Введение в анализ данных

Лекция 3

Линейная алгебра и анализ данных

Евгений Соколов

sokolov.evg@gmail.com

НИУ ВШЭ, 2016

Организационное

- Paccылка: hse-minor-datamining-2+subscribe@googlegroups.com
 - (написать пустое письмо)
- Почему у ИАД-6 и ИАД-8 по два семинара?
 - Потому что раз в две недели
- Скоро на всех экранах: https://www.coursera.org/specializations/machine-learning-data-analysis

Напоминание

- \mathbb{X} пространство объектов, \mathbb{Y} пространство ответов
- $x = (x^1, ..., x^d)$ признаковое описание
- $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$ обучающая выборка
- a(x) алгоритм, модель
- Q(a,X) функционал качества алгоритма a на выборке X
- Обучение: $a(x) = \arg \max_{a \in \mathcal{A}} Q(a, X)$

Напоминание

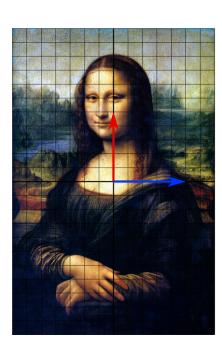
- \mathbb{X} пространство объектов, \mathbb{Y} пространство ответов
- $x = (x^1, ..., x^d)$ признаковое описание
- $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$ обучающая выборка
- a(x) алгоритм, модель
- Q(a,X) функционал качества алгоритма a на выборке X
- Обучение: $a(x) = \arg \max_{a \in \mathcal{A}} Q(a, X)$
- (могло прийти в голову кому угодно 5 веков назад)

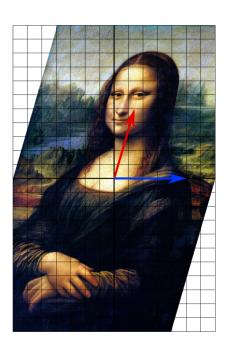
Неудобные вопросы

- Как удобно записать обучающую выборку? Какими особыми свойствами она может обладать?
- Каким должен быть Q(a, X)?
- Как найти arg $\max_{a \in \mathcal{A}} Q(a, X)$?
- Как описать неопределенность в данных?
- Может ли алгоритм оценить истинную зависимость между признаками и ответом?

Линейная алгебра

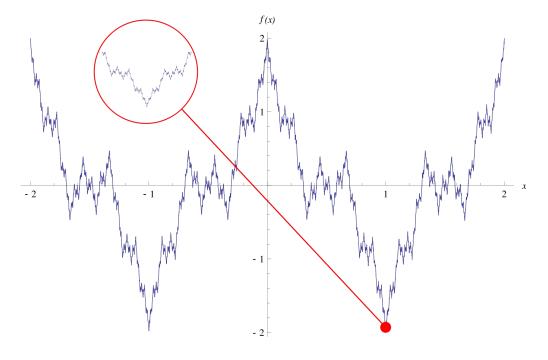
- Обучающая выборка описывается матрицей
- Нет ли в ней избыточной информации? линейная зависимость
- Системы линейных уравнений
- Линейные преобразования
- Матричные разложения





Математический анализ

- Как найти минимум функции? производная и градиент
- А если функция сложная? численная оптимизация
- Единственный ли минимум? выпуклые функции

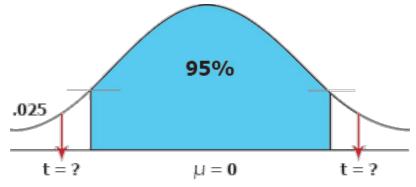


Теория вероятностей

- Как формально описать случайность?
- Какое распределение может быть у ответов или признаков?
- Как задавать вероятностные модели данных?
- Как описывать распределения? среднее, медиана, моменты
- Как проверить связь двух случайных величин? корреляция
- Что особенного в сумме большого числа факторов? центральная предельная теорема

Математическая статистика

- Как оценить средний доход по небольшой выборке?
- Как оценить качество алгоритма по небольшой выборке?
- Как настроить алгоритм, чтобы он максимально точно описывал данные? метод максимального правдоподобия
- Какова вероятность, что документ про математику, если в нем есть слово «градиент»?



95% Confidence Interval

Числа

- Натуральные №: 1, 2, 3, ...
- Целые ℤ: 0, 1, -1, 2, -2, 3, -3, ...
- Рациональные $\mathbb{Q}: \frac{m}{n}$, где $m \in \mathbb{Z}$, $n \in \mathbb{N}$
- И всё?

