

3 矩阵和线性代数

① 奇异值分解 (Singular Value Decomposition)

原理: 见⑤
的性质4: 02

对 $m \times n$ 阶实矩阵 $A_{m \times n}$, 存在一个分解使得
单位正交矩阵, 即 $U^T U = I, V^T V = I$

$$A_{m \times n} = U_{m \times m} \Sigma_{m \times n} V_{n \times n}^T$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

\downarrow σ_3 的左奇异向量 \downarrow 矩阵A的奇异值 \downarrow σ_3 的右奇异向量
 突出, 奇特, 非凡

PCA (主成分分析) 概述
是求几个主方向, 这些
方向方差最大,

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \end{bmatrix}$$

σ_i 是特征值 λ_i 开根号得到的

截取前 k 个系数, 使前 k 个系数加和大于 90%

② 方阵行列式: 1×1 方阵, 2×2 方阵, 3×3 方阵, ...

$$|A| = a_{11} \quad |A| = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \quad |A| = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} - a_{13}a_{22}a_{31}$$

$|A_{n \times n}|$: 主对角线 (\\) 元素乘积 减去 次对角线元素 (//) 乘积
也等于任意一行/列元素与其对应的代数余子式乘积之和

$$\forall 1 \leq j \leq n, |A| = \sum_{i=1}^n a_{ij} (-1)^{i+j} M_{ij}$$

$$\forall 1 \leq i \leq n, |A| = \sum_{j=1}^n a_{ij} (-1)^{i+j} M_{ij}$$

代数余子式 M_{ij} : 在 $A_{n \times n}$ 中, 划掉 a_{ij} 所在的第 i 行和第 j 列
余下元素组成的矩阵 M_{ij} 记为 $A_{n \times n}$ 关于 a_{ij} 的
代数余子式 A_{ij} 的行列式 M_{ij} 乘以 $(-1)^{i+j}$

③ 伴随矩阵 A^* : 由原矩阵 A 各元素代数余子式组成的矩阵

$$A^* = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & \dots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \dots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \quad A_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$$

$$A \cdot A^* = \begin{bmatrix} |A| & 0 & \dots & 0 \\ 0 & |A| & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & |A| \end{bmatrix} = |A| \cdot I \Rightarrow A^{-1} = \frac{1}{|A|} A^*$$

④ 范德蒙行列式

用数学归纳法证明

↓

$$D_n = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \dots & x_n^{n-1} \end{vmatrix} = \prod_{i,j (n \geq i > j \geq 1)} (x_i - x_j) \neq 0$$

性质: 对任意 i, j , 如果满足 $\forall i, j, x_i \neq x_j$, 则 D_n 可逆.

用途: D_n 可逆 \Leftrightarrow 能得到 D_n^{-1} (逆矩阵) \Leftrightarrow 以 D_n 做为方程组系数,

则方程可解 \Leftrightarrow 用范德蒙行列式构造一个 n 阶多项式,

得到一条曲线, 让曲线穿过 $n+1$ 个已知点, 并对多项式求

系数解 \Leftarrow 拉格朗日插值法,

⑤ 拟合 vs 插值

100 个点, 用 99 阶多项式来^拟拟合, 保证曲线经过每个点 \rightarrow 插值.

100 个点, 用 20 阶多项式来拟合, 保证每个点近似落在曲线上 \rightarrow 拟合

⑥ 矩阵乘法 (略)

⑦ 状态转移概率矩阵，马尔可夫，与平稳分布

马尔可夫模型：假定状态转移概率只依赖前一个时刻的状态，不需要更早的状态，这是一个简单的马尔可夫网络

例子： $\pi^{(n+1)} = \pi^{(n)} \cdot P$

$$(\pi_1^{n+1}, \pi_2^{n+1}, \pi_3^{n+1}) = (\pi_1^n, \pi_2^n, \pi_3^n) \begin{bmatrix} 0.65 & 0.28 & 0.07 \\ 0.15 & 0.67 & 0.18 \\ 0.12 & 0.36 & 0.52 \end{bmatrix}$$

子代
上座 中层 下层
父代
上座 中层 下层(收入)

状态转移概率

不断迭代最终的 $\pi(\pi_1, \pi_2, \pi_3)$ 稳定在 $[0.286, 0.488, 0.225]$ ，它只与状态转移概率矩阵中有关，与初始值无关

↓ 对于非同期马尔可夫随机过程

而这个稳定后的 π ，是

平稳分布：状态转移概率矩阵 P 的特征， π 最终稳定

P 最大的特征值对应的特征向量
(在迭代过程中，这个特征值不断增大，直到为1，其它特征值不断减小，直到为0)

⑧ 矩阵乘法，加速(略)(伪代码)

⑨ 矩阵和向量的乘法： $\vec{y} = A \cdot \vec{x}$

表示从 n 维坐标空间到另一个 m 维坐标空间的线性变换

$A_{n \times n}$ 可以实现向量

平移，旋转，平移+旋转，伸缩，...

