PPT 47页开始

$B = Z^T Z \in \mathbb{R}^{m\times m}$，$b_{ij} = \vec{z_i}^T \vec{z_j}$ （注意 $Z \in \mathbb{R}^{d'\times m}$，$d' \le d$）

令高维距离 = 低维欧氏距离 （MDS算法前提）

得到式(1)，即 $dist_{ij}^2 = \|\vec{z_i}-\vec{z_j}\|_2^2 = \|\vec{z_i}\|^2+\|\vec{z_j}\|^2 - 2\vec{z_i}^T\vec{z_j}$

$$= b_{ii}+b_{jj}-2b_{ij}$$

由此可得 $\underline{b_{ij} = -\frac{1}{2}\left(dist_{ij}^2 - b_{ii} - b_{jj}\right)}$ …… *

另有 $B = \begin{bmatrix} \vec{z_1}^T \\ \vdots \\ \vec{z_m}^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{z_1} & \cdots & \vec{z_m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{z_1}^T\vec{z_1} & \vec{z_1}^T\vec{z_2} & \cdots & \vec{z_1}^T\vec{z_m} \\ \vec{z_2}^T\vec{z_1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \vec{z_m}^T\vec{z_1} & \vec{z_m}^T\vec{z_2} & \cdots & \vec{z_m}^T\vec{z_m} \end{bmatrix}$ → 和为零向量 （Z被中心化）

令 $\vec{p} = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} \vec{z_i}$ （为样本均值向量.）

红框中式子 $(\vec{z_i}-\vec{p})^T \sum_{i=1}^{m}(\vec{z_i}-\vec{p}) = (\vec{z_i}-\vec{p})^T \left[\underbrace{\sum_{i=1}^{m} \vec{z_i} - m\vec{p}}_{\vec{0}}\right]$

与$\vec{p}$无关，$\vec{p}$可提出来.

由此可知 矩阵B中 横行元素之和为零向量，纵列元素之和也为零向量.

$\sum_{j=1}^{m} b_{ij} = 0$　　　$\sum_{i=1}^{m} b_{ij} = 0$

令 tr(·) 表示矩阵的迹，即 $tr(B) = \sum_{i=1}^{m} \|\vec{z}_i\|_2^2 = \sum_{i=1}^{m} b_{ii}$

$$\therefore \sum_{i=1}^{m} dist_{ij}^2 = \sum_{i=1}^{m} (b_{ii} + \underbrace{b_{jj}}_{\text{与}i\text{无关，提出}} - 2b_{ij}) = \underbrace{\sum_{i=1}^{m} b_{ii}}_{=tr(B)} + m b_{jj} - 2\underbrace{\sum_{i=1}^{m} b_{ij}}_{=0}$$

$$\therefore \sum_{i=1}^{m} dist_{ij}^2 = tr(B) + m b_{jj} \quad \cdots\cdots \quad (2)$$

同理，$$\sum_{j=1}^{m} dist_{ij}^2 = \sum_{j=1}^{m} (b_{ii} + b_{jj} - 2b_{ij}) = m b_{ii} + \underbrace{\sum_{j=1}^{m} b_{jj}}_{=tr(B)} - 2\underbrace{\sum_{j=1}^{m} b_{ij}}_{=0}$$

$$\therefore \sum_{j=1}^{m} dist_{ij}^2 = tr(B) + m b_{ii} \quad \cdots\cdots \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} dist_{ij}^2 \overset{\text{代入(3)}}{=} \sum_{i=1}^{m} \left(tr(B) + m b_{ii} \right) = m\,tr(B) + m \underbrace{\sum_{i=1}^{m} b_{ii}}_{=tr(B)}$$

$$\therefore \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} dist_{ij}^2 = 2m\,tr(B) \quad \cdots\cdots \quad (4)$$

定义
$$dist_{i\cdot}^2 = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} dist_{ij}^2 \overset{\text{代入(2)}}{=\!=} \frac{1}{m} tr(B) + b_{jj}$$

$$dist_{\cdot j}^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} dist_{ij}^2 \overset{\text{代入(3)}}{=\!=} \frac{1}{m} tr(B) + b_{ii}$$

$$dist_{\cdot\cdot}^2 = \frac{1}{m^2} \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{m} dist_{ij}^2 \overset{\text{代入(4)}}{=\!=} \frac{2}{m} tr(B)$$

因此 P1 中的 * 式可写为

$$b_{ij} = -\frac{1}{2}\left(dist_{ij}^2 - b_{ii} - b_{jj}\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\left(dist_{ij}^2 - \left(dist_{\cdot j}^2 - \frac{1}{m}tr(B)\right) - \left(dist_{i\cdot}^2 - \frac{1}{m}tr(B)\right)\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\left(dist_{ij}^2 - dist_{\cdot j}^2 - dist_{i\cdot}^2 + \frac{2}{m}tr(B)\right)$$

$$= -\frac{1}{2}\left(dist_{ij}^2 - dist_{i\cdot}^2 - dist_{\cdot j}^2 + dist_{\cdot\cdot}^2\right)$$