Introdução Álgebra Linear para Ciência de Dados

Prof. Wagner Hugo Bonat

Curso de Especialização em Data Science & Big Data Universidade Federal do Paraná

6 de abril de 2018

Conteúdo



Conteúdo

1. Vetores

- 1.1 Definição;
- 1.2 Operações com vetores;
- 1.3 Dependência e independência linear;
- 1.4 Vetores em R.

2. Matrizes

- 2.1 Definição;
- 2.2 Operações com matrizes;
- 2.3 Matrizes especiais;
- 2.4 Inversa de uma matriz;
- 2.5 Determinante de uma matriz;
- 2.6 Propriedades de matrizes.
- 3. Aplicação: Regressão linear múltipla.
- 4. Matrizes esparsas
 - 4.1 Definição;
 - 4.2 Matrizes esparsas em R: O pacote Matrix.
 - 4.3 Tempo computacional e uso de memória.



Vetores



Vetores

- Vetores são grandezas (matemáticas ou físicas) com módulo e direção.
- ► Notações usuais: \vec{v} e v.
- Um vetor é escrito listando seus componentes em uma linha ou coluna.

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_x & v_y & v_z \end{bmatrix}$$
 ou $\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix}$.

- ▶ Vetor pode ser representado por v_i , onde i = 1, 2, 3.
- Módulo de um vetor é o seu comprimento

$$|\textbf{v}| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}.$$

Vetor unitário $\hat{\mathbf{v}} = \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|}$.



Vetores

- Em situações físicas os vetores são restritos a três dimensões.
- A idéia pode ser generalizada.
- ► Um vetor é uma lista de *n* números (elementos ou componentes) escritos em linha ou coluna.

$$\mathbf{v} = [v_1 \dots v_n]$$
 ou $\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$.

- ▶ Um elemento de um vetor é chamado *v_i*, onde o subscrito denota a posição do elemento na linha ou coluna.
- ► Elementos em linha vetor linha.
- ► Elementos em coluna vetor coluna.



Operações com vetores

- ▶ Dois vetores são iguais se tem o mesmo tamanho e se todos os seus elementos em posições equivalentes são iguais.
- Nem todas as operações fundamentais em matemática são definidas para vetores.
- Vetores podem ser somados, subtraídos e multiplicados (de certa forma).
- Vetores não podem ser divididos.
- Existem operações especiais para vetores, como produto interno e cruzado.



Operações com vetores

- ➤ Dois vetores podem ser somados ou subtraídos apenas se forem do mesmo tipo e do mesmo tamanho.
- ► Sejam dois vetores \mathbf{x} e \mathbf{y} adequados e α um escalar, as seguintes operações são bem definidas.
 - 1. Soma $\mathbf{x} + \mathbf{y} = [x_i + y_i] = [x_1 + y_1, \dots, x_n + y_n].$
 - 2. Subtração $\mathbf{x} \mathbf{y} = [x_i y_i] = [x_1 y_1, \dots, x_n y_n].$
 - 3. Multiplicação por escalar $\alpha \mathbf{x} = [\alpha \mathbf{x}_1, \dots, \alpha \mathbf{x}_n]$.
 - Transposta de um vetor: A operação transposta transforma um vetor coluna em um vetor linha e vice-versa. Por exemplo,

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 & \dots & x_n \end{bmatrix} \qquad \mathbf{x}^\top = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}.$$



Multiplicação de dois vetores

▶ Produto interno ou escalar → resulta um escalar (número), i.e.

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = [x_1y_1 + x_2y_2 + \ldots + x_ny_n].$$

- Dependência e independência linear de um conjunto de vetores.
- ▶ Diz-se que um conjunto de vetores é linearmente independente se

$$\alpha_1 \mathbf{v_1} + \alpha_2 \mathbf{v_2} + \dots + \alpha_n \mathbf{v_n} = \mathbf{0}$$

é satisfeita se e somente se $\alpha_1 = \alpha_2 = \ldots = \alpha_n = 0$.

 Do contrário, diz-se que os vetores são linearmente dependentes.