⑩ 矩阵的 k 阶子式：

$A_{m \times n}$ 矩阵中任取 k 行， k 列 (共有 $C_m^k C_n^k$ 种取法)，得到子矩阵的行列式

⑪ 矩阵的秩 (理解成倒数的推广)：矩阵 $A_{m \times n}$ 有一个 r 阶子式不为0，同时所有 $r+1$ 阶子式都为0，则将 r 为 $A_{m \times n}$ 的秩

则 $|D|$ ： $A_{m \times n}$ 的最高阶非零子式

$R(A_{m \times n}) = r$ ：记为 $A_{m \times n}$ 的秩

→ 特性：

✓ $n \times n$ 的可逆矩阵，秩为 n

✓ 可逆矩阵又称为满秩矩阵。

✓ 矩阵的秩 = 它行(列)向量组的秩

也与方程组系数有关

② 秩与线性方程组求解:

对于 n 元线性方程组 $A\vec{x} = \vec{b}$

(a) 无解 $\Leftrightarrow R(A) < R(A, b)$

(b) 有唯一解 $\Leftrightarrow R(A) = R(A, b) = n$

(c) 有无限多解 $\Leftrightarrow R(A) = R(A, b) < n$

推论:

(d) $A\vec{x} = 0$ 有非零解 $\Leftrightarrow R(A) < n$

(e) $A\vec{x} = b$ 有 ~~非零~~ 解 $\Leftrightarrow R(A) = R(A, b)$

⑬ $C = A \cdot B$ 向量组 C 能由向量组 B 线性表示

\Leftrightarrow 矩阵 $C = (c_1, c_2, \dots, c_m)$ 的秩等于矩阵 $(A, B) = (a_1, a_2, \dots, a_m, b_1, b_2, \dots, b_m)$ 的秩, 即 $R(A) = R(A, B)$

↓
观察信号 ↓
原始信号

⑭ 正交阵: $A^T A = I \Leftrightarrow A$ 的行/列向量都是单位向量, 且两两正交

正交变换: $A\vec{x}$ 其中 A 是正交阵, \vec{x} 是向量, 正交变换不改变向量长度

⑮ 特征值和特征向量: $A_{n \times n} \vec{x} = \lambda \vec{x}$ 若这样的 λ 和 \vec{x} 存在

用举例: 白化 (whitening)

n 维非 0 向量

我们认为 λ 是 $A_{n \times n}$ 的一个特征值
 \vec{x} 是 λ 对应的特征向量

(求特征值方法见 PPT)

性质 1: 设 $A_{n \times n}$ 特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, 则

① $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = a_{11} + a_{22} + \dots + a_{nn}$ 称作 $A_{n \times n}$ 的迹

② $\lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdot \dots \cdot \lambda_n = |A|$

用于 SVD

性质 2: ① λ 是 A 的特征值 $\Rightarrow \lambda^2$ 是 A^2 的特征值

② A 可逆时, λ^{-1} 是 A^{-1} 的特征值

$$\begin{aligned} P^T A P &= \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{bmatrix} \\ P^T A P &= P \Lambda P^T \\ |A| &= |P \Lambda P^T| \\ A &= P \Lambda P^T \end{aligned}$$

性质 3: ① 不同特征值对应的特征向量线性无关

性质 4: ① 实对称阵的不同特征值对应的特征向量正交

② 若 $A_{n \times n}$ 是对称阵, 则必有正交阵, 使得 $P^T A P = \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{bmatrix}$

协方差矩阵, 二次型矩阵,

无向图邻接矩阵.

特征向量组成

用于谱聚类, PCA, SVD

A 与 Λ 互为合同矩阵

⑩ 正定阵：正数在 n 阶的推广

对于 n 阶方阵 A ，若 $\forall n$ 阶向量 x ，都有 $\vec{x}^T A \vec{x} > 0$ ，则 A 是正定阵。

↓ 推论性质

> 0	正定阵
< 0	负定阵
≤ 0	半负定阵

对于 $A_{m \times n}$ ， $A^T A$ 一定是半正定阵

$$(A^T A)^T = A^T A$$

↓ 用于线性回归

$$\vec{x}^T (A^T A) \vec{x} = (\vec{x}^T A^T)(A \vec{x}) = (A \vec{x})^T (A \vec{x}) \geq 0$$

