09.03.2017

Вычислительные модели с использованием научных библиотек Python

Линейная алгебра

Базовые типы, dense matrix

#1

```
>>> import numpy as np
>>> from scipy import linalg
>>> A = np.array([[1,2],[3,4]])
>>> A array([[1, 2], [3, 4]])
>>> linalg.inv(A)
array([[-2. , 1. ], [ 1.5, -0.5]])
>>> b = np.array([[5,6]]) #2D array
>>> b
array([[5, 6]])
>>> b.T
array([[5], [6]])
>>> A*b #not matrix multiplication!
array([[ 5, 12], [15, 24]])
>>> A.dot(b.T) #matrix multiplication
array([[17], [39]])
```

#2

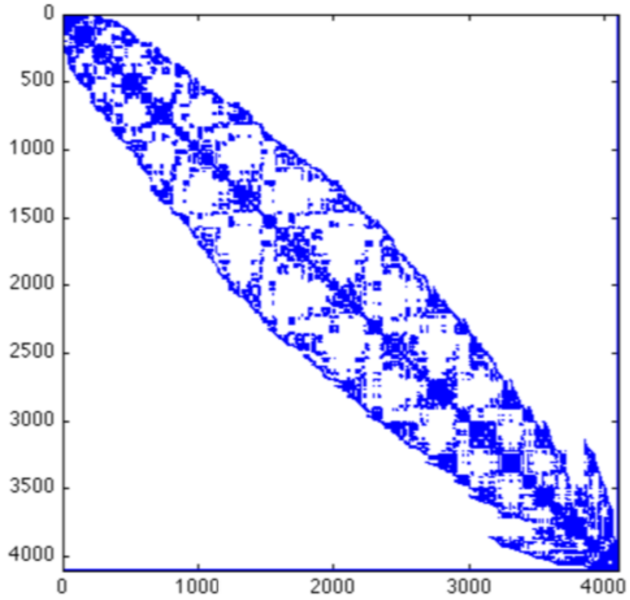
```
>>> import numpy as np
>>> A = np.mat('[1 2;3 4]')
>>> A
matrix([[1, 2], [3, 4]])
>>> A.I
matrix([[-2. , 1. ], [ 1.5, -0.5]])
>>> b = np.mat('[5 6]')
>>> b
matrix([[5, 6]])
>>> b.T
matrix([[5], [6]])
>>> A*b.T
matrix([[17], [39]])
```

Базовые типы, sparse matrix

Способы хранения

1. csc_matrix: Compressed Sparse Column format
2. csr_matrix: Compressed Sparse Row format
3. bsr_matrix: Block Sparse Row format
4. lil_matrix: List of Lists format
5. dok_matrix: Dictionary of Keys format
6. coo_matrix: COOrdinate format (aka IJV, triplet format)
7. dia_matrix: DIAgonal format

```
>>> import numpy as np
>>> import scipy.sparse as sps
```



СЛАУ

Постановка задачи

$$\mathbf{Au} = \mathbf{f}$$

Число обусловленности матрицы А

$$\mu(\mathbf{A}) = \left\|\mathbf{A}^{-1}\right\| \left\|\mathbf{A}\right\|$$

$\mu \approx 1 \div 10$ -хорошо обусловленная СЛАУ

$\mu >> 10^2 \div 10^3$ -плохо обусловленная СЛАУ

СЛАУ, точные методы

LU-разложение

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$$

$$\mathbf{Lv} = \mathbf{f}, \mathbf{Uu} = \mathbf{v}$$

```
>>> import numpy as np
>>> from scipy import linalg
>>> A = np.array([[1, 2], [3, 4]])
>>> A = np.array([[1, 2], [3, 4]])
>>> b = np.array([[5], [6]])
 >>> b
array([[5], [6]])
 >>> linalg.inv(A).dot(b) # slow
array([[-4. ], [ 4.5]])
>>> np.linalg.solve(A, b) # fast
array([[-4. ], [ 4.5]])
```

```
>>> import numpy as np
>>> from scipy.sparse import linalg
>>> mtx = sparse.spdiags([[1, 2, 3, 4, 5], [6, 5, 8, 9,
10]], [0, 1], 5, 5)
>>> mtx.todense()
matrix([[ 1, 5, 0, 0, 0],
[ 0, 2, 8, 0, 0],
[ 0, 0, 3, 9, 0],
[ 0, 0, 0, 4, 10],
[ 0, 0, 0, 0, 5]])
>>> rhs = np.array([1, 2, 3, 4, 5], dtype=np.float32)

>>>x= dsolve.spsolve(mtx1, rhs, use_umfpack=False)
```

СЛАУ, точные методы

Метод Холецкого

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{12} & l_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{1n} & l_{2n} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{L}\mathbf{v} = \mathbf{f},\ \mathbf{L}^{\mathrm{T}}\mathbf{u} = \mathbf{v}.$$

Метод QR

$\mathbf{A}=\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}$,

Q – ортогональная

R – верхняя треугольная

$\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R}\cdot\mathrm{x}=\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{b}$,

$\mathbf{R}\cdot\mathbf{x}=\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{b}$.

СЛАУ, итерационные методы

Список методов

- BIConjugate Gradient
- BIConjugate Gradient STABilized
- Conjugate Gradient
- Conjugate Gradient Squared
- Generalized Minimal RESidual(GMRES)
- LGMRES
- MINimum RESidual
- Quasi-Minimal Residual

```
>>> import numpy as np
>>> import scipy.sparse.linalg as linalg
```

СЛАУ, предобусловливание

Общая идея

$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$,

M должна быть по возможности близка к матрице **A**;
M должна быть легко вычислима;
M должна быть легко обратима.