Operações com vetores em R

► Todas as operações são trivialmente definidas em R.

```
# Definindo vetores
x < -c(4.5.6)
y \leftarrow c(1,2,3)
# Soma
x + y
## [1] 5 7 9
# Subtração
х-у
## [1] 3 3 3
# Multiplicação por escalar
alpha = 10
alpha*x
## [1] 40 50 60
alpha*y
## [1] 10 20 30
# Produto interno
x%*%y
        [,1]
## [1.] 32
```

Cuidado com a lei da reciclagem!!

► O R usa a lei da reciclagem o que pode trazer resultados inesperado quando fazendo operações em vetores.

```
# Definindo vetores de tamanhos diferentes x \leftarrow c(4,5,6,5,6) y \leftarrow c(1,2,3) # Note que o 1 e 2 de y foram reciclados # Soma x + y ## [1] 5 7 9 6 8
```

Cuidado com o operador * quando trabalhando com vetores a multiplicação é feita usando o operador % * %.

```
x <- c(4,5,6)
y <- c(1,2,3)
x*y # Não é o produto escalar
## [1] 4 10 18
x***y # Produto escalar
## [,1]
## [,1]
## [1,1] 32</pre>
```



Matrizes



Matrizes

- ► Uma matriz é um arranjo retangular de números.
- ► O tamanho de uma matriz refere-se ao seu número de linhas e colunas.
- ▶ Uma matrix $(m \times n)$ tem m linhas e n colunas:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ddots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \dots & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

- ▶ Um vetor linha é uma matriz com uma linha e várias colunas.
- ▶ Um **vetor coluna** é uma matriz com uma coluna e várias linhas.



Operações com matrizes

► Multiplicação por um escalar

$$\alpha \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \alpha a_{11} & \alpha a_{12} & \dots & \alpha a_{1n} \\ \alpha a_{21} & \alpha a_{22} & \ddots & \alpha a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha a_{m1} & \dots & \alpha a_{mn} \end{bmatrix}$$



Soma e subtração de duas matrizes

- ▶ Duas matrizes podem ser somadas ou subtraídas somente se tiverem o mesmo tamanho.
- A soma ou subtração de duas matrizes $A \in B$ ambas $(m \times n)$ é uma matriz C cujos elementos são dados por:
 - 1. Soma $c_{ii} = a_{ii} + b_{ii}$.
 - 2. Subtração $c_{ij} = a_{ij} b_{ij}$.
- ► Exemplo

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 10 & 20 \\ 30 & 40 \\ 50 & 60 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 & 22 \\ 33 & 44 \\ 55 & 66 \end{bmatrix}.$$



Transposta de uma matriz

► Operação de transposição rearranja uma matriz de forma que suas linhas são transformadas em colunas e vice-versa.

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}^{\top} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 6 \end{bmatrix}.$$



Multiplicação de matrizes

- ► Multiplicação C = AB é definida apenas quando o número de colunas de A é igual ao número de linhas de B.
- ► Cada elemento $c_{ij} = \sum_{k=1}^{q} a_{ik} b_{kj}$.
- ► Exemplo,

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 8 & 3 \\ 6 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 9 & 1 & -3 \\ -5 & 2 & 4 & 6 \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} (2 \cdot 4 + -1 \cdot -5) & (2 \cdot 9 + -1 \cdot 2) & (2 \cdot 1 + -1 \cdot 4) & (2 \cdot -3 + -1 \cdot 6) \\ (8 \cdot 4 + 3 \cdot -5) & (8 \cdot 9 + 3 \cdot 2) & (8 \cdot 1 + 3 \cdot 4) & (8 \cdot -3 + 3 \cdot 6) \\ (6 \cdot 4 + 7 \cdot -5) & (6 \cdot 9 + 7 \cdot 2) & (6 \cdot 1 + 7 \cdot 4) & (6 \cdot -3 + 7 \cdot 6) \end{bmatrix}$$



Matriz quadrada: mesmo número de linhas e colunas.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}.$$

- ► Elementos *a*_{ii} são elementos **diagonais**.
- ► Elementos a_{ij} para $i \neq j$ são elementos **fora da diagonal**.
- ▶ Elementos a_{ij} para j > i são elementos acima da diagonal.
- ► Elementos a_{ij} para i > j são elementos abaixo da diagonal.



