12.2

データ空間D次元、主部分空間M次元のとき歪み尺度を最小化するラグランジアンは

$$\tilde{J} = \underbrace{\sum_{i=M+1}^{D} u_i^T S u_i}_{\text{歪み尺度}J} + \underbrace{\sum_{i=M+1}^{D} \lambda_i (1 - u_i^T u_i)}_{u_i\text{は規格化されてる条件}} + \underbrace{\sum_{i=M+1}^{D-1} \sum_{j=i+1}^{D} \mu_{ij} (-u_j^T u_i)}_{u_j\text{と}u_i\text{が直交してる条件}} \cdots ①$$

である。

ここで

$$\hat{U} = (u_{M+1} \cdots u_D)$$

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \mu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix}$$

とすると

ブロック行列の積

$$\hat{U}^T S \hat{U} = \begin{pmatrix} u_{M+1}^T \\ \vdots \\ u_D^T \end{pmatrix} S (u_{M+1} \cdots u_D) = \begin{pmatrix} u_{M+1}^T \\ \vdots \\ u_D^T \end{pmatrix} (S u_{M+1} \cdots S u_D) = \begin{pmatrix} u_{M+1}^T S u_{M+1} & \cdots & u_{M+1}^T S u_1 \\ u_D^T S u_{M+1} & \cdots & u_D^T S u_D \end{pmatrix}$$

なので

$$\mathrm{Tr}(\hat{U}^T S \hat{U}) = \sum_{i=M+1}^{D} u_i^T S u_i \quad \cdots ②$$

また

$$H(I - \hat{U}^T \hat{U}) = \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \mu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_{M+1}^T \\ \vdots \\ u_D^T \end{pmatrix} (u_{M+1} \cdots u_D) \right)$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \mu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_{M+1}^T u_{M+1} & \cdots & u_{M+1}^T u_D \\ \vdots & & \vdots \\ u_D^T u_{M+1} & \cdots & u_D^T u_D \end{pmatrix} \right)$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \mu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - u_{M+1}^T u_{M+1} & \cdots & -u_{M+1}^T u_D \\ \vdots & & \vdots \\ -u_D^T u_{M+1} & \cdots & 1 - u_D^T u_D \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \mu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - u_{M+1}^T u_{M+1} & \cdots & -u_{M+1}^T u_D \\ \vdots & & \vdots \\ -u_D^T u_{M+1} & \cdots & 1 - u_D^T u_D \end{pmatrix}$$

なので

$$\mathrm{Tr}(H(I-\hat{U}^T U)) = \lambda_{M+1}(1-u_{M+1}^T u_{M+1}) + \mu_{M+1\,M+2}(-u_{M+2}^T u_{M+1}) + \cdots + \mu_{M+1\,D}(-u_D^T u_{M+1})$$

$$+ \lambda_{M+2}(1-u_{M+2}^T u_{M+2}) + \mu_{M+2\,M+3}(-u_{M+3}^T u_{M+2}) + \cdots + \mu_{M+2\,D}(-u_D^T u_{M+2})$$

$$\vdots$$

$$+ \lambda_D(1-u_D^T u_D)$$

$$= \sum_{i=M+1}^{D} \lambda_i(1-u_i^T u_i) + \sum_{i=M+1}^{D-1}\sum_{j=i+1}^{D} \mu_{ij}(-u_j^T u_i) \quad \cdots ③$$

②, ③より ①は

$$\tilde{J} = \mathrm{Tr}(\hat{U}^T S \hat{U}) + \mathrm{Tr}(H(I-\hat{U}^T U))$$

と表わすことができる。
ここで H を対称と仮定する

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \nu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \nu_{M+1\,D} & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix}$$

この場合

$$H(I-\hat{U}^T U) = \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \nu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \nu_{M+1\,D} & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix}\left(\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_{M+1}^T \\ \vdots \\ u_D^T \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_{M+1} & \cdots & u_D \end{pmatrix}\right)$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \nu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \nu_{M+1\,D} & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix}\left(\begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} u_{M+1}^T u_{M+1} & \cdots & u_{M+1}^T u_D \\ \vdots & & \vdots \\ u_D^T u_{M+1} & \cdots & u_D^T u_D \end{pmatrix}\right)$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \nu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \nu_{M+1\,D} & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1-u_{M+1}^T u_{M+1} & \cdots & -u_{M+1}^T u_D \\ \vdots & & \vdots \\ -u_D^T u_{M+1} & \cdots & 1-u_D^T u_D \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & \cdots & \nu_{M+1\,D} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \nu_{M+1\,D} & \cdots & \lambda_D \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1-u_{M+1}^T u_{M+1} & \cdots & -u_{M+1}^T u_D \\ \vdots & & \vdots \\ -u_D^T u_{M+1} & \cdots & 1-u_D^T u_D \end{pmatrix}$$

