Векторы и матрицы

Вектор и операции над ним. Матрицы и матричные операции. Типы матриц. Собственные векторы и собственные значения. Приближение матрицей меньшего ранга. Сингулярное разложение и низкоранговое приближение.

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.

НЕТОЛОГИЯ

Векторы

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

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

Вектор может быть записан также в следующем виде:

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

Скаляр

Скаляр — число.

Число может являться целым натуральным и записывается как:

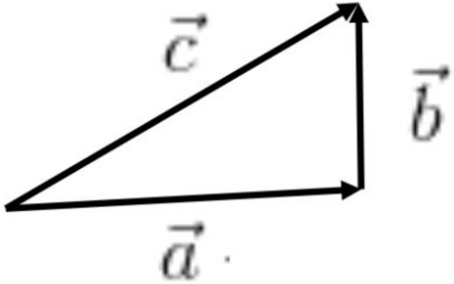
$$s \in \mathbb{N}$$

Число может быть десятичным и записываться как:

$$s \in \mathbb{R}$$

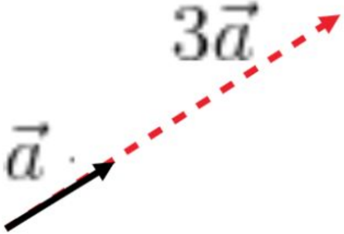
Операции с векторами

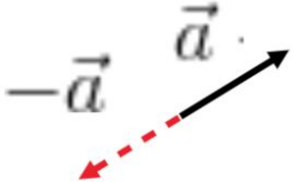
Сложение векторов:



$$\vec{a} + \vec{b} = \vec{c}$$

Умножение вектора на число:





https://github.com/yustinaivanova/math_netology_2/blob/master/math_1.pdf

Длина вектора

Длина вектора может быть подсчитана по формуле евклидова расстояния:

$$|x| = \sqrt{\sum_i \left(|x_i|^2\right)}$$

где *p* — размерность вектора.

Для двумерного вектора данная формула становится следующего вида и называется L^2 нормой:

$$|a| = \sqrt{(x^2 + y^2)}$$

где а — вектор с координатами (x,y).

Скалярное произведение векторов

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

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

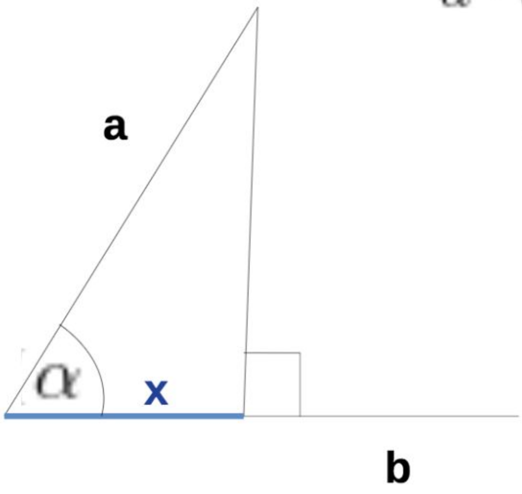
Если известны координаты векторов, то скалярное произведение можно посчитать по формуле:

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

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 **a** на вектор **b** на длину b.



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

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

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

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

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

Матрица

$$M = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & A_{1,3} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & A_{2,3} \end{bmatrix}$$

Матрица — математический объект, записываемый в виде прямоугольной таблицы.

Диагональная матрица — квадратная матрица, все элементы которой, кроме диагональных, равны 0.

$$M = \begin{bmatrix} A_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & A_{2,2} & 0 \\ 0 & 0 & A_{3,3} \end{bmatrix}$$

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Единичная матрица — квадратная матрица, все диагональные элементы которой равны 1, остальные элементы равны 0.

Транспонирование матрицы

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

Транспонирование матрицы — это замена строк на столбцы.

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} \\ A_{2,1} & A_{2,2} \\ A_{3,1} & A_{3,2} \end{bmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{A}^{\top} = \begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{2,1} & A_{3,1} \\ A_{1,2} & A_{2,2} & A_{3,2} \end{bmatrix}$$

Транспонирование матрицы можно рассматривать как отображение матрицы относительно главной диагонали.

https://www.deeplearningbook.org/contents/linear_algebra.html

Сложение и умножение матрицы на скаляр

Сложение.