Matriz diagonal

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{bmatrix}$$

Matriz triangular superior

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ 0 & 0 & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & a_{44} \end{bmatrix}$$



Matriz triangular inferior

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{bmatrix}$$

Matriz identidade

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$



Matriz zero

Matriz simétrica é quadrada na qual $a_{ij} = a_{ji}$.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0.8 & 0.6 & 0.4 \\ 0.8 & 1 & 0.2 & 0.4 \\ 0.6 & 0.2 & 1 & 0.1 \\ 0.4 & 0.4 & 0.1 & 1 \end{bmatrix}.$$



Inversa de uma matriz

- Divisão é uma importante operação não definida para matrizes.
- A inversa serve a um propósito equivalente.
- ► Uma matriz quadrada pode ser invertida desde que exista uma matriz B de mesmo tamanho tal que AB = I.
- A matrix **B** é chamada inversa de **A** e denotada por A^{-1} .
- ► Resumindo.

$$AA^{-1} = I$$
.

- Inversas são fundamentais em Data Science.
- ► Em geral não calculamos explicitamente.
- ► São extremamentes caras computacionalmente.
- Vamos ver como obter a inversa na aula sobre métodos numéricos.



Determinante de uma matriz

- O determinante é um número e definido apenas para matrizes quadradas.
- Fundamental para o cálculo da inversa.
- Fornece informações sobre a existência ou não de soluções para um conjunto de equações simultâneas (lembre-se regressão linear).
- ▶ Dificil de obter para matrizes maiores que (3×3) .



Determinante de uma matriz

► Formalmente o determinante de uma matriz A é o número

$$\det(A) = \sum_{j} (-1)^k a_{1j_1} a_{2j_2}, \dots, a_{nj_n},$$

onde a soma é realizada para todas as n! permutações de grau n e k é o número de mudanças necessárias para que os segundos subscritos sejam colocados na ordem 1, 2, ..., n.

Exemplo,

$$\det(\mathbf{A}) = \det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} = (-1)^0 a_{11} a_{22} + (-1)^1 a_{12} a_{21}.$$



Propriedades de matrizes

- Sendo A, B e C matrizes adequadas as seguintes propriedades são válidas.
 - 1. A + B = B + A.
 - 2. (A + B) + C = A + (B + C).
 - 3. $\alpha(A + B) = \alpha A + \alpha B$.
 - 4. $(\alpha + \beta)\mathbf{A} = \alpha\mathbf{A} + \beta\mathbf{A}$.
- ▶ Sendo $\mathbf{A} \in \mathbf{B}$ quadradas em geral $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$.
 - 1. (A + B)C = AC + BC.
 - 2. A(B + C) = AB + AC.
 - 3. $\alpha(AB) = (\alpha A)B = A(\alpha B)$.
 - **4.** $(AB)^{\top} = B^{\top}A^{\top}$.
 - 5. $(A^{\top})^{\top} = A$.
 - 6. $(A^{-1})^{-1} = A$.
 - 7. $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$.



Matrizes em R

► Iniciando matrizes em R.

```
# Definindo duas matrizes
A <- matrix(c(2,5,6,-1,3,1), ncol = 2, nrow = 3)
B <- matrix(c(1,-5,3,3,2,7), ncol = 2, nrow = 3)
A

## [,1] [,2]
## [1,] 2 -1
## [2,] 5 3
## [3,] 6 1

B

## [,1] [,2]
## [1,] 1 3
## [2,] -5 2
## [2,] -5 2
## [3,] 3 7</pre>
```



Operações com matrizes em R

Operações básicas com matrizes.

```
# Tamanho
dim(A)
## [1] 3 2
# Soma
A + B
       [,1][,2]
## [1,] 3 2
## [2,] 0 5
## [3.] 9 8
# Subtração
A - B
## [,1][,2]
## [1.] 1 -4
## [2,] 10 1
## [3,] 3 -6
# Multiplicação por escalar
alpha = 10
alpha*A
       Γ.17 Γ.27
##
## [1.] 20 -10
## [2,] 50 30
## [3,] 60 10
```