判定：对称阵 A 为正定阵 $\Leftrightarrow A$ 的特征值都为正 $\Leftrightarrow A$ 的顺序主子式大于 0

⑪ 基，正交基，标准正交基

基：如果存在一组向量 e_1, e_2, \dots, e_k 使得 k 列向量 a_i 都能用它们线性表示，就说 e_1, e_2, \dots, e_k 是矩阵的基。

正交基：如果 e_1, e_2, \dots, e_k 还是两两正交的

⑫ QR分解 \rightarrow 求解矩阵的逆，特征值 \rightarrow 用于梯度下降计算 \rightarrow 线性回归
LFM 隐特征提取

① 向量的导数: $\vec{y}_{m \times 1} = A_{m \times n} \vec{x}_{n \times 1}$

$$\vec{y} = A \cdot \vec{x} = \begin{bmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = A_{m \times n} \vec{x}_{n \times 1}$$

定义 $\frac{\partial \vec{y}}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial A \vec{x}}{\partial \vec{x}} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} = A^T$ 一阶 $\frac{dy}{dx} = \frac{dax}{dx} = a$
 n阶 $\frac{\partial \vec{y}}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial A \vec{x}}{\partial \vec{x}} = A^T$

② 向量的偏导公式 \Rightarrow 用于线性回归

$$\frac{\partial A \vec{x}}{\partial \vec{x}} = A^T \quad (\text{如定义})$$

$$\frac{\partial A \vec{x}}{\partial \vec{x}^T} = \frac{\partial (\vec{x}^T A)^T}{\partial \vec{x}^T} = (A^T)^T = A$$

$$\frac{\partial \vec{x}^T A}{\partial \vec{x}} = \frac{\partial (A^T \vec{x})^T}{\partial \vec{x}} = \left(\frac{\partial A^T \vec{x}}{\partial \vec{x}} \right)^T = (A^T)^T = A.$$

③ 标量对向量的导数

若 $y = (\vec{x}_{n \times 1})^T A_{n \times n} \vec{x}_{n \times 1}$ 则 $\frac{\partial y}{\partial \vec{x}_{n \times 1}} = \frac{\partial (\vec{x}_{n \times 1}^T \cdot A_{n \times n} \vec{x}_{n \times 1})}{\partial \vec{x}_{n \times 1}} = (A^T + A) \vec{x}_{n \times 1}$

当 $A^T = A$ (对称阵) 时: $\frac{\partial y}{\partial \vec{x}_{n \times 1}} = 2A \vec{x}_{n \times 1}$

④ 标量对方阵的导数

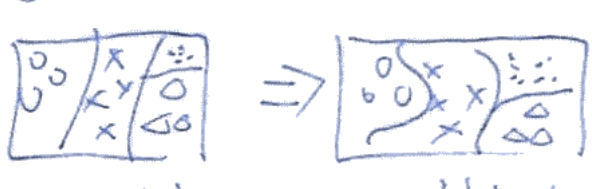
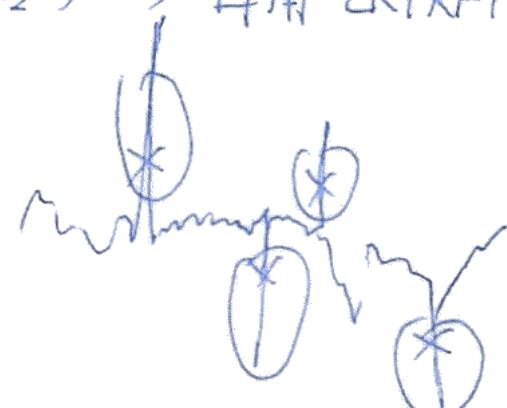
$$\frac{\partial |A|}{\partial a_{ij}} = \frac{\partial \sum_{i=1}^n a_{ij} (-1)^{i+j} M_{ij}}{\partial a_{ij}} = (-1)^{i+j} M_{ij} = A_{ji}^* \quad \text{即 } a_{ji} \text{ 的伴随矩阵.}$$

$$\frac{\partial |A|}{\partial A} = (A^*)^T = |A| (A^{-1})^T$$

$$\uparrow \\ A \cdot A^* = |A| I.$$

⑤ FFT 快速傅里叶变换 (12分)

数据清洗

- ① 用pandas读数据集, 根据字符串编辑距离对接错单词做模糊归类
- ② 手机用户流失率分析: 字段缺失, 年龄等, 详见⑦
- ③ PCA主成分分析, 从 n 个特征中选出影响力最大的 $k < n$ 个特征
详解见后面 $(\lambda_1 + \dots + \lambda_k) \geq 90\% (\lambda_1 + \dots + \lambda_k + \dots + \lambda_n)$
- ④ PCA主成分分析 (选出影响力最大的 k 个特征) \rightarrow Poly (用多项式对PCA选出来的特征进行组合) \rightarrow 再用 LR/RF/SVM... 分类

