作业提交者信息及独立完成声明

学号： 17214436

姓名：刘宇威

专业：计算机科学与技术

声明：以下作业的内容均为本人刘宇威独立完成，未有抄袭他人的部分。

Lab1 QR Algorithm

代码部分

```
# -*- coding: utf-8 -*-
# !usr/bin/env python3
"""
-------------------------------------------------
   File Name:     lab1_QR
   Description :
   Author :       Yuwei Liu
   date:           2018/5/21
-------------------------------------------------
   Change Activity:
                    2018/5/23:
-------------------------------------------------
"""

import numpy as np
from scipy.linalg import hilbert
```

```python
import math
```

```python
A = np.array([[10, 7, 8, 7],
              [7, 5, 6, 5],
              [8, 6, 10, 9],
              [7, 5, 9, 10]])
B = np.array([[2, 3, 4, 5, 6],
              [4, 4, 5, 6, 7],
              [0, 3, 6, 7, 8],
              [0, 0, 2, 8, 9],
              [0, 0, 0, 1, 0]])
H_6 = hilbert(6)
""" 利用函数生成这个Hilbert matrix
[[1.         0.5        0.33333333 0.25       0.2        0.16666667]
 [0.5        0.33333333 0.25       0.2        0.16666667 0.14285714]
 [0.33333333 0.25       0.2        0.16666667 0.14285714 0.125     ]
 [0.25       0.2        0.16666667 0.14285714 0.125      0.11111111]
 [0.2        0.16666667 0.14285714 0.125      0.11111111 0.1       ]
 [0.16666667 0.14285714 0.125      0.11111111 0.1        0.09090909]]
"""
```

```python
EPSILON = 1e-10  # 定义误差敏感度
```

```python
def check_stop_iter(mat):
    """
    判断一下是否达到了停止迭代的条件
    :param mat: A_{k}
    :return:  True 为达到停止迭代的条件
    """
    r, c = mat.shape
    for j in range(c):
        for i in range(j+1, r):
            if abs(mat[i][j]) >= EPSILON:
                return False
    return True
```

```python
def qr_algorithm(mat):
    """
    Using QR decomposition iteration to find eigenvalue of `mat`.
    通过QR迭代法，将矩阵mat变为一个相似于mat的上三角矩阵
    其对角线的元素就是mat的特征值
    :param mat:
    :return:
    """
    A_k = mat
    stop = False
    V = np.identity(mat.shape[0])
    # print("----------- start iteration --------------")
    while not stop:
```

```
        Q, R = np.linalg.qr(A_k)
        V = np.dot(V, Q)
        A_k = np.dot(R, Q)
        stop = check_stop_iter(A_k)
    # print("----------- stop iteration ---------------")
    eigenvalue = [A_k[i][i] for i in range(min(A_k.shape))]
    return A_k, eigenvalue, V
```

```
def cal_condition_num(mat):
    """
    通过计算矩阵的奇异值来求解矩阵的2-norm condition number
    :param mat:
    :return:
    """
    _, singular_value, _ = qr_algorithm(np.dot(np.transpose(mat), mat))
    return math.sqrt(singular_value[0]/singular_value[-1])
```

```
def main(mat):
    # a) 通过QR法迭代使矩阵收敛到上三角矩阵，并且得到主对角线上的特征值
    A_k, eigenvalue_qr, _ = qr_algorithm(mat)
    print("迭代后生成的矩阵A_k为:\n%s" % A_k)
    print("通过迭代法找到的矩阵特征值为:\n%s" % " ".join([str(v) for v in sorted(eigenvalue_qr)]))
    eigenvalue, eigenvector = np.linalg.eig(mat)
    print("通过函数直接求得的矩阵特征值为:\n", " ".join([str(v) for v in sorted(eigenvalue)]))

    # b) 计算矩阵的2-norm condition number
    print("通过函数直接计算得到的矩阵的2-norm condition number 为:      ", np.linalg.cond(mat))
    cond = cal_condition_num(mat)
    print("迭代法计算奇异值，再计算矩阵的2-norm condition number结果为: ", cond)
```