Operações com matrizes em R

Multiplicação matricial

```
# A%*XB # Matrices não compatíveis
A <- matrix(c(2,8,6,-1,3,7),3,2)
B <- matrix(c(4,-5,9,2,1,4,-3,6),2,4)
A%*XB

## [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,] 13 16 -2 -12
## [2,] 17 78 20 -6
## [3,] -11 68 34 24

# B%*XA
# Error in B %*% A : non-conformable arguments
```



Determinante e Inversa

► Determinante e inversa

```
# Matriz quadrada
A <- matrix(c(1,0.8,0.8,1),2,2)
# Determinante de A
det(A)
## [1] 0.36
# Inversa de A
inv_A <- solve(A)
inv_A
## [,1] [,2]
## [1,] 2.7777778 -2.222222
## [2,] -2.22222 2.777778
A%*%inv_A # Matriz identidade
## [,1] [,2]
## [1,] 1 0
## [1,] 1 0
## [2,] 0 1</pre>
```



Aplicação: Regressão Linear múltipla



Regressão linear simples

- ► Seja y_i (i = 1, ..., n) observações de alguma variável de interesse.
- ▶ Seja x_i uma outra variável que queremos relacionar com y_i através de um reta, i.e.

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_i.$$

▶ Problema: Encontrar β_0 e β_1 tal que

$$SQ = f(\beta_0, \beta_1) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (\beta_0 + \beta_1 x_i))^2,$$

seja a menor possível.

► Processo extremamente tedioso.



Regressão linear múltipla

- ► Suponha que ao invés de uma única x_i temos um vetor de dimensão *p* possivelmente grande.
- ► O modelo fica dado por

$$y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots \beta_p x_{ip}.$$

▶ Como temos i = 1, ..., n observações, temos

$$y_{1} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{11} + \beta_{2}x_{12} + \dots \beta_{p}x_{1p}$$

$$y_{2} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{21} + \beta_{2}x_{22} + \dots \beta_{p}x_{2p}$$

$$\vdots$$

$$y_{n} = \beta_{0} + \beta_{1}x_{n1} + \beta_{2}x_{n2} + \dots \beta_{p}x_{np}$$



Regressão linear múltipla

► Matricialmente, temos

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}_{n \times 1} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & \dots & x_{p1} \\ 1 & x_{12} & \dots & x_{p1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_{1n} & \dots & x_{pn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \vdots \\ \beta_p \\ p \times 1 \end{bmatrix}$$

Usando uma notação mais compacta,

$$\underset{n\times 1}{\mathbf{y}}=\underset{n\times p_{p\times 1}}{\mathbf{X}}\boldsymbol{\beta}.$$



Regressão linear múltipla

▶ Objetivo: Encontrar o vetor $\hat{\beta}$, tal que

$$SQ(\beta) = (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^{\top}(\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta),$$

seja a menor possível.

▶ Derivando em β , temos

$$\begin{split} \frac{\partial SQ(\beta)}{\partial \beta} &= \frac{\partial}{\partial \beta} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^{\top} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) \\ &= \frac{\partial}{\partial \beta} \left((\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^{\top} \right) (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) + (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^{\top} \frac{\partial}{\partial \beta} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) \\ &= -\mathbf{X}^{\top} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta) + (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta)^{\top} (-\mathbf{X}) \\ &= -2\mathbf{X}^{\top} (\mathbf{y} - \mathbf{X}\beta). \end{split}$$

Resolvendo o sistema,

$$\begin{array}{rcl} \boldsymbol{X}^{\top}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\hat{\beta}}) & = & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\hat{\beta}} & = & \boldsymbol{0} \\ & \boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\hat{\beta}} & = & \boldsymbol{X}^{\top}\boldsymbol{y} \\ & & & & & & & & & & & & \\ \boldsymbol{\hat{\beta}} & = & & & & & & & & & \\ \end{array}$$



