

Дополнительная лекция



Вектора и операции над ними. Градиентный спуск. Понижение размерности. Статистические тесты.

Даниил Корбут

Специалист по Анализу Данных



Даниил Корбут
DL Researcher
Insilico Medicine, Inc

Окончил бакалавриат ФИВТ
МФТИ (Анализ данных) в 2018г
Учусь на 2-м курсе
магистратуры ФИВТ МФТИ
Работал в Statsbot и Яндекс.
Алиса.
Сейчас в Insilico Medicine, Inc,
занимаюсь генерацией
активных молекул и
исследованиями старения с
помощью DL.

Векторы

Вектор — упорядоченный конечный список чисел.
Вектора обычно записываются как вертикальный список,
например:

$$\begin{bmatrix} -1.1 \\ 0.0 \\ 3.6 \\ -7.2 \end{bmatrix} \quad \begin{pmatrix} -1.1 \\ 0.0 \\ 3.6 \\ -7.2 \end{pmatrix}$$

Вектор может быть записан также в следующем виде:

$$(-1.1, 0.0, 3.6, -7.2)$$

Скалярное произведение векторов

Скалярное произведение векторов (dot product по англ.) - это скаляр (число), полученное в результате перемножения длин векторов на косинус угла между ними.

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}| \cdot |\vec{b}| \cdot \cos(\alpha)$$

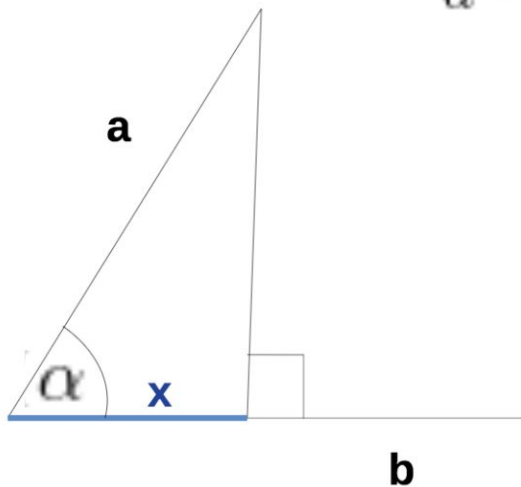
Если известны координаты векторов, то скалярное произведение можно посчитать по формуле:

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = x_a \cdot x_b + y_a \cdot y_b$$

где $\vec{a}(x_a; y_a)$ и $\vec{b}(x_b; y_b)$ вектора в двумерном пространстве

Проекция одного вектора на другой

Длина вектора x , полученного в результате проекции вектора a на вектор b , равна делению скалярного произведения вектора \mathbf{a} на вектор \mathbf{b} на длину b .



$$\vec{a} \cdot \vec{b} = |\vec{a}| \cdot |\vec{b}| \cdot \cos(\alpha)$$

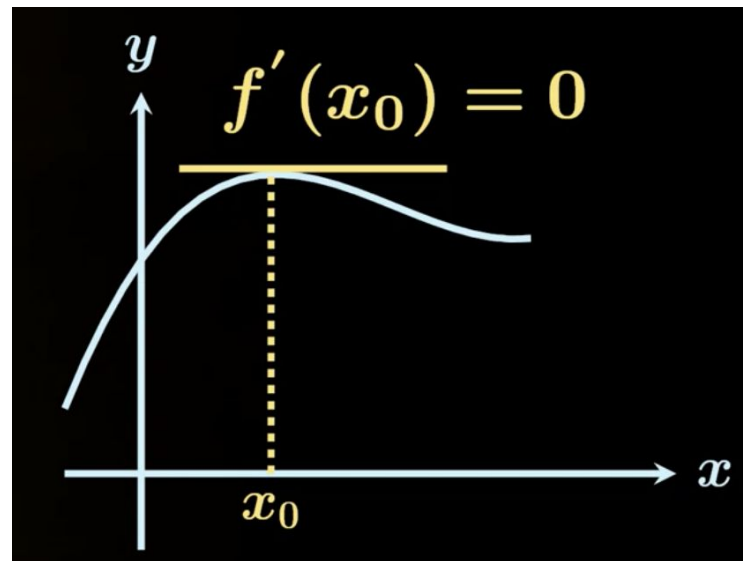
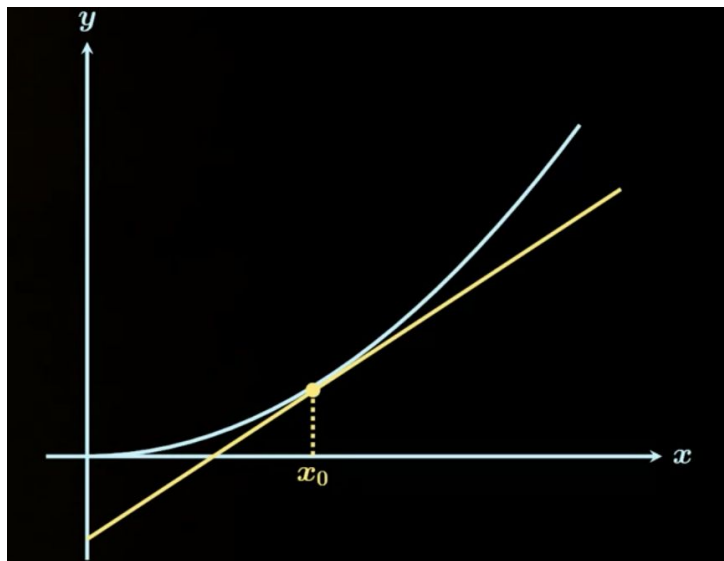
$$\cos(\alpha) = \frac{|x|}{|a|}$$