- Не все числа можно представить дробью
- L длина окружности, D диаметр окружности
- Уравнение: L = xD
- Чему равен x?

- Не все числа можно представить дробью
- L длина окружности, D диаметр окружности
- Уравнение: L = xD
- Чему равен x?
- $x = \pi$
- π нельзя представить в виде дроби (иррациональное число)

- Вещественные числа \mathbb{R} : десятичные дроби (в том числе бесконечные)
- $\pi = 3.14159265359 \dots$
- Теперь всё?

- Уравнение: $x^2 = -1$
- Есть ли решение?

- Уравнение: $x^2 = -1$
- Есть ли решение?
- Среди вещественных чисел нет
- Давайте дополним их решением уравнения!
- Мнимая единица: $i=\sqrt{-1}$
- Комплексные числа \mathbb{C} : a+bi, где $a\in\mathbb{R}$, $b\in\mathbb{R}$

• Может теперь всё?

- Может теперь всё?
- Да!
- Основная теорема алгебры: любой многочлен имеет хотя бы один комплексный корень

Векторы и матрицы

Вектор

- $x = (x^1, ..., x^d)$ признаковое описание
- $x^1, ..., x^d$ вещественные числа
- x набор из d чисел **вектор**

Вектор

- 5 число
- (5, 3) точка на плоскости
- (5, 3, 9) точка в пространстве
- (5, 3, 9, 1) точка в четырехмерном пространстве

• ...

Векторное пространство

- Что мы будем называть вектором?
- Векторное пространство V множество, состоящее из векторов
- Например, V все наборы из d вещественных чисел

Векторное пространство

- Какие операции над векторами нам нужны?
- Простейшие: сложение и умножение на число
- Как их ввести? Какими свойствами они должны обладать?

Аксиомы

- 1. ${f x}+{f y}={f y}+{f x}$, для любых ${f x},{f y}\in V$ (коммутативность сложения);
- 2. ${\bf x}+({\bf y}+{\bf z})=({\bf x}+{\bf y})+{\bf z}$, для любых ${\bf x},{\bf y},{\bf z}\in V$ (ассоциативность сложения);
- 3. существует такой элемент $\mathbf{0} \in V$, что $\mathbf{x} + \mathbf{0} = \mathbf{x}$ для любого $\mathbf{x} \in V$ (существование нейтрального элемента относительно сложения), называемый **нулевым вектором** или просто **нулём** пространства V;
- 4. для любого $\mathbf{x} \in V$ существует такой элемент $-\mathbf{x} \in V$, что $\mathbf{x} + (-\mathbf{x}) = \mathbf{0}$, называемый вектором, **противоположным** вектору \mathbf{x} ;
- 5. $\alpha(\beta \mathbf{x}) = (\alpha \beta) \mathbf{x}$ (ассоциативность умножения на скаляр);
- 6. $1 \cdot \mathbf{x} = \mathbf{x}$ (унитарность: умножение на нейтральный (по умножению) элемент поля F сохраняет вектор).
- 7. $(\alpha + \beta)\mathbf{x} = \alpha\mathbf{x} + \beta\mathbf{x}$ (дистрибутивность умножения на вектор относительно сложения скаляров);
- 8. $\alpha(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \alpha \mathbf{x} + \alpha \mathbf{y}$ (дистрибутивность умножения на скаляр относительно сложения векторов).

Векторное пространство

Множество V называется векторным пространством, если:

- На нем заданы операции + (сложение) и * (умножение на число)
- Оно замкнуто относительно этих операций
- Для этих операций выполнены 8 аксиом