Implementação em R

Matriz de delineamento.

```
# Número de covariáveis
p = 100
# Matriz para armazenar as covariáveis
X <- matrix(NA, ncol = 100, nrow = 1000)
for(i in 1:1000) {X[i,] <- rbinom(100, size = 1, p = 0.1)}
X <- model.matrix(~ X) # Incluir a coluna de 1's (Intercepto)</pre>
```

Vetor de parâmetros e valores simulados para y.

```
beta <- c(10, seq(-1,1, 1 = 100))

mu = X**beta

y <- rnorm(1000, mean = mu, sd = 1)
```

▶ Obtendo $\hat{\beta}$.

```
# Abordagem ingėnua
hat_beta = solve(t(X)%*%X)%*%t(X)%*%y
# Nunca use o solve() diretamente
hat_beta1 <- solve(t(X)%*%X, t(X)%*%y)
# Tempo computacional
system.time(replicate(100, solve(t(X)%*%X)%*%t(X)%*%y))

## user system elapsed
## 0.723 0.610 0.355

System.time(replicate(100, hat_beta1 <- solve(t(X)%*%X, t(X)%*%y)))

## user system elapsed
## 0.436 0.707 0.333
```

Matrizes esparsas



Matrizes esparsas

- Matrizes v\u00e3o aparecer em todos os tipos de aplica\u00e7\u00e3o de Data Science.
- ► Modelos estatísticos, *machine learning*, análise de texto, análise de agrupamento, etc.
- Muitas vezes a matriz tem uma grande quantidade de zeros.
- Lembre-se no exemplo de regressão linear múltiplas nossas covariáveis eram binárias.
- Quando uma matriz tem uma quantidade considerável de 0's, dizemos que ela é esparsa, caso contrário dizemos que a matriz é densa.
- ► Saber que uma matriz é esparsa é útil em dois sentidos:
 - 1. Planejar formas de armazenar a matriz em memória.
 - 2. Economizar cálculos em algoritmos numéricos (multiplicação, inversa, determinante, decomposições, etc).



Matrizes esparsas

- ► Todas as propriedades que vimos para matrizes em geral valem para matrizes esparsas.
- ► R tem um conjunto de métodos altamente eficiente para lidar com matrizes esparsas.
- ▶ Implementação através do pacote Matrix.
- Comparando quantidade de memória utilizada.

```
library('Matrix')
m1 <- matrix(0, nrow = 1000, ncol = 1000)
m2 <- Matrix(0, nrow = 1000, ncol = 1000, sparse = TRUE)
object.size(m1)
## 8000200 bytes
object.size(m2)
## 5632 bytes</pre>
```



Implementação usando matrizes esparsas.

```
X <- Matrix(NA, ncol = 100, nrow = 1000)
for(i in 1:1000) {X[i,] <- rbinom(100, size = 1, p = 0.1)}
X <- Matrix(X, sparse = TRUE)
system.time(replicate(100, solve(t(X)%*XX, t(X)%*Xy)))
## user system elapsed
## 0.273 0.005 0.278</pre>
```

► O ganho em tempo computacional e em armazenamento será tanto maior quanto for a quantidade de zeros na matriz.



► Tamanho dos objetos.

```
library(Matrix)
n <= 10000; p <= 500
x <= matrix(rbinom(n*p, 1, 0.01), nrow=n, ncol=p)
X <= Matrix(x)
object.size(x)
## 20000200 bytes
object.size(X)
## 604904 bytes</pre>
```



Diferentes formas de fazer as operações matriciais.



► Implementação usando o glmnet.

```
library(glmnet)
system.time(b <- coef(lm(y^x)))
## user system elapsed
## 3.534 5.286 3.445
system.time(glmnet(x, y, nlambda=1, lambda=0, standardize=FALSE))
## user system elapsed
## 0.091 0.002 0.092
system.time(g <- glmnet(X, y, nlambda=1, lambda=0, standardize=FALSE))
## user system elapsed
## 0.134 0.001 0.136</pre>
```