$$|x| = \cos(\alpha) \cdot |a|$$

$$\cos(\alpha) \cdot |a| = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{|b|}$$

$$|x| = \frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{|b|}$$

Экстремум функции и производная



В точках локальных экстремумов производная (если она определена (!), пример дальше) обязана равняться нулю.
Это **необходимое** условие.

Выпуклость функции и вторая производная

Помните **необходимое** условие локального экстремума?



Наложив некоторые условия на вторую производную, можно сделать их **достаточными!**

Достаточное условие экстремума Пусть выполнено необходимое условие экстремума, то есть в некоторой точке x_0 значение $f'(x_0) = 0$. Если в таком случае

1. $f''(x) > 0$ — функция будет строго выпукла и реализуется строгий минимум.
2. $f''(x) < 0$ — функция будет строго вогнута и реализуется строгий максимум.

Градиент и линии уровня функции

Если $f(x_1, \dots, x_n)$ — функция n переменных x_1, \dots, x_n , то n -мерный вектор из частных производных:

$$\text{grad } f = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)$$



называется **градиентом функции**.



Линией уровня функции называется множество точек, в которых функция принимает одно и то же фиксированное значение. Оказывается, что **градиент перпендикулярен линии уровня**.

Градиент в задачах оптимизации

Задачей оптимизации называется задача по нахождению экстремума функции, например минимума:

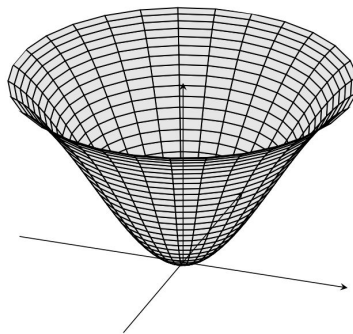
$$f(x_1, \dots, x_n) \rightarrow \min$$

Такая задача часто встречается в приложениях, например при выборе оптимальных параметров рекламной компании, а также в задачах классификации.

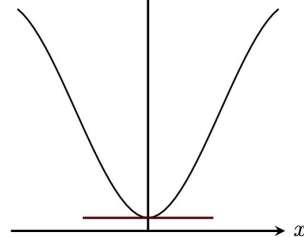
Вспомним необходимые условия экстремума из прошлой лекции!

Градиент в задачах оптимизации

Но не всегда задачу можно решать аналитически. В таком случае используется численная оптимизация. Наиболее простым в реализации из всех методов численной оптимизации является метод градиентного спуска.



$$\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{(0,0)} = 0$$



$$\left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{(0,0)} = 0$$

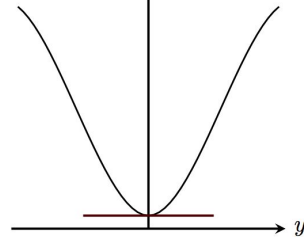


Рис. 2: Функция двух переменных достигает минимума в начале координат.

Градиентный спуск

Это итерационный метод. Решение задачи начинается с выбора начального приближения $\vec{x}^{[0]}$

После вычисляется приблизительное значение \vec{x}^1

Затем \vec{x}^2

и так далее...

! $\vec{x}^{[j+1]} = \vec{x}^{[j]} - \gamma^{[j]} \nabla F(\vec{x}^{[j]}),$ где $\gamma^{[j]}$ — шаг градиентного спуска.

Идея: идти в направлении наискорейшего спуска, а это направление задаётся антиградиентом $-\nabla F$.