ILU разложение

$\mathbf{M}=\mathbf{L}\mathbf{U}+\mathbf{R}\approx \mathbf{L}\mathbf{U}$

Функция `spilu()`

Понижение размерности данных

Оценка рейтинга фильмов пользователями

userId	movieId	rating	timestamp
1	1	5	847117005
1	2	3	847642142
1	10	3	847641896
1	32	4	847642008
1	34	4	847641956
1	47	3	847641956
1	50	4	847642073
1	62	4	847642105
1	150	4	847116751
1	153	3	847116787
1	160	3	847642008
1	161	4	847641896
1	165	4	847116787
1	185	3	847641919

movieId	title	genres
1	Toy Story (1995)	Adventure|Animation|Children|
2	Jumanji (1995)	Adventure|Children|Fantasy
3	Grumpier Old Men (1995)	Comedy|Romance
4	Waiting to Exhale (1995)	Comedy|Drama|Romance
5	Father of the Bride Part II (1995)	Comedy
6	Heat (1995)	Action|Crime|Thriller
7	Sabrina (1995)	Comedy|Romance
8	Tom and Huck (1995)	Adventure|Children
9	Sudden Death (1995)	Action
10	GoldenEye (1995)	Action|Adventure|Thriller
11	American President, The (1995)	Comedy|Drama|Romance
12	Dracula: Dead and Loving It (1995)	Comedy|Horror
13	Balto (1995)	Adventure|Animation|Children
14	Nixon (1995)	Drama

Movies (features) →

Users (instances) ↓

	Movie 1	Movie 2	Movie 3	Movie 4
User 1	1	3	2	1
User 2	2	--	--	5
User 3	5	1	5	3
User 4	4	--	1	4

8913 – фильмов

718 - пользователей

Понижение размерности данных

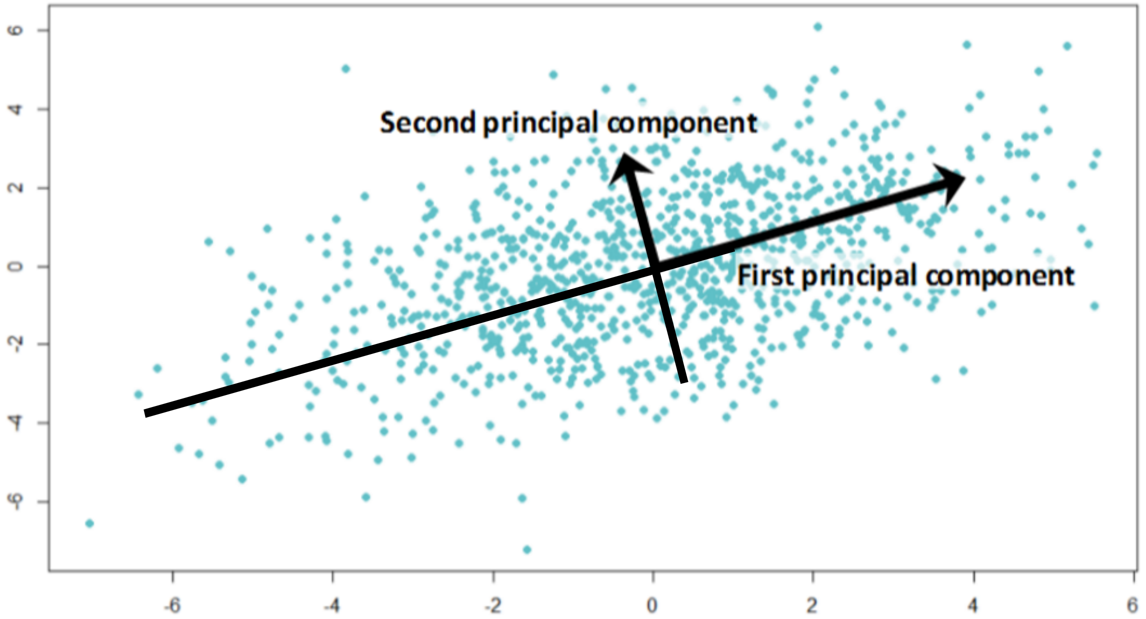
Метод главных компонент(PCA)

- Снижение количества признаков
- Новые признаки – линейная комбинация исходных

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} \times \mathbf{W}$$

- Поиск проекций с наибольшей дисперсией

$$S_m^2\left[(X, a_k)\right] = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(a_k, x_i)^2$$



Понижение размерности данных

Алгоритм

- Нормировать данные
- Построить матрицу ковариации

$$\Sigma = \frac{1}{n-1}\left((\mathbf{X}-\bar{\mathbf{x}})^T(\mathbf{X}-\bar{\mathbf{x}})\right) \qquad \bar{\mathbf{x}} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} x_i.$$

$$\sigma_{jk} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_{ij}-\bar{x}_j)(x_{ik}-\bar{x}_k).$$

- Найти собственные значения и вектора матрицы ковариации
- Отсортировать собственные значения в порядке убывания
- Выбрать необходимое количество значений d, соответствующих заданной доли дисперсии

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{d}\lambda_i}{\sum_{i=1}^{D}\lambda_i}$$