如何计算矩阵的2-norm condition number

矩阵的2范数，或者谱范数的定义为 $\|A\|_2=\sqrt{\rho(A^H A)}$. 按照定义，矩阵的2范数条件数等于 $\sqrt{\frac{\mu_1}{\mu_n}})$, 其中$\mu_1$ 和 μ_n是$A^H A$的最大和最小的特征值

运行结果 & 实验结果分析

```
main(A)  # 矩阵A的相关实验结果
```

```
迭代后生成的矩阵为:
[[ 3.02886853e+01  7.07685610e-15 -1.95543613e-15  7.71574689e-16]
 [ 2.39537050e-15  3.85805746e+00  2.62581967e-11 -9.05850402e-16]
 [ 1.91688748e-26  2.62560426e-11  8.43107150e-01 -1.78096048e-15]
 [ 3.04098958e-61 -2.30070007e-46  1.07862752e-34  1.01500484e-02]]

通过迭代法找到的矩阵特征值为
0.010150048397891057 0.8431071498550311 3.8580574559449525 30.288685345802122
通过函数直接求得的矩阵特征值为:
0.010150048397889211 0.8431071498550319 3.8580574559449508 30.2886853458021

迭代法计算奇异值, 再计算矩阵的2-norm condition number结果为:  2984.092702339914
通过函数直接计算得到的矩阵的2-norm condition number 为:      2984.092701675755
```

```
main(B)  # 矩阵B的相关实验结果
```

```
迭代后生成的矩阵为:
[[ 1.31723514e+01 -1.12224333e+01  1.38327301e+00  1.22876570e+01  2.18439170e+00]
 [-1.21146443e-12  6.55187835e+00 -1.45097272e+00 -5.46614904e+00  -4.24112904e-01]
 [ 0.00000000e+00 -1.99331255e-25  1.59565457e+00 -3.44534395e-01  2.00394783e+00]
 [ 0.00000000e+00  0.00000000e+00  6.92252792e-11 -9.29096278e-01  -2.94914968e-01]
 [ 0.00000000e+00  0.00000000e+00  0.00000000e+00  1.08214501e-16  -3.90788045e-01]]

通过迭代法找到的矩阵特征值为:
-0.929096277761744 -0.39078804541648804 1.5956545731593825 6.5518783519177175
13.17235139810113

通过函数直接求得的矩阵特征值为:
-0.9290962777522975 -0.3907880454164876 1.595654573149939  6.55187835191566
13.172351398103185

迭代法计算奇异值, 再计算矩阵的2-norm condition number结果为:  103.31039330100532
通过函数直接计算得到的矩阵的2-norm condition number 为:      103.31039330100934
```

```
main(H_6)  # H6矩阵的相关实验结果
```

```
迭代后生成的矩阵A_k为:

[1.6188998e+00  2.1437624e-11 -1.2486788e-16 -8.2862625e-17 2.6124809e-17 -1.35962449e-17]
[2.1437584e-11  2.4236087e-01  1.8048548e-16 -3.4541187e-20 1.2767016e-17  1.52848806e-17]
[1.2682398e-26  1.9402674e-16  1.6321521e-02 -9.3847723e-18 4.5962594e-18  6.03968200e-18]
[-4.2106270e-45 -7.1833780e-35 -9.1257098e-21  6.1574835e-04 6.5281288e-18  3.0686706e-18]
[-4.2872053e-67 -7.7046499e-57 -1.1650986e-42  1.2653852e-25 1.2570757e-05 -3.58686766e-20]
[-4.3939589e-94 -8.1277561e-84 -1.3487524e-69  1.8210668e-52 3.0270044e-32  1.0827994e-07]
```

```
通过迭代法找到的矩阵特征值为:
1.0827994844393853e-07 1.2570757122641285e-05 0.0006157483541826463 0.01632152131987584
0.2423608705752094 1.6188998589243386

通过函数直接求得的矩阵特征值为:
1.0827994844739511e-07 1.2570757122654954e-05 0.0006157483541826439 0.016321521319875833
0.24236087057520964 1.6188998589243382

迭代法计算奇异值，再计算矩阵的2-norm condition number结果为:  14940243.051486958
通过函数直接计算得到的矩阵的2-norm condition number 为:      14951058.642466014
```