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 3 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} + 1 = \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 3 & 4 \\ 3 & 4 \end{bmatrix}$$

Умножение на скаляр.

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 2 & 3 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \cdot 5 = \begin{bmatrix} 10 & 15 \\ 10 & 15 \\ 10 & 15 \end{bmatrix}$$

https://github.com/yustinaivanova/math_netology_2/blob/master/math_1.pdf

Обратная матрица

Обратная матрица к данной — это матрица при перемножении которой с текущей матрицей получается единичная матрица.

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$$

Например:

$$B = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 7 \\ 6 & 3 & 4 \\ 5 & -2 & -3 \end{bmatrix} \quad B^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -38 & 41 & -34 \\ 27 & -29 & 24 \end{bmatrix}$$

$$B \cdot B^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 7 \\ 6 & 3 & 4 \\ 5 & -2 & -3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -38 & 41 & -34 \\ 27 & -29 & 24 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}$$

Перемножение матриц

Даны 2 матрицы: A и B. Умножение матрицы A на B можно выполнить, если количество столбцов матрицы A равно количеству строк матрицы B.

$$A \cdot B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 3 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 3 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\cdot4+2\cdot3+2\cdot1 & 1\cdot2+2\cdot1+2\cdot5 \\ 3\cdot4+1\cdot3+1\cdot1 & 3\cdot2+1\cdot1+1\cdot5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 & 14 \\ 16 & 12 \end{pmatrix}$$

$$B \cdot A = \begin{pmatrix} 4 & 2 \\ 3 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 3 & 1 & 1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 4\cdot1+2\cdot3 & 4\cdot2+2\cdot1 & 4\cdot2+2\cdot1 \\ 3\cdot1+1\cdot3 & 3\cdot2+1\cdot1 & 3\cdot2+1\cdot1 \\ 1\cdot1+5\cdot3 & 1\cdot2+5\cdot1 & 1\cdot2+5\cdot1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & 10 & 10 \\ 6 & 7 & 7 \\ 16 & 7 & 7 \end{pmatrix}$$

