}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&= \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{g}^t + u\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}
\end{aligned}$$

이 결과의 특수한 경우로서 두 함수가 모두 일변량 함수일때는

$$\boldsymbol{u} : \Re^p \rightarrow \Re^1, \quad \boldsymbol{v} : \Re^p \rightarrow \Re^1$$

다음과 같은 결과를 얻는다.

$$\frac{\partial u(\boldsymbol{x})v(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial uv}{\partial \boldsymbol{x}} = v\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x}} + u\frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{x}}$$

[예제 1] 다음과 같은 미분을 구해보자.

$$\frac{\partial \boldsymbol{a}^t\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^t\boldsymbol{b}}{\partial \boldsymbol{x}}$$

여기서 다음과 같은 식을 정의하면

$$\begin{aligned} u &= \boldsymbol{a}^t\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a} \\ v &= \boldsymbol{b}^t\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{b} \end{aligned}$$

이제 다음과 같은 결과를 얻는다.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \boldsymbol{a}^t\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^t\boldsymbol{b}}{\partial \boldsymbol{x}} &= \frac{\partial uv}{\partial \boldsymbol{x}} \\ &= \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x}}v + \frac{\partial v}{\partial \boldsymbol{x}}u \\ &= \frac{\partial \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{x}}v + \frac{\partial \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{b}}{\partial \boldsymbol{x}}u \\ &= \boldsymbol{a}v + \boldsymbol{b}u \\ &= \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^t\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}\boldsymbol{a}^t\boldsymbol{x} \\ &= (\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^t + \boldsymbol{b}\boldsymbol{a}^t)\boldsymbol{x} \end{aligned}$$

[예제 2] 다음과 같은 미분을 구해보자.

$$\frac{\partial (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b})^t\boldsymbol{C}(\boldsymbol{D}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e})}{\partial \boldsymbol{x}}$$

위의 예제와 유사하게 두 벡터를 다음과 같이 정의하자.

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{v} = \boldsymbol{D}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b})^t\boldsymbol{C}(\boldsymbol{D}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e})}{\partial \boldsymbol{x}} &= \frac{\partial \boldsymbol{u}^t\boldsymbol{C}\boldsymbol{v}}{\partial \boldsymbol{x}} \\ &= \frac{\partial \boldsymbol{u}^t}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{v} + \frac{\partial \boldsymbol{v}^t}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{C}^t\boldsymbol{u} \\ &= \frac{\partial \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{A}^t + \boldsymbol{b}^t}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{v} + \frac{\partial \boldsymbol{x}^t\boldsymbol{D}^t + \boldsymbol{e}^t}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{C}^t\boldsymbol{u} \\ &= \boldsymbol{A}^t\boldsymbol{C}\boldsymbol{v} + \boldsymbol{D}^t\boldsymbol{C}^t\boldsymbol{u} \\ &= \boldsymbol{A}^t\boldsymbol{C}(\boldsymbol{D}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e}) + \boldsymbol{D}^t\boldsymbol{C}^t(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}) \end{aligned}$$

7. 다변량함수의 내적에 대한 미분

   이제 두 개의 다변량 함수를 고려하자.

$$\boldsymbol{f} : \Re^p \to \Re^q, \quad \boldsymbol{g} : \Re^p \to \Re^q$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^t \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} &= \frac{\partial \boldsymbol{f}^t \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{\partial \boldsymbol{f}^t \boldsymbol{g}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial \boldsymbol{f}^t \boldsymbol{g}}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial \boldsymbol{f}^t \boldsymbol{g}}{\partial x_p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_k g_k}{\partial x_1} \\ \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_k g_k}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_k g_k}{\partial x_p} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_k}{\partial x_1} g_k + \frac{\partial g_k}{\partial x_1} f_k \\ \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_k}{\partial x_2} g_k + \frac{\partial g_k}{\partial x_2} f_k \\ \vdots \\ \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_k}{\partial x_p} g_k + \frac{\partial g_k}{\partial x_p} f_k \end{bmatrix} \\
&= \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{g} + \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{f} \quad (p \times q)(q \times 1) + (p \times q)(q \times 1)
\end{aligned}$$

   예를 들어 위의 결과를 이용하면 두 벡터의 내적에 대한 일변수 미분은 다음과 같다.

$$\boldsymbol{u} : \Re^1 \to \Re^q, \quad \boldsymbol{v} : \Re^1 \to \Re^q$$

   두 벡터의 내적을 $d(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v})$ 로 정의하면 (열과 행 표기에 관계없이)

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}^t \boldsymbol{v}}{\partial x} = \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial x} \boldsymbol{v} + \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial x} \boldsymbol{u} = d(\partial \boldsymbol{u}/\partial x, \boldsymbol{v}) + d(\partial \boldsymbol{v}/\partial x, \boldsymbol{u})$$

2.2 이차형식에 대한 미분공식

1. 일반적인 이차형식

   두 개의 다변량 함수를 고려하고

$$f : \Re^p \to \Re^q, \quad g : \Re^p \to \Re^r$$

   $\boldsymbol{A}$ 를 $p \times p$ 상수행렬이다.