二阶模型 \Rightarrow 三阶模型
- ⑤ 异常值清洗
 \Rightarrow 用随机森林 6.5. pollution.py

⑥ one-hot 编码:

价格	very high 0001	high 0010	low 0100	very low 1000
车门数量	2个 0001	3个 0010	4个 0100	5个或更多 1000
载人数目	2人 0001	4个 0010	6人 0100	更多 1000

★ 这样做的原因是, 不希望原始特征之间产生关联, 例如 28度酒 \times 又不代表 56度酒。

★ LR 往往需要 one-hot; RF, 决策树逻辑上不需要, 实际中往往也会。

⑦ 手机用户流失率分析

★ 有些数据需要从字符串转成ID

★ 有些数据需要根据给定的分界值进行分组

★ 有些数据需要取对数

★ 有些数据需要简单分成若干等份

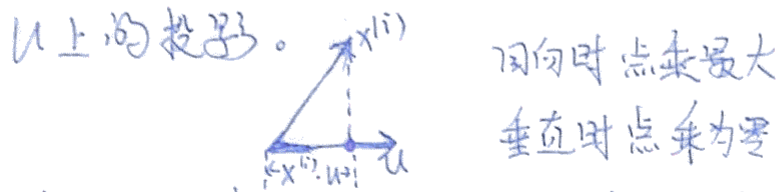
★ 有些数据需要做 one-hot 编码

⑧ PCA主成分分析：特征降维，例如把 f_1, f_2, f_3, f_4 四个特征映射到 u_1, u_2 两个特征。

<a> 怎样的 u 最好？所有样本 $X^{(i)} = (f_1^{(i)}, f_2^{(i)}, f_3^{(i)}, f_4^{(i)})$ 映射到 $u_1 = (f_1^{(u)}, f_2^{(u)}, f_3^{(u)}, f_4^{(u)})$ 后，都落在 u_1 附近（到 u_1 距离最小，方差最大， u_1 区分样本能力最强）



 向量投影，当 u 是单位向量（即 $u^T u = 1$ ）时， $X^{(i)} \cdot u$ 即为 $X^{(i)}$ 在 u 上的投影。



<c> 求所有样本在 u 上的投影，求投影值的方差

$$\begin{bmatrix} X^{(1)} \\ X^{(2)} \\ \vdots \\ X^{(n)} \end{bmatrix} \cdot u = \begin{bmatrix} f_1^{(1)} & f_2^{(1)} & f_3^{(1)} & f_4^{(1)} \\ f_1^{(2)} & f_2^{(2)} & f_3^{(2)} & f_4^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_1^{(n)} & f_2^{(n)} & f_3^{(n)} & f_4^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1^{(u)} \\ f_2^{(u)} \\ f_3^{(u)} \\ f_4^{(u)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z^{(1)} \\ z^{(2)} \\ \vdots \\ z^{(n)} \end{bmatrix}$$

求 $z^{(1)} \dots z^{(n)}$
方差，方差越大 u 越合适

更进一步（如本页顶部图）可通过平移 u ，来上投影均值 $\frac{1}{n} \sum z^{(i)}$ 为零（即 z 去中心化）

方差 $\text{Var}(z) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (z^{(i)} - 0)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (z^{(i)})^2 = \frac{1}{n} z^T z = \frac{1}{n} (Xu)^T (Xu)$

<d> 转为 $u^T \cdot u = 1$ 约束下求 $(Xu)^T (Xu)$ 极值问题，用拉格朗日法，
(单位向量约束)

$$L(u, \lambda) = (Xu)^T (Xu) + \lambda(u^T u - 1) = u^T (X^T X) u + \lambda(u^T u - 1)$$

$\frac{\partial L(u, \lambda)}{\partial u} = 2X^T X u + 2\lambda u$ ← 线性②: $A^T = A$ 时 $\frac{\partial (X^T A X)}{\partial X} = 2AX$

令偏导为零: $X^T X u = (-\lambda) u = 2\lambda' u$ ← 线性⑤: 特征向量定义
 4×4 已知矩阵 $X^T X$ 的 或是 $X^T X$ 特征的

求解该方程，得到的 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ 是特征值，对应的 u_1, u_2, u_3, u_4

因为 $X^T X$ 是实对称阵，因此一定有解，且 u_1, u_2, u_3, u_4 正交 线性④性质4

<f> 按 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4$ 排序，按点总数的 % 截断，来从 u_1, u_2, u_3, u_4 可用作线性空间坐标轴