https://www.math10.com/ru/vysshaya-matematika/matrix/umnozhenie-matric.html

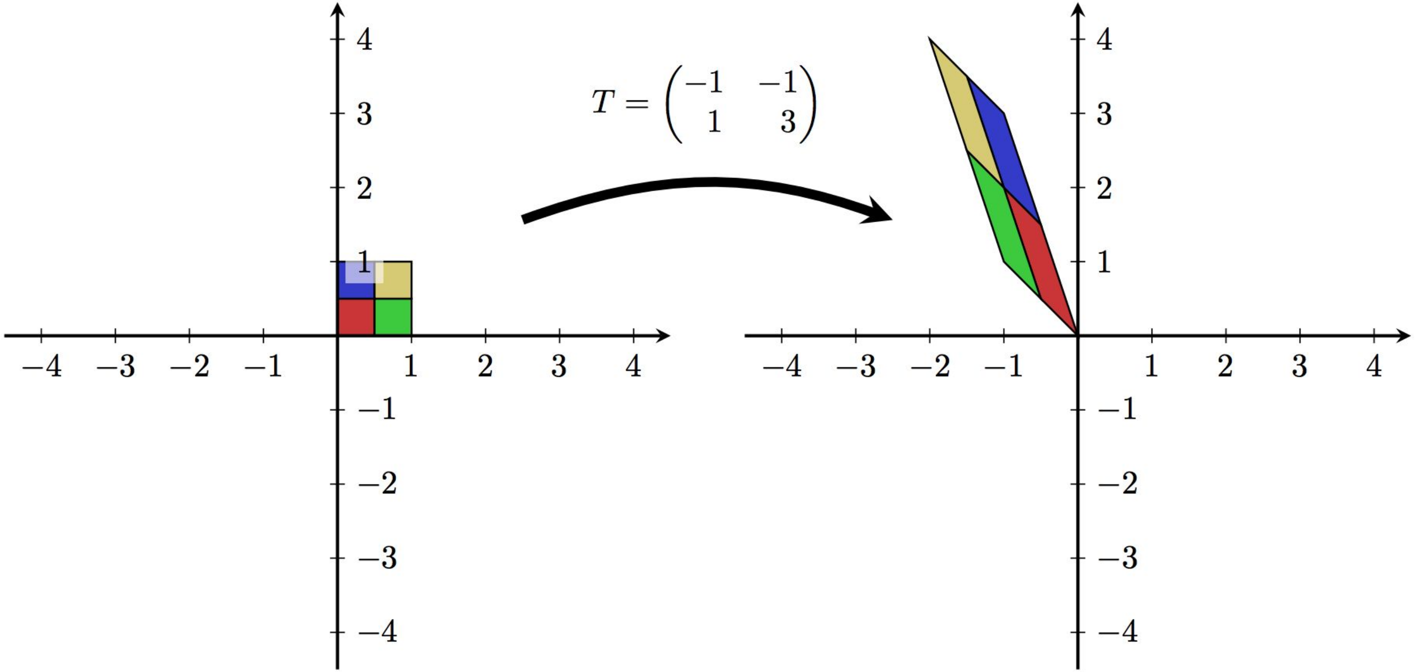
Типы матриц

$$A_{m\times n} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

1. m=n => квадратная, иначе прямоугольная
2. m = 1 => матрица-строка
3. n=1 => матрица-столбец
4. нулевая матрица, если все элементы = 0
5. диагональная (единичная)
6. треугольная(нижнетреугольная, верхнетреугольная)
7. ортогональная

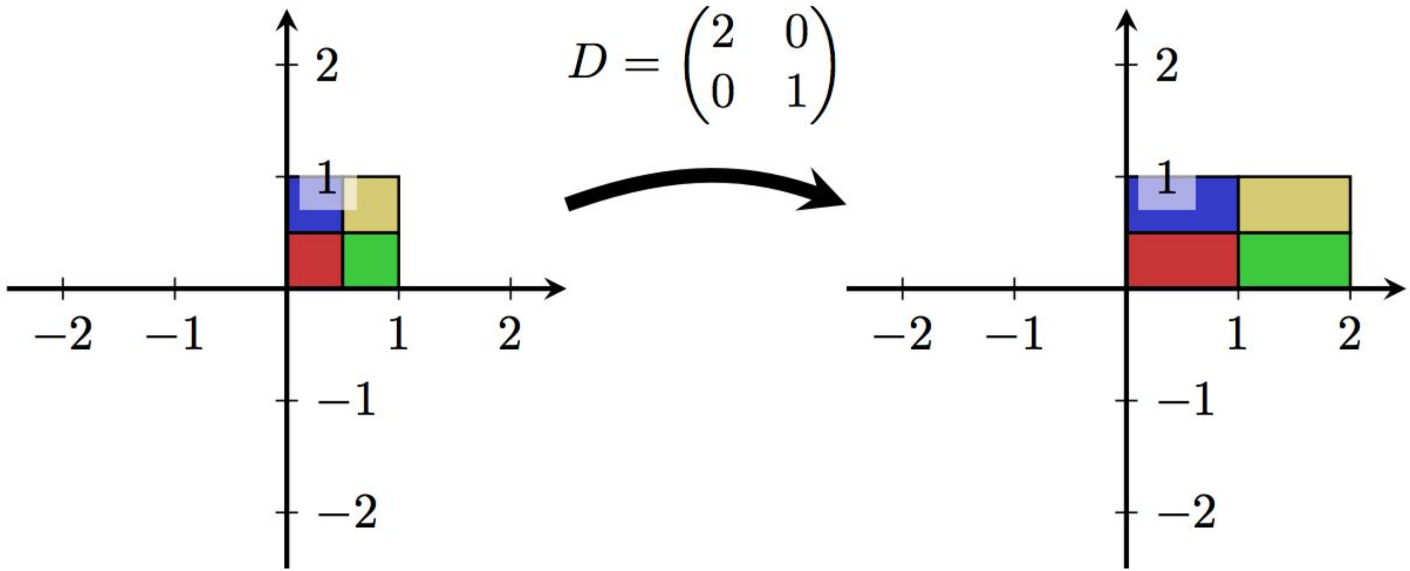
$$AA^T = A^T A = E$$

Типы матриц (преобразование пространства)



