作业 **7**	**SVD/CCA/**相似度**/seriation**

奇异值分解 (SVD，singular value decomposition)：

1. 对任何矩阵 $A=(a_{ij})$ (即 A 的 (i,j) 元为 a_{ij}), 证明 $\sum a_{ij}^2=\sum\sigma_i^2$, 其中 $\sigma_1,\sigma_2,...$ 为 A 的所有奇异值。

2. 说明正定矩阵 A 的奇异值分解与谱分解是一致的（因此 Eckart-Young-Mirsky 奇异值最佳逼近定理也适用于主成分，参见 lecture15, P16 定理 2 以及 lecture 13, P2）。

3. 假设 $n\times 2$ 数据矩阵 $X=(\mathbf{x}_1,\mathbf{x}_2)$, $\|\mathbf{x}_1\|=a,\|\mathbf{x}_2\|=b,a>b$. 假设 $\mathbf{x}_1^\top\mathbf{x}_2=0$, 求 X 的奇异值分解

4. 假设 A 是 $n\times m$ 矩阵，$\mathbf{u}\in R^n,\mathbf{v}\in R^m$, 假设 $A\mathbf{v}=\alpha\mathbf{u}$, $A^\top\mathbf{u}=\beta\mathbf{v}$, 其中实数 $\alpha,\beta\neq 0$。证明 α 和 β 同号且 $\sqrt{\alpha\beta}$ 是 A 的一个奇异值。

5.（普氏分析）假设 X,Y 都是 $n\times p$ 矩阵，假设 $p\times p$ 方阵 $X^\top Y$ 的奇异值分解

$$X^\top Y=UDV^\top,$$

其中 U,V 都是 p 阶正交矩阵。证明 $Q=UV^\top$ 使得 $\|X-YQ^\top\|_F^2$ 达到最小。

典则相关分析 (CCA，canonical correlation analysis)：

6. 假设 y 是随机变量，$\mathbf{x}$ 是 $p\times 1$ 随机向量，假设它们的协方差矩阵为

$$\Sigma\mathrm{cov}\begin{pmatrix}\mathbf{x}\\ y\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\Sigma_{\mathbf{xx}} & \Sigma_{\mathbf{x}y}\\ \Sigma_{y\mathbf{x}} & \Sigma_{yy}\end{pmatrix}>0,$$

其中 $\Sigma_{yy}=\sigma_y^2$ 是标量（正实数）, $\Sigma_{\mathbf{x}y}$ 是 $p\times 1$ 向量。

   (a) 试求 $\mathbf{x},y$ 的第一典则相关系数 $\sqrt{\lambda_1}$(也是唯一的非 0 典则相关系数) 和第一对典则变量 (ξ_1,η_1)。

   (b) 假设 $y,\mathbf{x}$ 均值都为 0，满足线性模型

$$y=\beta^\top\mathbf{x}+\epsilon,\epsilon\sim(0,\sigma^2),\epsilon\perp\!\!\!\perp\mathbf{x},$$

   证明该模型等价于

$$\eta_1=\sqrt{\lambda_1}\xi_1+\delta_1,\delta_1\sim(0,1-\lambda_1),\delta_1\perp\!\!\!\perp\xi_1$$

   (验证：$\beta^\top\mathbf{x}=\sqrt{\lambda_1}\sigma_y\times\xi_1$, $y=\sigma_y\times\eta_1$).

7. 假设随机向量 $\begin{pmatrix}\mathbf{y}_{q\times 1}\\ \mathbf{x}_{p\times 1}\end{pmatrix}$ 的协方差矩阵为相关系数矩阵 $R=(\rho_{ij})$, 其中 $\rho_{ii}=1,i=1,...,p+q$。证明 $\mathbf{x}$ 和 $\mathbf{y}$ 的第一典则相关系数 $\sqrt{\lambda_1}\geq\rho_{ij},i=1,...,q;j=q+1,....,q+p$。

8. 假设随机向量 $\begin{pmatrix}\mathbf{y}_{q\times 1}\\ \mathbf{x}_{p\times 1}\end{pmatrix}$ 的协方差矩阵为 $\Sigma=(1-\rho)I_m+\rho\mathbb{1}_m\mathbb{1}_m^\top$, $m=p+q$, $\rho>-1/(m-1)$, 试求 $\mathbf{x},\mathbf{y}$ 的第一典则相关系数和典则变量 (其中 I_m 是 m 阶单位阵，$\mathbb{1}_m$ 是长度为 m 的元素全为 1 的向量)。

相似度/距离，配列 (seriation), **多维标度法**（MDS)：

9. 证明在 p 维欧氏空间中至多存在 $p+1$ 个点，它们两两之间的欧氏距离全相等。

10. 假设 $S=(s_{ij})$ 是 $n\times n$ 对称矩阵, $s_{ij}\geq 0$，记 $d_i=\sum_{j=1}^n s_{ij}$, $D=diag(d_1,\ldots,d_n)$, 假设 $d_i>0, i=1,\ldots,n$。令拉普拉斯矩阵（Laplacian）$L\triangleq D-S$，令 $B=D^{-1}S$。

    (a) 证明 L 是双向中心化的（即行和、列和都为 0），且 0 一定是 L 的最小特征根。

    (b) 对任何 $\mathbf{x}=(x_1,\ldots,x_n)^\top\in R^n$,
    $$\mathbf{x}^\top L\mathbf{x}=\frac{1}{2}\sum_{1\leq i,j\leq n} s_{ij}(x_i-x_j)^2.$$

    (c) 说明 B 的所有特征根 λ 都是实数，证明 $|\lambda|\leq 1$, 且 1 是最大特征根。

    (d) ~~(选)~~ 若 $s_{ij}>0$, 我们称节点 i,j 是相邻的，记作 $i\sim j$。证明 $\lambda=-1$ 是 B 的特征根当且仅当图所有 n 个节点可由两种颜色染色，使得相邻的节点不同色。