实验分析：从以上结果可以看出，矩阵经过迭代，**收敛于一个上三角矩阵**；对于**对称**的矩阵，矩阵经过迭代得到了一个**对角矩阵**。

Lab2 PCA

a) 证明题

①求证D对角线上的非零元素，就是$\sum$的非零特征值：

根据书上定理1.26可知，对于$A \in C^{m\times n}$, A^HA和AA^H的非零特征值相同。

因为$\Sigma = \frac{1}{m}\tilde{X}\tilde{X}^T = (\frac{1}{\sqrt{m}}\tilde{X})(\frac{1}{\sqrt{m}}\tilde{X}^T)$, $VDV^T = \frac{1}{m}\tilde{X}^T\tilde{X} = (\frac{1}{\sqrt{m}}\tilde{X}^T)(\frac{1}{\sqrt{m}}\tilde{X})$, 所以他们拥有相同的非零特征值。又因为$D$的对角线元素为$\frac{1}{m}\tilde{X}^T\tilde{X}$的特征值，所以$D$非零的对角线元素就是$\Sigma$的非零特征值。

②求证$\tilde{X}V$的列向量是Σ的特征向量，并且互相正交：

$$\Sigma = \frac{1}{m}\tilde{X}\tilde{X}^T \tag{a.1}$$

$$\frac{1}{m}\tilde{X}^T\tilde{X} = VDV^T \tag{a.2}$$

$$\begin{aligned}&(\Sigma)(\tilde{X}V)\\&= (\frac{1}{m}\tilde{X}\tilde{X}^T)(\tilde{X}V)\\&= (\tilde{X})(\frac{1}{m}\tilde{X}^T\tilde{X})V\\&= \tilde{X}(VDV^T)V\\&= \tilde{X}VD(V^TV)\\&= \tilde{X}VD\end{aligned} \tag{a.3}$$

记$\tilde{X}V = [v_1, v_2, .., v_m], D = diag(\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_m)$

则根据(a.3)可得: $\Sigma(\tilde{X}V) = [\Sigma v_1, \Sigma v_2, .., \Sigma v_m] = (\tilde{X}V)D = [\lambda_1 v_1, \lambda_2 v_2, \ldots, \lambda_m v_m]$

由 $[\Sigma v_1, \Sigma v_2, .., \Sigma v_m] = [\lambda_1 v_1, \lambda_2 v_2, \ldots, \lambda_m v_m]$, 即证$\tilde{X}V$的列向量是$\Sigma$的特征向量

因为 $(\tilde{X}V)^T\tilde{X}V = V^T(\tilde{X}^T\tilde{X})V = mV^TVDV^TV = mD$, 又因为D是对角矩阵, 所以$\tilde{X}V$的列向量互相正交

b) 利用QR Algorithm求解Σ的特征值与特征向量

通过 `QR Algorithm` 我们可以分解A矩阵得到一个上三角矩阵T，即Schur分解, 公式可以表达为$A = QTQ^T$。 公式两边转置之后可以得到$A^T = QT^TQ^T$, 则对于对称矩阵A可以得到$T = T^T$, 即T为一个对角矩阵. 根据第一个实验我们也可以验证，对于对称的矩阵A，通过 `QR Algorithm` 迭代足够多的次数，记为n次之后，可以收敛得到一个对角矩阵$A^{(n)}$，并且此时的$A^{(n)}$矩阵对角线上的元素即为A的特征值。