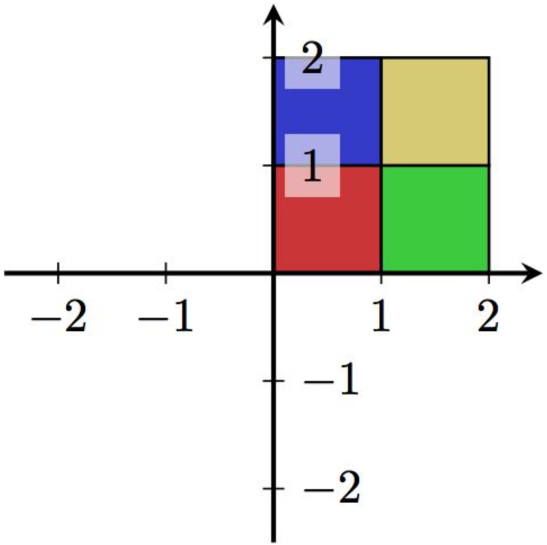
https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Типы матриц (преобразование пространства)

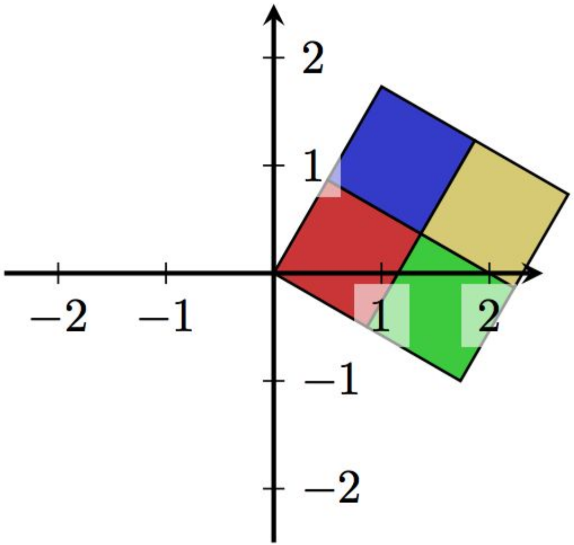


https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Типы матриц (преобразование пространства)

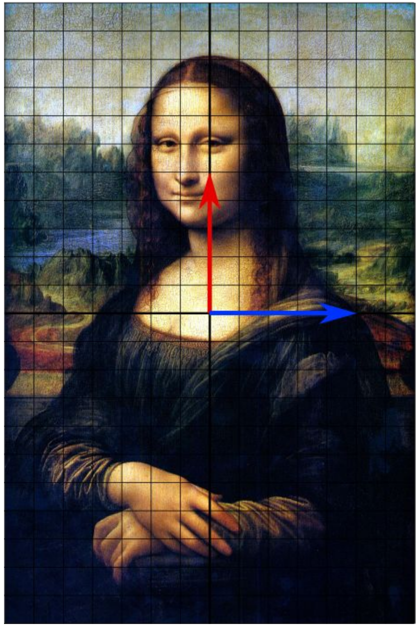


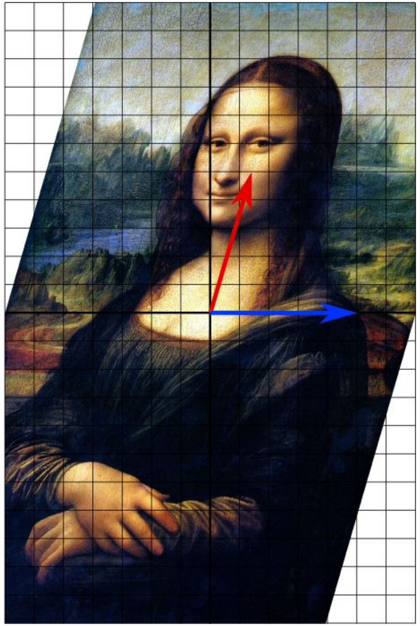
$$A = \begin{pmatrix} \cos\frac{\pi}{6} & -\sin\frac{\pi}{6} \\ \sin\frac{\pi}{6} & \cos\frac{\pi}{6} \end{pmatrix}$$



https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Собственные векторы и собственные значения