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})^t \boldsymbol{A} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} &= \frac{\partial \boldsymbol{f}^t \boldsymbol{A} \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&= \frac{\partial \boldsymbol{u}^t \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}} \quad \boldsymbol{u} = \boldsymbol{A}^t \boldsymbol{f} \\
&= \frac{\partial \boldsymbol{u}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{g} + \frac{\partial \boldsymbol{g}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{u} \\
&= \frac{\partial \boldsymbol{f}^t \boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{g} + \frac{\partial \boldsymbol{g}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{A}^t \boldsymbol{f} \\
&= \frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{g} + \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{A}^t \boldsymbol{f}
\end{aligned}
$$

2. 이차형식

$$
\frac{\partial \boldsymbol{x}^t \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{x}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} + \frac{\partial \boldsymbol{x}^t \boldsymbol{A}^t}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} + \boldsymbol{A}^t \boldsymbol{x}
$$

만약 행렬 $\boldsymbol{A}$가 대칭이면

$$
\frac{\partial \boldsymbol{x}^t \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = 2 \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}
$$

2.3 합성함수에 대한 미분공식

두 개의 다변량 함수를 고려하고

$$
g : \Re^p \to \Re^q, \quad f : \Re^q \to \Re^r
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}} &= \frac{\partial \boldsymbol{f}^t(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}} \\
&= \left[\frac{\partial f_1(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}},\ \frac{\partial f_2(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}},\ \cdots\ ,\frac{\partial f_r(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}}\right] \\
&= \begin{bmatrix}
\frac{\partial f_1(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_r(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_1} \\
\frac{\partial f_1(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_r(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_2} \\
 & & \vdots & \\
\frac{\partial f_1(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_p} & \frac{\partial f_2(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_p} & \cdots & \frac{\partial f_r(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial x_p}
\end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix}
\sum_{k=1}^q \frac{\partial f_1}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_1} & \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_2}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_1} & \cdots & \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_r}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_1} \\
\sum_{k=1}^q \frac{\partial f_1}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_2} & \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_2}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_2} & \cdots & \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_r}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_2} \\
 & & \vdots & \\
\sum_{k=1}^q \frac{\partial f_1}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_p} & \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_2}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_p} & \cdots & \sum_{k=1}^q \frac{\partial f_r}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_p}
\end{bmatrix} \\
&= \sum_{k=1}^q \begin{bmatrix}
\frac{\partial f_1}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_r}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_1} \\
\frac{\partial f_1}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_2} & \cdots & \frac{\partial f_r}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_2} \\
 & & \vdots & \\
\frac{\partial f_1}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_p} & \frac{\partial f_2}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_p} & \cdots & \frac{\partial f_r}{\partial g_k}\frac{\partial g_k}{\partial x_p}
\end{bmatrix} \\
&= \sum_{k=1}^q \begin{bmatrix} \frac{\partial g_k}{\partial x_1} \\ \frac{\partial g_k}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial g_k}{\partial x_p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial g_k} & \frac{\partial f_2}{\partial g_k} & \cdots & \frac{\partial f_r}{\partial g_k} \end{bmatrix} \\
&= \sum_{k=1}^q \frac{\partial g_k}{\partial \boldsymbol{x}}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial g_k} \\
&= \left[\frac{\partial g_1}{\partial \boldsymbol{x}}\frac{\partial g_2}{\partial \boldsymbol{x}}\cdots\frac{\partial g_q}{\partial \boldsymbol{x}}\right] \begin{bmatrix} \partial \boldsymbol{f}/\partial g_1 \\ \partial \boldsymbol{f}/\partial g_2 \\ \vdots \\ \partial \boldsymbol{f}/\partial g_q \end{bmatrix} \\
&= \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{g}} \quad (p \times q)(q \times r)
\end{aligned}
$$

특별히 f가 일변량인 경우($r = 1$),

$$
\frac{\partial f(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{g}} \quad (p \times q)(q \times 1)
$$

더 나아가 다음도 보일 수 있다.

