(6.29),(6.31) について考える。

そもそも、ベクトルのベクトルでの微分を考える。

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}, \mathbf{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_m \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \tag{1}$$

また、

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix} \tag{2}$$

平面流では $\mathbf{f}$ は (6.28) にあるように以下のようになる。

$$\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \mathbf{z} + \mathbf{u}h(\mathbf{w}^T\mathbf{z} + b) \tag{3}$$

これを踏まえて、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} &= \frac{\partial \mathbf{z}}{\partial \mathbf{z}} + \frac{\partial \mathbf{u}h(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}{\partial \mathbf{z}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial z_1}{\partial z_1} & \cdots & \frac{\partial z_D}{\partial z_1} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial z_1}{\partial z_D} & \cdots & \frac{\partial z_D}{\partial z_D} \end{pmatrix} + \frac{\mathbf{u}\partial h(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}{\partial \mathbf{z}} = I + \frac{\mathbf{u}\partial h(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}{\partial \mathbf{z}} \\ &= I + \mathbf{u}\frac{\partial h(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}{\partial(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}\frac{\partial(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}{\partial \mathbf{z}} = I + \mathbf{u}\frac{\partial h(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}{\partial(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}\mathbf{w}^T I = I + \mathbf{u}\frac{\partial h(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}{\partial(\mathbf{w}^T\mathbf{z}+b)}\mathbf{w}^T = I + \mathbf{u}\psi(\mathbf{z})^T \end{aligned} \tag{4}$$

これで、元論文の (12) の最初の等号がわかる。

ここで、PRML 上巻付録 C(C.15) を考えると、

$$|det(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}})| = |det(I + \mathbf{u}\psi(\mathbf{z})^T)| = |1 + \mathbf{u}^T\psi(\mathbf{z})| \tag{5}$$

となり、(6.29) が求まる。

参考だが、行列 A,B,C,D(ただし、A,D は正方行列) に対して、一般に

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & 0 \\ C & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} I & A^{-1}B \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & B \\ 0 & D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ D^{-1}C & I \end{pmatrix} \tag{6}$$

となるため、

$$det\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = det\begin{pmatrix} A & 0 \\ C & I \end{pmatrix} det\begin{pmatrix} I & A^{-1}B \\ 0 & D - CA^{-1}B \end{pmatrix} = det(AI)det(I(D-CA^{-1}B)) = det(A)det(D-CA^{-1}B) \tag{7}$$

となり、同様に

$$det\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} = det\begin{pmatrix} I & B \\ 0 & D \end{pmatrix} det\begin{pmatrix} A - BD^{-1}C & 0 \\ D^{-1}C & I \end{pmatrix} = det(D)det(A - BD^{-1}C) \tag{8}$$

となるため、

$$det(A)det(D - CA^{-1}B) = det(D)det(|A - BD^{-1}C) \tag{9}$$

それを踏まえ、(文字が被っているが、) 以下をもとに、PRML の (C.14) を考える。

$$\begin{pmatrix} I_N & -B \\ A & I_M \end{pmatrix} \tag{10}$$

これから、

$$det(I_N)det(I_M - A^T I_N^{-1}(-B)) = det(I_M)det(I_N + BI_M^{-1}A^T) \tag{11}$$

これより、$det(A) = det(A^T)$ も考慮すると (行、列の順番で入れ替えていくと、偶置換になり等しくなる。)、

$$det(I_M + A^T B) = det(I_N + BA^T) = det((I_N + BA^T)^T) = det(I_N + AB^T) \tag{12}$$

となり、(C.14) が成り立つことがわかる。そのため、(C.15) も成り立つ。

同様に放射状流を考える。

$$\mathbf{f}(\mathbf{z}) = \mathbf{z} + \beta h(\alpha, r)(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}}) \tag{13}$$

これより、

$$\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}} = I + \frac{\partial \beta h(\alpha, r)(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})}{\partial \mathbf{z}} = I + \beta \frac{\partial h(\alpha, r)}{\partial r}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})\frac{\partial r}{\partial \mathbf{z}} + \beta h(\alpha, r)I \tag{14}$$

ここで、以下を考える。

$$\frac{\partial r}{\partial \mathbf{z}} = \frac{\partial \sqrt{\sum (z_i - \bar{z}_i)^2}}{\partial \mathbf{z}} = \begin{pmatrix} \frac{z_1 - \bar{z_1}}{\sqrt{\sum (z_i - \bar{z}_i)^2}} & \cdots & \frac{z_n - \bar{z_n}}{\sqrt{\sum (z_i - \bar{z}_i)^2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{r}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})^T \tag{15}$$

よって、

$$\begin{aligned}
|det(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}})| = |det(I + \beta \frac{\partial h(\alpha, r)}{\partial r}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})\frac{\partial r}{\partial \mathbf{z}} + \beta h(\alpha, r)I)| = |det((1 + \beta h(\alpha, r))I + \frac{\beta}{r}\frac{\partial h(\alpha, r)}{\partial r}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})^T)| \\
= |det((1 + \beta h(\alpha, r))(I + \frac{\beta \frac{\partial h(\alpha, r)}{\partial r}}{r(1 + \beta h(\alpha, r))}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})^T))| = |(1 + \beta h(\alpha, r))^D det(I + \frac{\beta \frac{\partial h(\alpha, r)}{\partial r}}{r(1 + \beta h(\alpha, r))}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})^T)| \\
= |(1 + \beta h(\alpha, r))^D (1 + \frac{\beta \frac{\partial h(\alpha, r)}{\partial r}}{r(1 + \beta h(\alpha, r))}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})^T(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}}))| = |(1 + \beta h(\alpha, r))^D (1 + \frac{\beta h'(\alpha, r)r}{1 + \beta h(\alpha, r)})| \\
= |(1 + \beta h(\alpha, r))^{D-1}(1 + \beta h(\alpha, r) + \beta h'(\alpha, r)r)|
\end{aligned} \tag{16}$$

よって、(6.31) が求まる。

(6.31) を厳密に見ると、上記は絶対値を取っているが、(6.31) は絶対値を取っていない。元論文を読むと、(14) では $h = \frac{1}{r+\alpha}, \alpha > 0, r \geq 0$ という条件付がされている。

h は微分可能なので、$1 + \beta h(\alpha, r), (1 + \beta h(\alpha, r) + \beta h'(\alpha, r)r)$ も微分可能になり、ここが 0 になるとヤコビアンが 0 になり、条件を満たさない。

$$\begin{aligned}
\lim_{r \to \infty} (1 + \beta h(\alpha, r)) = 1 \\
\lim_{r \to \infty} (1 + \beta h(\alpha, r) + \beta h'(\alpha, r)r) = 1
\end{aligned} \tag{17}$$

なので、絶対値を取らなくても、それぞれの項が正になることがわかる。

よって、

$$|det(\frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{z})}{\partial \mathbf{z}})| = (1 + \beta h(\alpha, r))^{D-1}(1 + \beta h(\alpha, r) + \beta h'(\alpha, r)r) \tag{18}$$