Title of Thesis

周宇轩

2023 年 2 月 23 日

目录

1 Paragraph

section 1 do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1, do something in section 1.

2 Math

命题 2.1 给定实对称矩阵 $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$，向量 $\vec{b} \in \mathbb{R}^n$，证明：$\mathbf{Inf}_{\vec{x}\in\mathbb{R}^n} \frac{1}{2}\vec{x}^T Q\vec{x} + \vec{b}^T\vec{x} > -\infty \iff Q$ 半正定，$\vec{b} \in \mathbf{Im}(Q)$.

证明 记 $q(\vec{x}) \overset{\text{def}}{=} \frac{1}{2}\vec{x}^T Q\vec{x} + \vec{b}^T\vec{x}$. 应该注意到，定义域 $\mathbb{R}^n$ 是线性空间，因此可先考虑 $q(\vec{x})$ 在单位球面 $B \overset{\text{def}}{=} \{\vec{x} \in \mathbb{R}^n \mid \|\vec{x}\|_2 = 1\}$ 上的值，再根据数乘 $t\vec{x}$ $(t > 0)$ 估计[1]二次型在整个定义域内的值.

首先说明 Q 应该是半正定的. 假设 Q 不满足半正定，那么存在 $\vec{x}_0 \in B$，使得 $\frac{1}{2}\vec{x}_0^T Q\vec{x}_0 < 0$. 根据极限

$$\lim_{t} q(t\vec{x}_0) = \left(\frac{1}{2}\vec{x}_0^T Q\vec{x}_0\right) t^2 + \left(\vec{b}^T\vec{x}_0\right) t = -\infty, \tag{2.1}$$

引出了矛盾，因此 Q 半正定.

在继续证明之前，可以对结论左边进行化简

$$\mathbf{Inf}_{\vec{x}\in\mathbb{R}^n} q(\vec{x}) > -\infty \iff \forall x \in B,\ \text{若}\ \frac{1}{2}\vec{x}^T Q\vec{x} = 0,\ \text{那么}\ \vec{b}^T x = 0. \tag{2.2}$$

因此只需证明

$$\text{若}\ \frac{1}{2}\vec{x}^T Q\vec{x} = 0,\ \text{那么}\ \vec{b}^T x = 0 \iff \vec{b} \in \mathbf{Im}(Q). \tag{2.3}$$

因为 Q 是对称矩阵，它满足 $\mathbf{Ker}(Q) = \mathbf{Im}(Q)^\perp$. $(\Rightarrow)$，任意选取 $\vec{x} \in \mathbf{Ker}(Q)$，那么 $Q\vec{x} = 0$，根据 (2.3) 的左边立即有 $\vec{b}^T x = 0$，根据正交补的性质，$\vec{b} \in \mathbf{Im}(Q)$. $(\Leftarrow)$，注意到证明 (2.3) 的左边时只要求了 $\vec{b} \in \mathbf{Im}(Q)$，因此这等价于证明：对于对称半正定矩阵 Q，满足关系

$$\vec{x}^T Q\vec{x} = 0 \Longrightarrow \vec{x} \in \mathbf{Ker}(Q). \tag{2.4}$$

接下来将完成 (2.4) 的证明. 根据正交补空间的性质，$\vec{x}$ 可以唯一地被表示

$$\vec{x} = \vec{x}_1 + \vec{x}_2, \quad \vec{x}_1 \in \mathbf{Im}(Q), \vec{x}_2 \in \mathbf{Ker}(Q).$$

需要注意到两个事实，

1. $\vec{x} \in \mathbf{Ker}(Q) \iff \vec{x}_1 = 0$;
2. $\vec{x}^T Q\vec{x} = (\vec{x}_1 + \vec{x}_2)^T Q(\vec{x}_1 + \vec{x}_2) = (\vec{x}_1 + \vec{x}_2)^T Q\vec{x}_1 = \vec{x}_1^T Q\vec{x}_1$.