每次迭代中QR分解的操作为 :

$$A^{(i)} = Q^{(i)}R^{(i)}$$
$$A^{(i+1)} = R^{(i)}Q^{(i)}$$

记$Q=Q^{(0)}Q^{(1)}\dots Q^{(n)}$, 则$AQ=AQ^{(0)}Q^{(1)}\dots Q^{(n)}=Q^{(0)}(R^{(0)}Q^{(0)})Q^{(1)}\dots Q^{(n)}=Q^{(0)}A^{(1)}Q^{(1)}\dots Q^{(n)}$. 递推可得: $AQ=QA^{(n)}$，又因为$A^{(n)}$是对角线元素为特征值的对角矩阵，且Q为正交矩阵，所以Q的列向量是A的特征向量。

所以可以通过计算QR Algorithm得到$\frac{1}{m}\tilde{X}^T\tilde{X}$的特征向量矩阵$V$, 实验二的a)中证明了$\tilde{X}V$是$\Sigma$的特征向量，因此可以进一步计算得到$\Sigma$的特征向量

代码部分

```
# -*- coding: utf-8 -*-
# !usr/bin/env python3
"""
-------------------------------------------------
   File Name:     lab2_PCA
   Description :
   Author :       Yuwei Liu
   date:           2018/5/21
-------------------------------------------------
   Change Activity:
                   2018/5/29:
-------------------------------------------------
"""
import time
import numpy as np
from scipy.io import loadmat
from matplotlib import pyplot
# from lab1_QR import qr_algorithm
from scipy.linalg import hessenberg
```

```
X = loadmat("yale_face.mat")['X']  # 4096 * 165 读取数据集
n, m = X.shape
```

```
# First step: centralized at origin
mu = np.mean(X, axis=1).reshape(-1, 1)
X_tilde = X-mu
sigma = np.dot(X_tilde, np.transpose(X_tilde))/m  # shape=(4,664, 4,664) Sigma矩阵
```

```
# Second step: find eigenvalue and eigenvector dot(X^{T}, X)/m
left = np.dot(np.transpose(X_tilde), X_tilde)/m  # shape=(165, 165)
start_time = time.time()  # 计算QR迭代法需要计算的时间
_, eigenvalue, V = qr_algorithm(left)
# np.save("eigenvalue", eigenvalue);  np.save("V", V)
# eigenvalue = np.load("eigenvalue.npy"); V = np.load("V.npy")
D = np.diag(eigenvalue)  # 构造D矩阵， 虽然后面用不到这个矩阵
eigenvector = np.dot(X_tilde, V)  # shape=(4,664, 165) Σ的特征向量
time_span = time.time() - start_time  # 136.11510396003723秒
print("没有转化为 Hessenberg matrix之前, 计算QR迭代需要%s秒" % time_span)
```

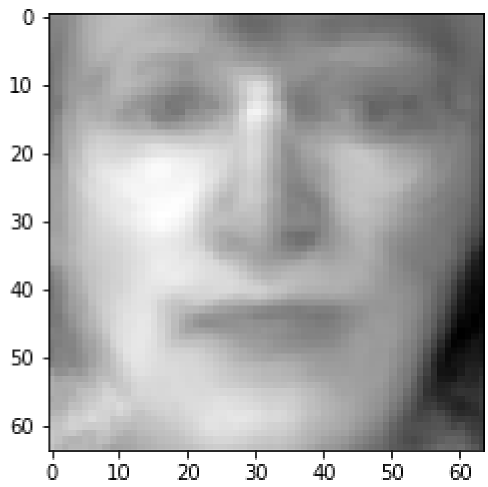
```python
K = 5  # 取出前5个最大的特征值
indices = np.argsort([abs(ev) for ev in eigenvalue])[::-1]
print("找到的前K个最大特征值对应的列下标为: ", indices[:K])
print("找到的前K个最大特征值为: ", )
for i in indices[:K]:
    print("%s " % eigenvalue[indices[i]])
```

