

(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。

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

また、

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1} \quad \cdots \quad \frac{\partial f}{\partial x_n} \right) \quad (2)$$

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

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

これを踏まえて、

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

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、

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

となり、(6.29) が求まる。

参考だが、行列 A,B,C,D に対して、一般に

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

となるため、

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

となり、同様に

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

となるため、

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

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。

$$\begin{pmatrix} I_N & -B \\ D^{-1}C & I_M \end{pmatrix} \quad (10)$$

これから、

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

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。)、

$$\det(I_M + A^T B) = \det(I_N + B A^T) = \det((I_N + B A^T)^T) = \det(I_N + A B^T) \quad (12)$$

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。

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

これより、

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

ここで、以下を考える。

$$\frac{\partial r}{\partial \mathbf{z}} = \frac{\partial \sqrt{\sum (z_i - \bar{z}_i)^2}}{\partial \mathbf{z}} = \left(\frac{z_1 - \bar{z}_1}{\sqrt{\sum (z_i - \bar{z}_i)^2}} \quad \cdots \quad \frac{z_n - \bar{z}_n}{\sqrt{\sum (z_i - \bar{z}_i)^2}} \right) = \frac{1}{r}(\mathbf{z} - \bar{\mathbf{z}})^T \quad (15)$$

よって、

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

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。

$$\lim_{r \rightarrow \infty} (1 + \beta h(\alpha, r)) = 1 \quad \lim_{r \rightarrow \infty} (1 + \beta h(\alpha, r) + \beta h'(\alpha, r)r) = 1 \quad (17)$$

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、

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