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{g}(\boldsymbol{u}(\boldsymbol{x})))}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{u}}\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{g}}$$

2.4 역행렬과 행렬식 미분

행렬 $\boldsymbol{V}$의 원소들 스칼라 x의 함수라면

$$\frac{\partial \boldsymbol{V}^{-1}}{\partial x} = -\boldsymbol{V}^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial x}\boldsymbol{V}^{-1}$$

사영행렬 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{K}(\boldsymbol{K}^t\boldsymbol{V}\boldsymbol{K})^{-1}\boldsymbol{K}^t$에 대한 미분은 다음과 같이 얻어진다.

$$\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial x} = -\boldsymbol{K}(\boldsymbol{K}^t V \boldsymbol{K})^{-1}\boldsymbol{K}^t\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial x}\boldsymbol{K}(\boldsymbol{K}^t\boldsymbol{V}\boldsymbol{K})^{-1}\boldsymbol{K}^t = -\boldsymbol{P}\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial x}\boldsymbol{P}$$

행렬식에 대한 미분은 다음과 같다.

$$\frac{\partial \log|\boldsymbol{V}|}{\partial x} = tr\left(\boldsymbol{V}^{-1}\frac{\partial \boldsymbol{V}}{\partial x}\right)$$

3 통계학에 대한 응용

3.1 최소제곱법

오차벡터를 정의하고 $\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})$ 오차벡터를 모수벡터 $\boldsymbol{\beta}$로 미분하면 다음과 같은 결과를 얻는다.

$$\frac{\partial \boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -\frac{\partial \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}}{\partial \boldsymbol{\beta}} \equiv -\frac{\partial \boldsymbol{\beta}^t\boldsymbol{X}^t}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -\boldsymbol{X}^t$$

행렬 $\boldsymbol{W}$를 $n \times n$ 의 대칭행렬이고 그 원소는 모두 상수라고 가정하자. 이제 오차제곱합 $\boldsymbol{e}^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{e}$ 를 모수벡터로 미분하면 이차형식의 미분공식과 합성함수 미분공식을 차례로 적용하면 된다.

$$\frac{\partial \boldsymbol{e}^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{\beta}}\frac{\partial \boldsymbol{e}^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{e}} = -\boldsymbol{X}^t\left(2\boldsymbol{W}\boldsymbol{e}\right) = -2\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{W}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})$$

위의 방정식을 $\mathbf{0}$으로 놓으면 최소제곱 추정량 (열)벡터를 구한다.

$$\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} = \mathbf{0} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{W}\boldsymbol{y}$$

만약 위의 최소제곱법 예제에서 분자 표기법을 적용하면 (편의상 $\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}$ 로 놓자)

$$\frac{\partial \boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -\frac{\partial \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -\boldsymbol{X}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{e}^t\boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial \boldsymbol{e}^t\boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{e}}\frac{\partial \boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 2\boldsymbol{e}^t(-\boldsymbol{X}) = -2(\boldsymbol{y}^t - \boldsymbol{\beta}^t\boldsymbol{X}^t)\boldsymbol{X}$$

위의 방정식은 결과가 행벡터로 표시되며 $\mathbf{0}^t$으로 놓으면 최소제곱 추정량이 행벡터로 구해져서 다시 결과를 전치해야 열벡터로 표시된다.

$$\boldsymbol{y}^t\boldsymbol{X} - \boldsymbol{\beta}^t\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X} = \mathbf{0}^t \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{\beta}^t = \boldsymbol{y}^t\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^t\boldsymbol{X})^{-1}$$

위와 같은 이유 때문에 통계학에서는 분자표기법이 더 편리하며 대부분의 경우 분자표기법을 사용한다.

참고로 분자 표기법의 결과는 분모 표기법의 결과를 전치하면 얻어진다. 또한 합성함수의 미분인 경우 전치를 취하면 도함수 배열의 순서가 바뀌는 것에 유의해야 한다.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{a} &= \frac{\partial \boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{\beta}}\frac{\partial \boldsymbol{e}^t\boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{e}} \text{ (denominator layout)} \\ \boldsymbol{a}^t &= \frac{\partial \boldsymbol{e}^t\boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{e}}\frac{\partial \boldsymbol{e}}{\partial \boldsymbol{\beta}} \text{ (numerator layout)} \end{aligned}$$