https://ru.wikipedia.org

Собственный вектор преобразования А

$$AX = \lambda X$$

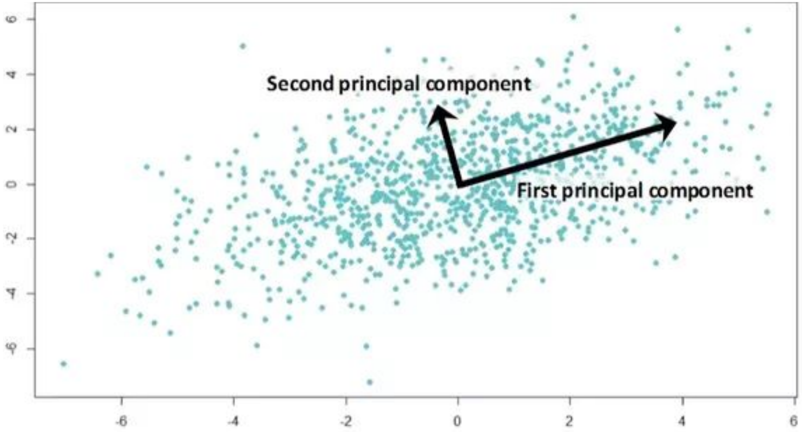
X - собственный вектор (ненулевой!)
lambda - собственное значение

!

У матрицы **n x n** не более **n** собственных значений

Собственные векторы и собственные значения: применение

1. Собственные векторы - направления, в которых матрица лишь растягивает или сжимает векторы, но не поворачивает
2. Показывают направления наибольшего изменения
3. Возникают при уменьшении размера матрицы



https://medium.com/analytics-vidhya/principal-component-analysis-pca-with-code-on-mnist-dataset-da7de0d07c22

Собственные вектора и собственные значения (поиск)

$A - \lambda E$ — характеристическая матрица матрицы **A**

$|A - \lambda E|$ — характеристический многочлен матрицы **A**

$|A - \lambda E| = 0$ — характеристическое уравнение матрицы **A**

! **Теорема**. Собственными числами матрицы A являются корни характеристического уравнения матрицы A и только они.

Собственные вектора и собственные значения (пример)

$$A=\begin{pmatrix}-1 & -6\\ 2 & 6\end{pmatrix} \rightarrow \begin{vmatrix}-1-\lambda & -6\\ 2 & 6-\lambda\end{vmatrix}=0$$

$$\lambda^2-5\lambda+6=0$$

$$\lambda_1=\frac{5-1}{2}=2$$

$$\lambda_2=\frac{5+1}{2}=3$$

$$\begin{cases}-4x-6y=0\\ 2x+3y=0\end{cases} \quad x=-\frac{3}{2}y$$

$$\begin{cases}-3x-6y=0\\ 2x+4y=0\end{cases} \Rightarrow x=-2y$$

Ответ: собственные числа: $\lambda_1=2,\ \lambda_2=3$, собственные векторы: $\bar{u}_1=\begin{pmatrix}2\\-1\end{pmatrix}, \bar{u}_2=\begin{pmatrix}3\\-2\end{pmatrix}$

http://mathprofi.ru/sobstvennye_znachenija_i_sobstvennye_vektory.html

Матричные разложения (спектральное разложение)

Разложение матрицы - представление в виде произведения некоторых других, обладающих интересными свойствами.

Пример: спектральное разложение X

$$X = S^T \cdot D \cdot S$$

!

X - **симметричная**, S - **ортогональная**, D - **диагональная** из собственных значений X.