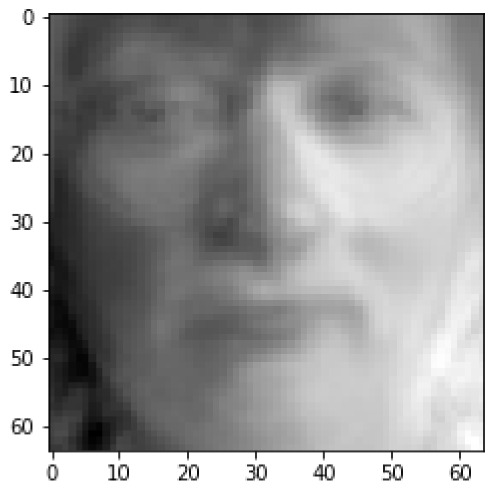
```python
for i in indices[:K]:
    x = eigenvector[:, i]
    # 可视化一下数据集
    pyplot.imshow(np.reshape(x, newshape=(64, 64), order="F"), cmap='gray')
    pyplot.pause(1)
    # pyplot.savefig("./图片/特征向量可视化_%s.jpg" % i)
    pyplot.close("all")
```

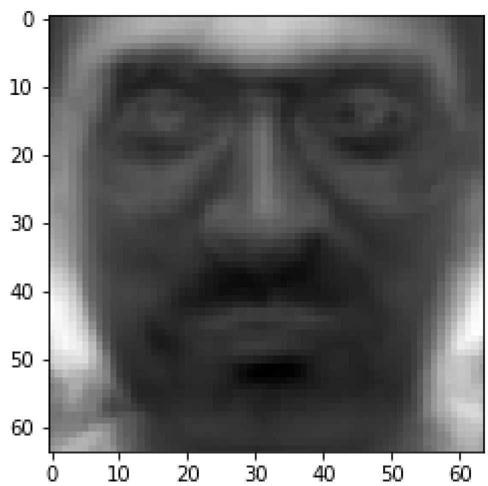
实验结果

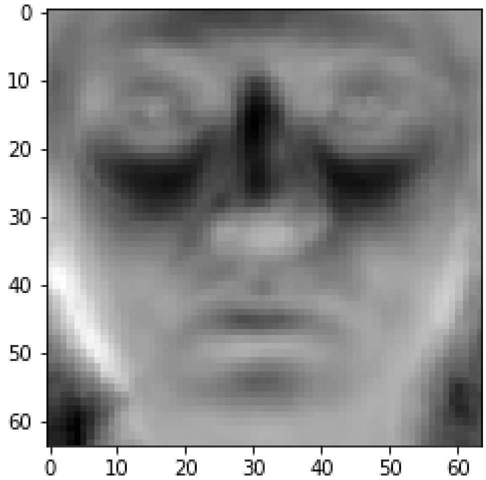
> ```
> 没有转化为 Hessenberg matrix之前，计算QR迭代需要181.10138273239136秒
>
> 找到的前K个最大特征值对应的列下标为:  [0 1 2 3 4]
>
> 找到的前K个最大特征值为:
>
>       2079027.7226285518
>
>       1298008.6883944399
>
>       1103050.5743164462
>
>       521634.6074887566
>
>       472853.65092813765
> ```