因此要证明 (2.4) 等价于证明：对于 $\vec{x}_1 \in \mathbf{Im}(Q)$，满足关系

$$\vec{x}_1^T Q\vec{x}_1 = 0 \Longrightarrow \vec{x}_1 = 0,$$

或者等价于证明它的逆否命题

$$\vec{x}_1 \in \mathbf{Im}(Q) \setminus \{0\} \Longrightarrow \vec{x}_1^T Q\vec{x}_1 \neq 0. \tag{2.5}$$

[1]这里提到的估计方法是，二次项的值关于数乘的倍数 t 的变化速度远大于一次项的变化速度.

不妨设 $\mathbf{Im}(Q)\setminus\{0\}$ 非空，取 $\vec{x}_1\in\mathbf{Im}(Q)\setminus\{0\}$. 对称半正定矩阵 Q 存在正的特征值 $\lambda_i>0\,(1\le i\le s)$，记特征值 λ_i 对应的特征向量为 α_{ij}，因此可以写出 $\vec{x}_1$ 关于特征子空间的分解 $\vec{x}_1=\sum_{i,j}k_{ij}\alpha_{ij}$ (k_{ij} 不全为 0).

$$\vec{x}_1^TQ\vec{x}_1=\left(\sum_{i,j}k_{ij}\alpha_{ij}\right)^TQ\left(\sum_{i,j}k_{ij}\alpha_{ij}\right)=\left(\sum_i\sum_j k_{ij}\alpha_{ij}\right)^T\left(\sum_i\lambda_i\sum_j k_{ij}\alpha_{ij}\right)=\sum_i\lambda_i\left\|\sum_j k_{ij}\alpha_{ij}\right\|^2>0.$$

至此已经证明了 (2.5) 成立. ■

3 Code

```python
import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.cluster import KMeans
from sklearn import metrics
import matplotlib.pyplot as plt

def Cluster(X, n_clusters):
    '''
    对数据集 X 进行 k 均值聚类分析，k=n_clusters
    '''
    # 建立聚类模型对象
    kmeans = KMeans(n_clusters=n_clusters, random_state=2018)
    # 训练聚类模型
    kmeans.fit(X)
    # 预测聚类模型
    pre_y = kmeans.predict(X)
    # 样本距离最近的聚类中心的总和
    inertias = kmeans.inertia_
    return pre_y, inertias

# 导入数据
print(" 开始导入数据, This is Tom's book")
df_x = pd.read_csv("A 题附件 1-read 计数矩阵.csv", header=0)
title = np.array(df_x.columns)
X = np.array(df_x)
df_y = pd.read_excel("A 题附件 1-细胞类型.xlsx", header=0, index_col=0)
y = np.array(df_y)
# 数据预处理
print(" 数据预处理")
X = np.delete(X, 0, axis=1)
X = X.T
y = y.T
y = y[0]
title = np.delete(title, 0)
# 主成分分析
print(" 主成分分析")
```

```
from sklearn.decomposition import PCA
# 取 60 个主成分，此时 var 已经达到 0.8
```

参考文献

[1] LeVeque R. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations*. SIAM, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2007. 357 pp.

[2] Thomas J W. *Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods*. Red. by Marsden J E, Sirovich L, Golubitsky M, et al. Vol. 22. Texts in Applied Mathematics. New York, NY: Springer New York, 1995. DOI: 10.1007/978-1-4899-7278-1.

[3] Thomas J W. *Numerical Partial Differential Equations*. Red. by Marsden J E, Sirovich L, Golubitsky M, et al. Vol. 33. Texts in Applied Mathematics. New York, NY: Springer New York, 1999. DOI: 10.1007/978-1-4612-0569-2.

[4] Jeong D, Li Y, Lee C, et al. "Verification of Convergence Rates of Numerical Solutions for Parabolic Equations". In: *Mathematical Problems in Engineering* 2019 (2019): e8152136. DOI: 10.1155/2019/8152136.

[5] *List of Runge Kutta methods*. In: *Wikipedia*. Page Version ID: 1084750705. 2022.

[6] Gockenbach M S. *Understanding and Implementing the Finite Element Method*. 3600 Market Street, 6th Floor Philadelphia, PA 19104-2688: SIAM, 2006. DOI: 10.1137/1.9780898717846.