Часто встречаются квадратичные формы

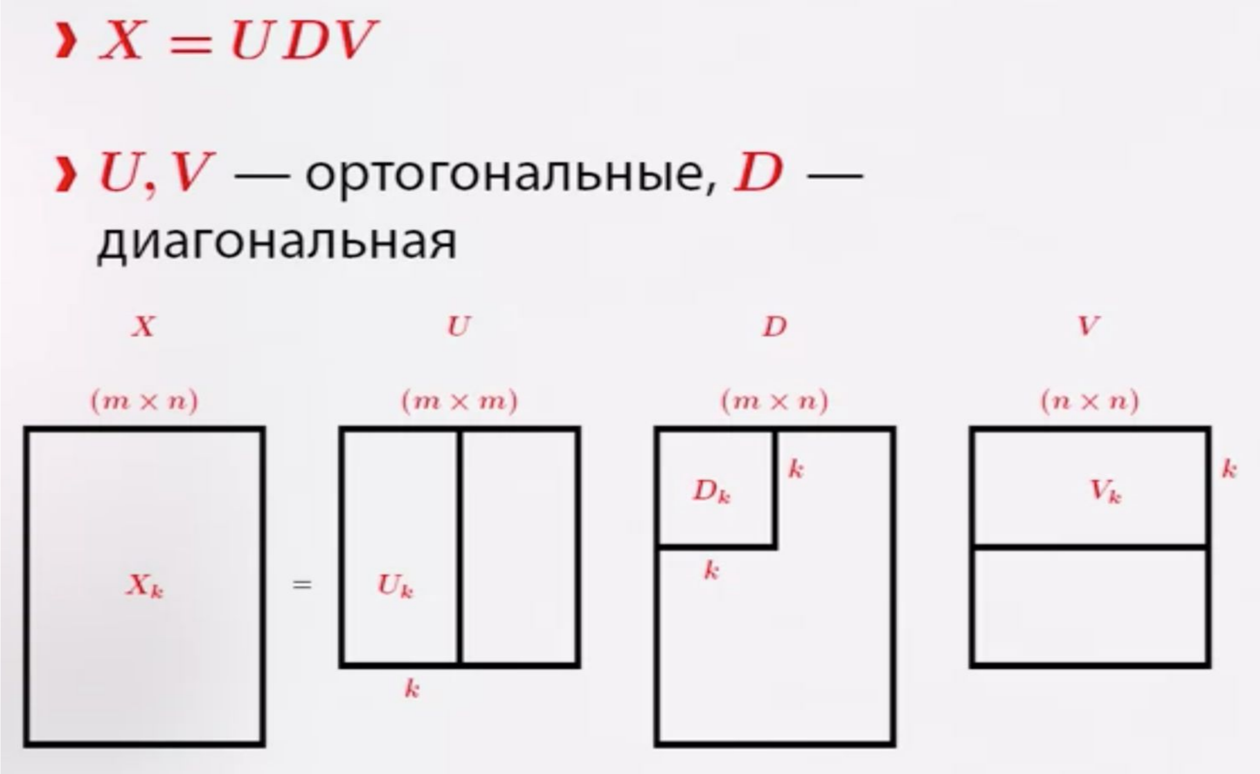
$$f(y) = y^T X y$$

с помощью спектрального разложения приводим к более простому виду:

$$f(y) = y^T \cdot S^T \cdot D \cdot S \cdot y = (S \cdot y)^T \cdot D \cdot (S \cdot y) = z^T \cdot D \cdot z = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i z_i^2,$$

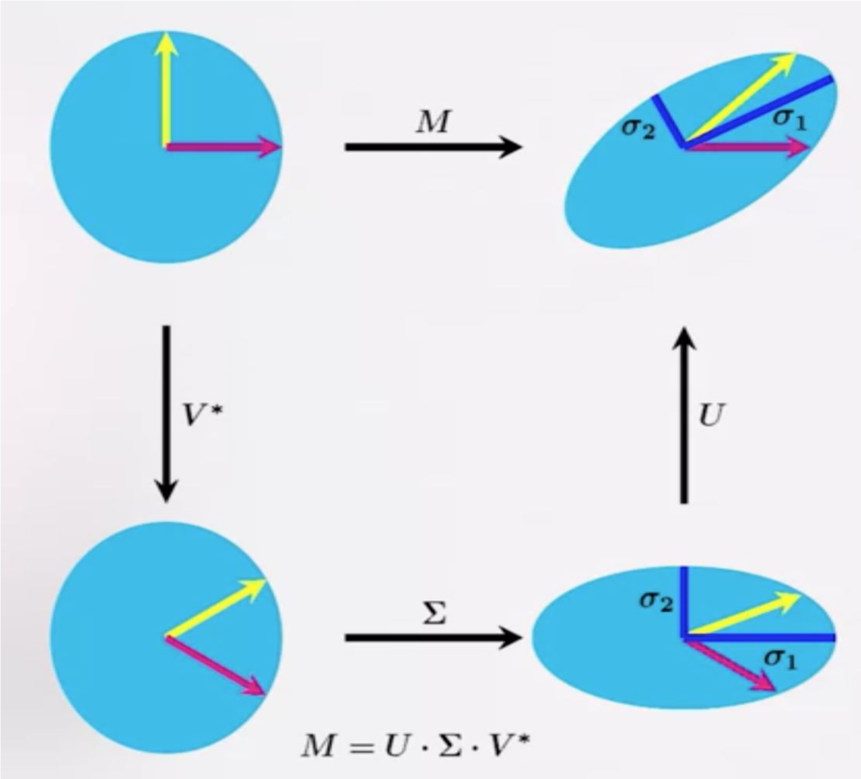
Матричные разложения (сингулярное разложение)

