宿題 1

$$\boldsymbol{W} \in \mathbb{R}^{n\times n},\ W_{i,i'} = W_{i',i} \tag{1}$$
$$\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}\left(\sum_{i'=1}^{n} W_{i,i'}\right) \tag{2}$$
$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{D} - \boldsymbol{W} \tag{3}$$

についての固有値問題

$$\boldsymbol{L\psi} = \gamma \boldsymbol{D\psi} \tag{4}$$

の最小固有値 $\gamma_n = 0$ であり，対応する固有ベクトルは $\mathbf{1}$ であることを示す。

　まず，$\boldsymbol{L}$ の最小固有値が 0 であることを示す。これは，全ての固有値が非負であること，つまり $\boldsymbol{L}$ が半正定値行列であることを示せばよい。よって，次式を示す。

$$^{\forall}\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^n : \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L\alpha} \geq 0 \tag{5}$$

$\boldsymbol{\alpha}$, $\boldsymbol{L}$ を要素ごとに表すと，

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix}\alpha_1 & \cdots & \alpha_n\end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \tag{6}$$
$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{1,i'} - W_{1,1}\right) & -W_{1,2} & \cdots & -W_{1,n} \\ -W_{2,1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -W_{n,1} & \cdots & -W_{n,n-1} & \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{n,i'} - W_{n,n}\right) \end{bmatrix} \tag{7}$$

となるので，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{L\alpha} &= \begin{bmatrix} \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{1,i'} - W_{1,1}\right) & -W_{1,2} & \cdots & -W_{1,n} \\ -W_{2,1} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -W_{n,1} & \cdots & -W_{n,n-1} & \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{n,i'} - W_{n,n}\right) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix}\alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n\end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{1,i'} - W_{1,1}\right)\alpha_1 - W_{1,2}\alpha_2 - \cdots - W_{1,n}\alpha_n \\ \vdots \\ -W_{n,1}\alpha_1 - \cdots - W_{n,n-1}\alpha_{n-1} + \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{n,i'} - W_{n,n}\right)\alpha_n \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{1,i'}\right)\alpha_1 - \sum_{i'=1}^{n} W_{1,i'}\alpha_{i'} \\ \vdots \\ \left(\sum_{i'=1}^{n} W_{n,i'}\right)\alpha_n - \sum_{i'=1}^{n} W_{n,i'}\alpha_{i'} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \sum_{i'=1}^{n} W_{1,i'}(\alpha_1 - \alpha_{i'}) \\ \vdots \\ \sum_{i'=1}^{n} W_{n,i'}(\alpha_n - \alpha_{i'}) \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

よって，

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\boldsymbol{\alpha} &= \begin{bmatrix}\alpha_1 & \cdots & \alpha_n\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\sum_{i'=1}^{n} W_{1,i'}(\alpha_1-\alpha_{i'}) \\ \vdots \\ \sum_{i'=1}^{n} W_{n,i'}(\alpha_n-\alpha_{i'})\end{bmatrix} \\
&= \sum_{i=1}^{n}\alpha_i W_{i,i'}(\alpha_i-\alpha_{i'}) \\
&= \sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'}\left({\alpha_i}^2-\alpha_i\alpha_{i'}\right) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'}\left(2{\alpha_i}^2-2\alpha_i\alpha_{i'}\right) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'}\left({\alpha_i}^2+{\alpha_{i'}}^2-2\alpha_i\alpha_{i'}\right) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'}(\alpha_i-\alpha_{i'})^2 \\
&\geq 0
\end{aligned}
$$

となり，$\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\boldsymbol{\alpha}\geq 0$ が示された。これより，$\boldsymbol{L}$ の最小固有値が 0 であることがわかる。

次に固有値 0 に対応する固有ベクトルが $\mathbf{1}$ であることを示す。

$$
\boldsymbol{L}\boldsymbol{\psi} = \gamma\boldsymbol{D}\boldsymbol{\psi} = \mathbf{0} \tag{8}
$$

から，

$$
\begin{bmatrix}\sum_{i'=1}^{n} W_{1,i'}(\psi_1-\psi_{i'}) \\ \vdots \\ \sum_{i'=1}^{n} W_{n,i'}(\psi_n-\psi_{i'})\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0 \\ \vdots \\ 0\end{bmatrix} \tag{9}
$$

となる。また，

$$
\boldsymbol{\psi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{L}\boldsymbol{\psi} = \frac{1}{2}\sum_{i,i'=1}^{n} W_{i,i'}(\psi_i-\psi_{i'})^2 = 0 \tag{10}
$$

である。これらと $W_{i,i'}\geq 0$ から，

$$
\psi_i = \psi_{i'} \qquad (i,\, i'=1,\, \cdots,\, n) \tag{11}
$$

となる。これより，

$$
\boldsymbol{\psi} = \begin{bmatrix}\psi_1 & \cdots & \psi_n\end{bmatrix} = \psi_1\begin{bmatrix}1 & \cdots & 1\end{bmatrix} = \psi_1\mathbf{1} \tag{12}
$$

となる。よって固有値 0 に対応する固有ベクトルが $\mathbf{1}$ であることがわかる。