宿題 1

$$\boldsymbol{x}_i \in \mathbb{R}^d,\ \boldsymbol{T} \in \mathbb{R}^{m\times d},\ \boldsymbol{W} \in \mathbb{R}^{n\times n},\ \boldsymbol{W}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{W} \tag{1}$$
$$\boldsymbol{X} = (\boldsymbol{x}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{x}_n) \tag{2}$$
$$\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}\left(\sum_{i'=1}^{n} W_{i,i'}\right) \tag{3}$$
$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W} \tag{4}$$

に対し，

$$\sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} ||\boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_{i'}||^2 = 2\mathrm{tr}\big(\boldsymbol{T}\boldsymbol{X}\boldsymbol{L}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}\big) \tag{5}$$

が成立することを示す。

いま，

$$\boldsymbol{z}_i = \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_i \tag{6}$$

とおくと，

$$\begin{aligned}
\sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} ||\boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_{i'}||^2 &= \sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} ||\boldsymbol{z}_i - \boldsymbol{z}_{i'}||^2 \\
&= \sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} (\boldsymbol{z}_i - \boldsymbol{z}_{i'})^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{z}_i - \boldsymbol{z}_{i'}) \\
&= \sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} \big\{ ||\boldsymbol{z}_i||^2 + ||\boldsymbol{z}_{i'}||^2 - 2\boldsymbol{z}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z}_{i'} \big\}
\end{aligned}$$

ここで，$W_{i,i'} = W_{i',i}$ なので，

$$\begin{aligned}
\sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} ||\boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_{i'}||^2 &= 2\sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} \big(||\boldsymbol{z}_i||^2 - \boldsymbol{z}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z}_{i'} \big) \\
&= 2\left\{ \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{i,i'} ||\boldsymbol{z}_i||^2 \right) - \sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} \boldsymbol{z}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z}_{i'} \right\} \qquad (7)
\end{aligned}$$

いま，

$$\boldsymbol{Z} = (\boldsymbol{z}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{z}_n) \tag{8}$$

を考えると，

$$\mathrm{tr}\big(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{D}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\big) = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{i,i'} ||\boldsymbol{z}_i||^2 \right) \tag{9}$$

となり，また，

$$\mathrm{tr}\big(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{W}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\big) = \sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} \boldsymbol{z}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{z}_{i'} \tag{10}$$

となる。

式 (7)，(9)，(10) と $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{T}\boldsymbol{X}$ より，

$$\sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'} ||\boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{T}\boldsymbol{x}_{i'}||^2 = 2\mathrm{tr}\big(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{D}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\big) - 2\mathrm{tr}\big(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{W}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\big) \tag{11}$$

$$= 2\mathrm{tr}\big(\boldsymbol{Z}\boldsymbol{L}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\big) \tag{12}$$

$$= 2\mathrm{tr}\big(\boldsymbol{T}\boldsymbol{X}\boldsymbol{L}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}\big) \tag{13}$$

となって，式 (5) が示された。