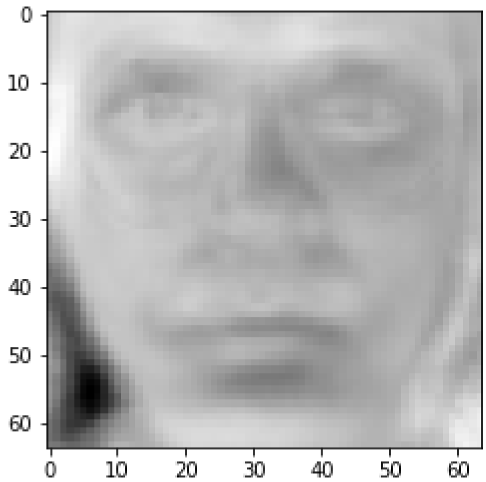
特征向量可视化的结果


0
10
20
30
40
50
60
0 10 20 30 40 50 60


0
10
20
30
40
50
60
0 10 20 30 40 50 60


0
10
20
30
40
50
60
0 10 20 30 40 50 60





c) 先相似于Hessenberg矩阵, 再计算QR Algorithm迭代

对于对称矩阵A(即$\frac{1}{m}\tilde{X}^T\tilde{X}$), 有$A=PHP^T$(via computing Hessenberg form) 且$H=Q_H DQ_H^T$(via QR Algorithm)可知A与H相似所以有相同的特征值，这些特征值λ位于对角矩阵D的对角线上, 其中H的特征向量为Q_H的列向量, 记为q_h.

对于A矩阵的特征向量q有:

$$Aq=\lambda q \tag{c.1}$$

又因为

$$Hq_h=\lambda q_h \tag{c.2}$$

且

$$H=P^TAP \tag{c.3}$$

将(c.3)带入(c.2)可得:

$$P^TAPq_h=\lambda q_h \tag{c.4}$$

P左乘(c.4) 得到

$$A(Pq_h) = \lambda(Pq_h) \tag{c.5}$$

所以此时A的特征向量为(Pq_h). 即计算A矩阵 Hessenberg form时用到的P矩阵, 左乘H矩阵的特征向量q_h

代码部分

```
# c) Convert dot(X^{T}, X)/m to Hessenberg before QR algorithm
H, P = hessenberg(left, calc_q=True)  # A = PHP^T
start_time = time.time()  # 计算QR迭代法需要计算的时间
_, eigenvalue, V = qr_algorithm(H)  # X^{t}X的特征向量和对应的特征值
time_span = time.time() - start_time  # 33.80924034118652秒
print("转化为 Hessenberg matrix之后, 计算QR迭代需要%s秒" % time_span)
```

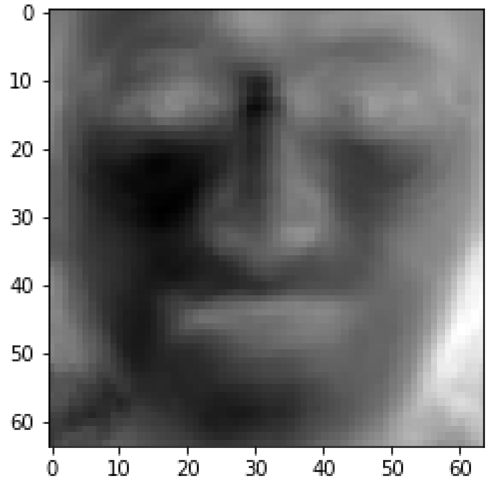
```
# np.save("eigenvalue_H", eigenvalue); np.save("V_H", V)
# eigenvalue = np.load("eigenvalue_H.npy"); V = np.load("V_H.npy")
eigenvector = np.dot(X_tilde, np.dot(P, V))  # shape=(4,664, 165) ∑的特征向量, 通过P映射V矩阵得到
indices = np.argsort([abs(ev) for ev in eigenvalue])[::-1]
print("找到的前K个最大特征值对应的列下标为: ", indices[:K])
print("找到的前K个最大特征值为: ")
for i in indices[:K]:
    print("%s " % eigenvalue[indices[i]])
```

```
for i in indices[:K]:
    x = eigenvector[:, i]
    # 可视化一下数据集
    pyplot.imshow(np.reshape(x, newshape=(64, 64), order="F"), cmap='gray')
    pyplot.pause(1)
    # pyplot.savefig("./图片/特征向量可视化H_%s.jpg" % i)
    pyplot.close("all")
```