Но это была симметричная матрица, что в случае произвольной?



https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Матричные разложения (сингулярное разложение)



Сингулярное разложение представляет линейное преобразование в виде композиции: вращения, растяжения по осям, вращения.

https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Что такое ранг матрицы?

Матричные разложения (приближение матрицей меньшего ранга)

- Матрица задаёт отображение, ранг в какой-то степени мера “сложности” отображения
- Ранг - максимальное количество линейно независимых столбцов или строк
- Ранг - максимальный размер подматрицы с ненулевым определителем

! rank(X) <= min(n, m), если X - матрица m x n

Пусть X = AB, A размера (m, k), B размера (k, n)
Пусть также k < m, k < n
Что можно сказать о ранге X?

Матричные разложения (приближение матрицей меньшего ранга)

- Матрица задаёт отображение, ранг в какой-то степени мера “сложности” отображения
- Ранг - максимальное количество линейно независимых столбцов или строк
- Ранг - максимальный размер подматрицы с ненулевым определителем

! rank(X) <= min(n, m), если X - матрица m x n

Пусть X = AB, A размера (m, k), B размера (k, n)
Пусть также k < m, k < n
Что можно сказать о ранге X?

Верно! rank(X) <= k

Матричные разложения (приближение матрицей меньшего ранга)

Зачем приближать матрицу матрицей меньшего ранга?

Мы предполагаем, что матрица преобразования X на самом деле более простая.

Что значит приблизить

- $X \approx X' = UV^T$
- $U - m \times k, V - n \times k$

Просто наилучшее приближение по норме: $||X - UV^T|| \to min$

Матричные разложения (приближение матрицей меньшего ранга)

Что значит приблизить

- $X \approx X' = UV^T$
- $U - m \times k, V - n \times k$

Просто найлучшее приближение по норме: $||X - UV^T|| \to min$

$$||X||_F = \sqrt{\sum_{i,j} x_{ij}^2}$$

Итоговая задача выглядит так:

$$U, V = \underset{U \in \mathbb{R}^{m \times k}, V \in \mathbb{R}^{n \times k}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i,j} (x_{ij} - u_i^T v_j)^2$$

Матричные разложения (пример применения)

- Пусть X – матрица признаков объектов
- Тогда U – матрица новых признаков
- При $k < n$ преобразование признаков понижает размерность пространства
- По U с максимальной возможной точностью восстанавливаются исходные признаки X

Матричные разложения (пример применения)

- Пусть X – матрица с оценками x_{ij}, поставленными пользователем i фильму j
- Некоторые значения матрицы неизвестны
- $x_{ij} \approx \widehat{x_{ij}} = u_i v_j$, где u_i отражает интересы пользователя, а v_j – признаковое описание фильма
- Идея: настроим u_i и v_j на известных x_{ij}, а неизвестные спрогнозируем
- Будем рекомендовать фильмы, для которых спрогнозирована высокая оценка

Что делать с пропущенными значениями?

https://www.coursera.org/learn/mathematics-and-python

Матричные разложения (пример применения)

- Пусть X – матрица с оценками x_{ij}, поставленными пользователем i фильму j
- Некоторые значения матрицы неизвестны
- $x_{ij} \approx \widehat{x_{ij}} = u_i v_j$, где u_i отражает интересы пользователя, а v_j – признаковое описание фильма
- Идея: настроим u_i и v_j на известных x_{ij}, а неизвестные спрогнозируем
- Будем рекомендовать фильмы, для которых спрогнозирована высокая оценка

$$U, V = \underset{U \in \mathbb{R}^{m \times k}, V \in \mathbb{R}^{n \times k}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i,j: x_{ij} \neq 0} (x_{ij} - u_i^T v_j)^2$$

Спасибо за внимание!