计算方法编程作业 4 实验报告

张博厚 PB22071354

1 实验目的

练习使用 Jacobi 方法求解矩阵的所有特征值, 并在此基础上学习 PCA 和 SVD 分解方法.

2 实验内容

2.1 SVD 分解

自行生成一个 4*3 随机矩阵, 用 Jacobi 方法求解矩阵 AA^T 的特征值, 并据此计算 A 的 SVD 分解. 输出特征值, U, V, Σ.

2.2 PCA

对 iris 数据集进行 PCA, 输出计算得到的协方差矩阵, 可视化展示这些数据在前两个主方向上的分布, 其中不同标签用不同颜色加以区分.

3 实验结果

3.1 SVD 分解结果

使用 C++ 中的 random 标准库来生成随机数, 为保证代码可复现, 将随机数种子设置为常数. 生成的随机矩阵为:

$$A = \begin{pmatrix} 0.918271 & 0.861207 & 0.892263 \\ 0.514187 & 0.422286 & 0.446431 \\ 0.990665 & 0.0879396 & 0.550096 \\ 0.371987 & 0.0903832 & 0.00475726 \end{pmatrix}$$

对 AA^T 矩阵做 Jacobi 方法, 可得特征值分别为:$4.13491, 0.294368, 0.0320901, 5.39843 \times 10^{-8}$, 在执行 Jacobi 方法过程中, 各次迭代所得矩阵的非对角元平方和如下图所示:

```
第0次迭代， 非对角元素平方和： 9.41357
第1次迭代， 非对角元素平方和： 5.05486
第2次迭代， 非对角元素平方和： 0.759871
第3次迭代， 非对角元素平方和： 0.0159197
第4次迭代， 非对角元素平方和： 0.0057515
第5次迭代， 非对角元素平方和： 0.000316598
第6次迭代， 非对角元素平方和： 9.71301e-05
第7次迭代， 非对角元素平方和： 4.9867e-05
第8次迭代， 非对角元素平方和： 1.70882e-05
第9次迭代， 非对角元素平方和： 1.55916e-06
最终非对角元素平方和： 3.16216e-08
```

图 1: 迭代中的非对角元平方和

并且可得 SDU 分解中的各矩阵分别为:

$$U = \begin{pmatrix} 0.74654 & -0.509957 & -0.00851348 & 0.427257 \\ 0.390974 & -0.181892 & 0.0806777 & -0.898635 \\ 0.516703 & 0.791545 & -0.324371 & 0.0354674 \\ 0.151113 & 0.283398 & 0.942445 & 0.0929943 \end{pmatrix}$$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} 2.03345 & 0 & 0 \\ 0 & 0.542556 & 0 \\ 0 & 0 & 0.179138 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$V = \begin{pmatrix} 0.715362 & 0.604123 & 0.351132 \\ 0.426431 & -0.775525 & 0.465531 \\ 0.553546 & -0.183289 & -0.812403 \end{pmatrix}$$

经检验, 有 $A = U\Sigma V^T$ 成立.

3.2 PCA 结果

计算得到的协方差矩阵为:

$$\frac{1}{m}XX^T = \begin{pmatrix} 0.681122 & -0.0390067 & 1.26519 & 0.513458 \\ -0.0390067 & 0.186751 & -0.319568 & -0.117195 \\ 1.26519 & -0.319568 & 3.09242 & 1.28774 \\ 0.513458 & -0.117195 & 1.28774 & 0.578532 \end{pmatrix}$$

计算所得的数据存放于压缩包/res 目录下, 利用 Python matplotlib 库进行数据可视化处理, 结果如下:

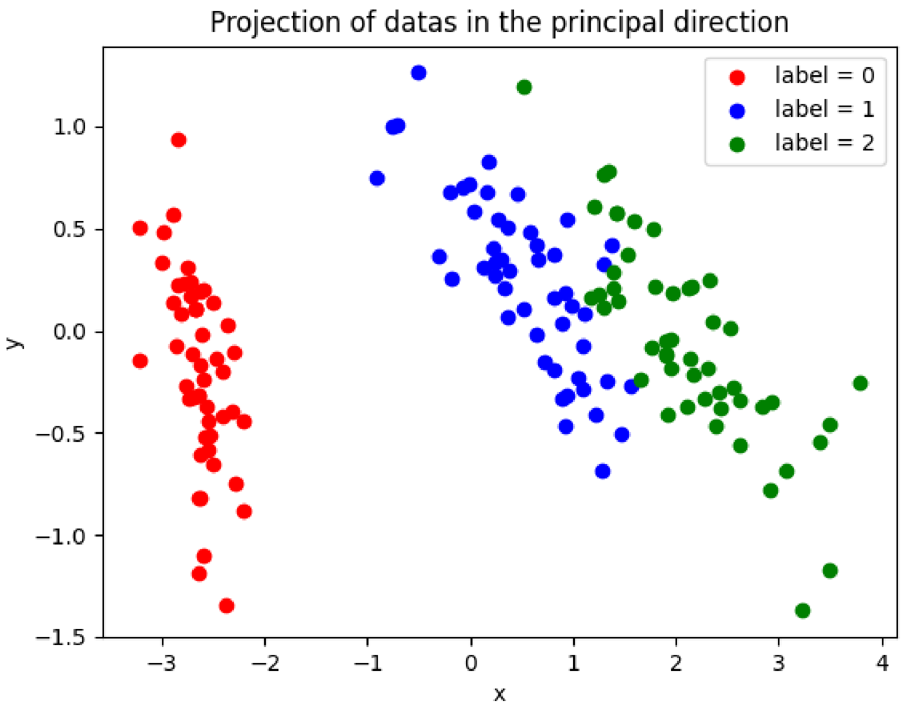

图 2: 数据可视化

4 结果分析

(a) 由图 1 可以看出, 在 Jacobi 方法执行过程中, 非对角元素平方和呈现逐次下降趋势, 计算 $det(AA^T - \lambda_i I)$ 的结果如下:

```
det(AAT - lambda0 I) = 8.7691e-12
det(AAT - lambda1 I) = -1.59155e-08
det(AAT - lambda2 I) = -1.06573e-11
det(AAT - lambda3 I) = 2.1086e-09
```

图 3: 计算 $det(AA^T - \lambda_i I)$

上述值均接近 0, 可以认为所求的是矩阵 AA^T 的特征值.

(b) 通过 PCA 主成分分析后, 可以看出 label 不同的数据在前两个主方向的投影区别明显, 说明数据间有显著差异, 其中 label $= 0$ 的数据与其他两类区别最为明显.

5 实验总结

本次实验相比前几次, 任务量有明显提高, 需要自行学习的部分较多. 其中 Jacobi 方法可以按照教材所述算法实现 (需要注意第三版教材中, Jacobi 方法的伪代码有误, 在每次迭代时, a[p][p] 与 a[q][q] 均未置 0).

在求出特征值后, 求解特征向量时, 若运用高斯消元法, 可能由于系数矩阵不满秩, 导致解出平凡解 O, 因此在进行列主元消元后, 先判断系数矩阵是否满秩, 若不满秩, 则将后面的全 0(接近 0) 行的解 y_i 先设置为 1.

对于矩阵与其特征值 λ_i, 若 $\boldsymbol{v}$ 是其对应的特征向量, 则 $-\boldsymbol{v}$ 也是特征向量, 即有两个相反的方向, 因此若直接将特征向量按列拼成矩阵 U,V, 可能会不符合要求, 正确的做法是先解出 U, 再利用 $A = U\Sigma V^T$ 即 $AV = U\Sigma$ 反解 V.