Градиентный спуск

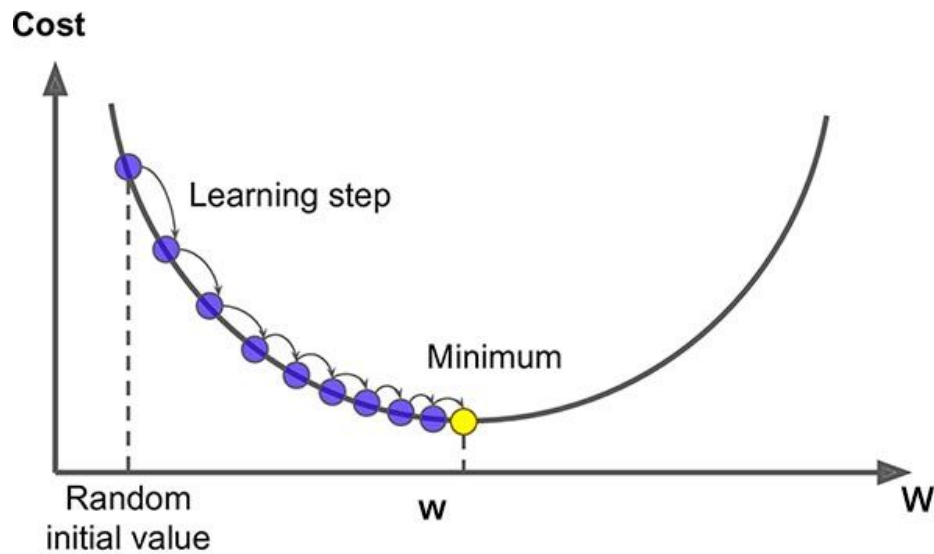
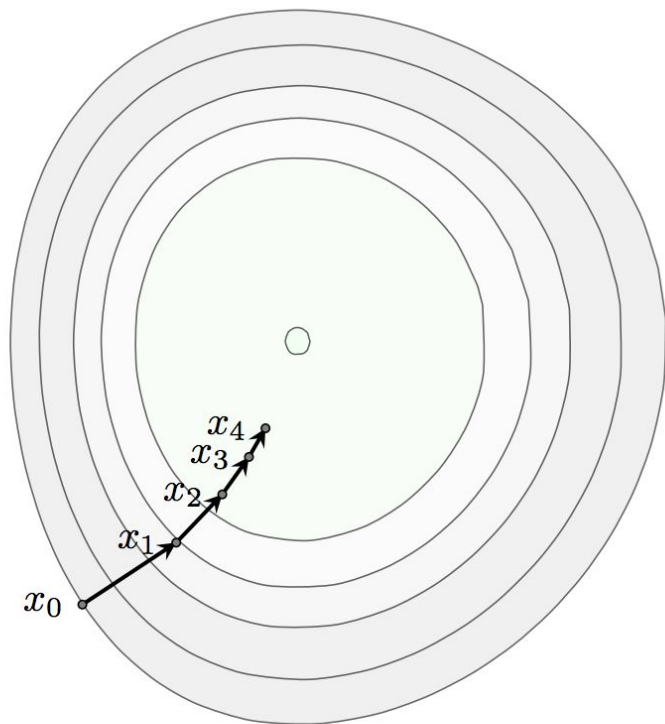


Рис. 3: Градиентный спуск

Примеры основной и альтернативной гипотез

Основная гипотеза:

$$H_0 : a = 368$$



Средний вес выпускаемых коробок равен 368 г,
конвейер работает нормально

Альтернативная гипотеза:

$$H_1 : a \neq 368$$

Средний вес выпускаемых коробок отличен от 368 г,
конвейер требует наладки

Статистические гипотезы о данных

	Disease present	Disease absent
Positive	a True positive	b False positive 
Negative	c False negative 	d True negative

Ошибка 1 рода:
Вероятность отвергнуть гипотезу,
но в действительности она верна

Критически значимый уровень
alpha = 0.05

Ошибка 2 рода:
Вероятность принять гипотезу,
но в действительности она неверна
beta — вероятность ошибки.
Мощность исследования = 1-beta.

https://www.youtube.com/watch?v=4eyEp_NTxAU

<https://www.nejm.org/doi/full/10.1056/NEJM199908193410823>

Статистическая значимость

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ЗНАЧИМОСТЬ (ЗНАЧЕНИЕ P)
– РАСЧЕТНАЯ ВЕРОЯТНОСТЬ ОШИБКИ
ПЕРВОГО РОДА, КОТОРАЯ РАССЧИТЫВАЕТСЯ С
ПОМОЩЬЮ РАЗЛИЧНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ
КРИТЕРИЕВ



$$P < 0,05$$

Спасибо за внимание!