これより

$$\mathrm{Tr}(H(I-\hat{U}^T\hat{U})) = \lambda_{M+1}(1-u_{M+1}^T u_{M+1}) + \nu_{M+1\,M+2}(-u_{M+2}^T u_{M+1}) + \cdots + \nu_{M+1\,D}(-u_D^T u_{M+1})$$

$$+ \nu_{M+1\,M+2}(-u_{M+1}^T u_{M+2}) + \lambda_{M+2}(1-u_{M+2}^T u_{M+2}) + \nu_{M+2\,M+3}(-u_{M+3}^T u_{M+2}) + \cdots + \nu_{M+2\,D}(-u_D^T u_{M+2})$$

$$\vdots$$

$$+ \nu_{M+1\,D}(-u_{M+1}^T u_D) + \cdots + \lambda_D(1-u_D^T u_D)$$

$$= \sum_{i=M+1}^{D} \lambda_i(1-u_i^T u_i) + \sum_{i=M+1}^{D-1}\sum_{j=i+1}^{D} 2\nu_{ij}(-u_j^T u_i)$$

となる。

なので $2\nu_{ij} = \mu_{ij}$ とすると H が対称の場合でも

$$\tilde{J} = \mathrm{Tr}(\hat{U}^T S \hat{U}) + \mathrm{Tr}(H(I-\hat{U}^T\hat{U}))$$

と書くことができる。

以降 H が対称であるとする。

J を最小にする $\hat{U}$ の条件は、$\tilde{J}$ を $\hat{U}$ で微分して 0 としたもので与えられる

$$\frac{\partial}{\partial \hat{U}}\mathrm{Tr}(\hat{U}^T S \hat{U}) = \left(\frac{\partial}{\partial \hat{U}^T}\mathrm{Tr}(\hat{U}^T S \hat{U})\right)^T \underset{\uparrow (C.27)\text{より}}{=} \left(\hat{U}^T(S+S^T)\right)^T \underset{\nwarrow S=S^T\text{より}}{=} 2(\hat{U}^T S)^T = 2S\hat{U}$$

また

$$\frac{\partial}{\partial \hat{U}}\mathrm{Tr}(H(I-\hat{U}^T\hat{U})) = \frac{\partial}{\partial \hat{U}}\left\{\mathrm{Tr}(H) - \mathrm{Tr}(H\hat{U}^T\hat{U})\right\} = -\frac{\partial}{\partial \hat{U}}\mathrm{Tr}(\hat{U}H\hat{U}^T)$$

$\frac{\partial}{\partial \hat{U}}\mathrm{Tr}(H)=0$　　$\mathrm{Tr}(ABC)=\mathrm{Tr}(CAB)$ (C.9)

$$\underset{\uparrow (C.27)}{=} -\hat{U}(H+H^T) \underset{\uparrow H=H^T}{=} -2\hat{U}H$$

これらを使って

$$0 = \frac{\partial}{\partial \hat{U}}\tilde{J} = 2(S\hat{U} - \hat{U}H)$$

$$\therefore\ S\hat{U} = \hat{U}H$$

を得る。

これは

$$H = \begin{pmatrix} \lambda_{M+1} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_D \end{pmatrix}$$, $\lambda_{M+1} \sim \lambda_D$ は S の固有値

$\hat{U} = (u_{M+1} \cdots u_D)$, $u_{M+1} \sim u_D$ は固有ベクトル

とすると成立している。
このとき

$$\tilde{J} = \mathrm{Tr}(\hat{U}^T S \hat{U}) + \mathrm{Tr}(H(I - \hat{U}^T U))$$

$$= \mathrm{Tr}(\hat{U}^T \hat{U} H) + \mathrm{Tr}(H(I - \hat{U}^T U))$$

$$= \mathrm{Tr}(H) = \sum_{i=M+1}^{D} \lambda_i$$

となる。$\tilde{J}$ を最小にするには $\lambda_{M+1} \sim \lambda_D$ は小さい方の固有値を選べばよい。

$\hat{V}, K$ が $S\hat{V} = \hat{V}K$ の一般解である場合 ←(解答みたん)
K が $D-M$ 個の異なる固有値を持つとする

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_{D-M} \end{pmatrix}$$, λ_i は K の固有値

$\Psi = (\phi_1 \cdots \phi_{D-M})$, ϕ_i は K の固有ベクトル

とおくと

$$K\Psi = \Psi\Lambda \cdots ④$$

である。$S\hat{V} = \hat{V}K$ の両辺に Ψ をかけると

$$S\hat{V}\Psi = \hat{V}K\Psi$$

④を使って

$$S\hat{V}\Psi = \hat{V}\Psi\Lambda$$

を得る。ここで $\hat{V}\Psi = \tilde{V}$ とおくと

$$S\tilde{V} = \tilde{V}\Lambda$$

となる。これは対角行列Λの要素λ_iがSの固有値であることを示している。

このとき

$$\tilde{J} = Tr(\hat{V}^T S \hat{V}) + Tr(K(I - \hat{V}^T\hat{V}))$$

$$= Tr(K) = Tr(\Lambda) = \sum_{i=M+1}^{D} \lambda_i$$

これを最小にするにはλ_iはSの小さい方の$D-M$個の固有値とすればよい。
この$\tilde{J}$は、H, $\hat{U}$が固有値, 固有ベクトルからなる解の場合と同じである。