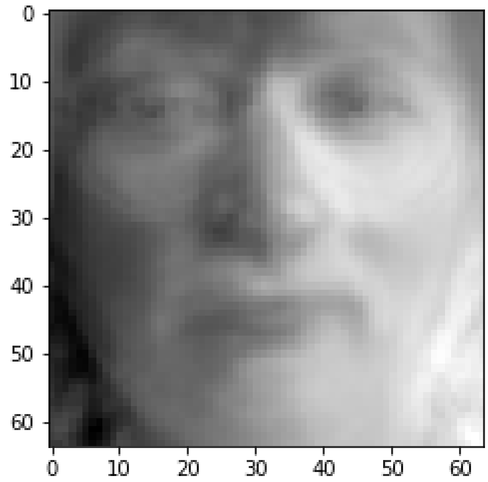
实验结果

> ```
> 转化为 Hessenberg matrix之后, 计算QR迭代需要55.76835870742798秒
>
> 找到的前K个最大特征值对应的列下标为:  [0 1 2 3 4]
>
> 找到的前K个最大特征值为:
>
>             2079027.7226285508
>
>             1298008.6883944448
>
>             1103050.574316447
>
>             521634.60748875554
>
>             472853.65092813876
> ```

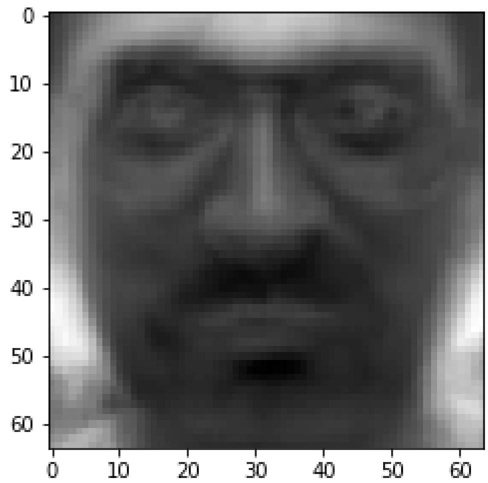
特征向量可视化的结果



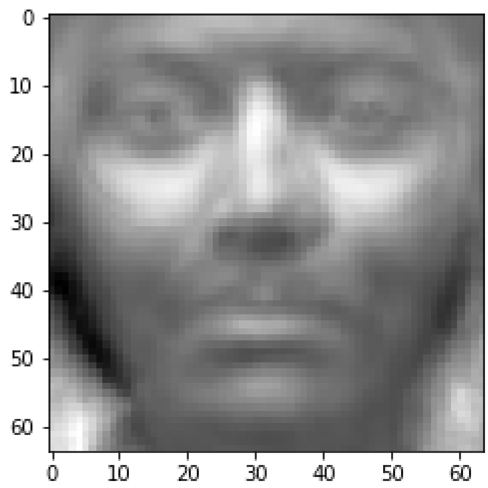
0
10
20
30
40
50
60
0
10
20
30
40
50
60

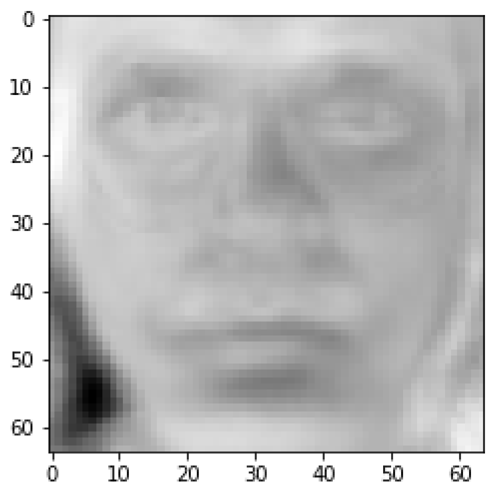


0
10
20
30
40
50
60
0
10
20
30
40
50
60



0
10
20
30
40
50
60
0
10
20
30
40
50
60





总结： 先相似于Hessenberg矩阵, 再计算QR Algorithm迭代, 最终得到的特征值与特征向量应该可以认为是十分接近了。