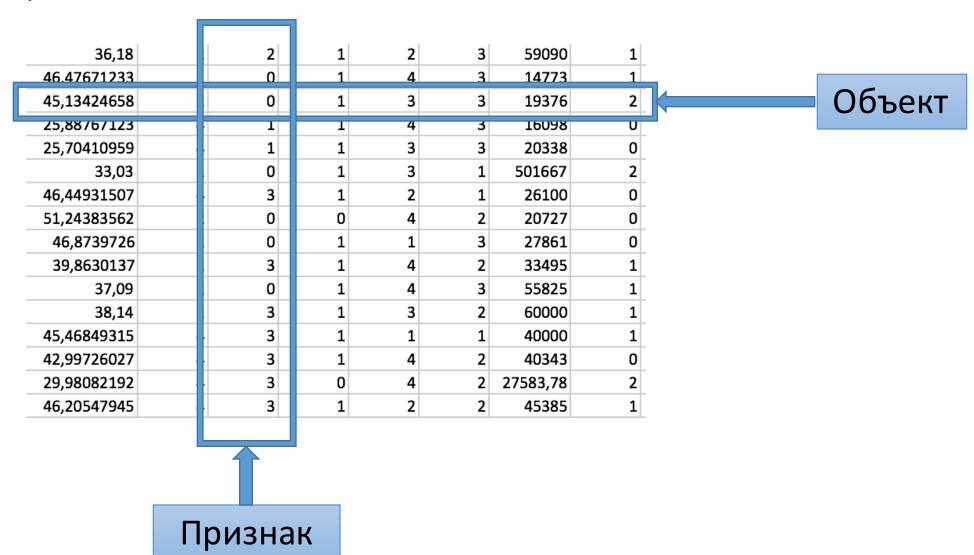
Евклидово пространство

- Пространство наборов из d вещественных чисел евклидово пространство \mathbb{R}^d
- Бывают пространства с более сложными элементами: многочленами, уравнениями, функциями

Евклидово пространство

- Сложение и умножение на число покоординатно
- Сложение
 - $a = (a_1, ..., a_d)$
 - $b = (b_1, ..., b_d)$
 - $a + b = (a_1 + b_1, ..., a_d + b_d)$
- Умножение на число:
 - $a = (a_1, \dots, a_d)$
 - $\beta \in \mathbb{R}$
 - $\beta a = (\beta a_1, ..., \beta a_d)$

- Вектор описывает один объект
- А если объектов несколько?



- Матрица таблица с числами
- Пример:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 5 & 1 \\ 5 & 3 & 9 & 0 \\ 0 & 7 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

- Два индекса: строка и столбец
- $a_{11} = 1$
- $a_{23} = 9$

- Матрица таблица с числами
- Пример:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 5 & 1 \\ 5 & 3 & 9 & 0 \\ 0 & 7 & 1 & 4 \end{pmatrix}$$

- Два индекса: строка и столбец
- $a_{11} = 1$
- $a_{23} = 9$
- Пространство матриц 3 на 4: $\mathbb{R}^{3\times 4}$ (тоже векторное!)

- Выборка объектов описывается матрицей «объекты-признаки»
- По строкам объекты
- По столбцам признаки

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

Линейная независимость

Объекты-признаки

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- Задача предсказания прибыли магазина в следующем месяце
- Рассмотрим в качестве векторов столбцы матрицы (признаки)

Подозрительные зависимости

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- Первый и второй признаки: $x_2 = 1000x_1$
- Первый общий вес товаров в тоннах, второй в килограммах

Подозрительные зависимости

$$X = \begin{pmatrix} 1 & 1000 & 5 & 3 & 4 \\ 9 & 9000 & 10 & 5 & 7.5 \\ 5 & 5000 & 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

- $x_5 = 0.5x_3 + 0.5x_4$
- Пятый средняя прибыль за последние два месяца
- Третий и четвертый прибыль в прошлом и позапрошлом месяце

— один из векторов равен сумме с весами остальных векторов

Это плохо:

- Избыточная информация
- Лишние затраты на хранение данных
- Вредит некоторым методам машинного обучения

- Пусть дан набор векторов x_1, \dots, x_n
- Они линейно зависимы, если
 - существуют такие числа β_1 , ..., β_n ,
 - хотя бы одно из которых не равно нулю,
 - что сумма векторов с такими коэффициентами равна нулю

$$\beta_1 x_1 + \dots + \beta_n x_n = 0$$

- Пусть дан набор векторов x_1 , ..., x_n
- Они линейно зависимы, если

Вектор из всех нулей

- существуют такие числа eta_1 , ..., eta_n ,
- хотя бы одно из которых не равно нулю,
- что сумма векторов с такими коэффициентах равна нулю $\beta_1 x_1 + \dots + \beta_n x_n = 0$

• Аналогично: линейно зависимы, если один из векторов линейно выражается через остальные

$$x_i = \beta_1 x_1 + \dots + \beta_{i-1} x_{i-1} + \beta_{i+1} x_{i+1} + \dots + \beta_n x_n$$

- Пусть дан набор векторов x_1 , ..., x_n
- Они линейно независимы, если уравнение

$$\beta_1 x_1 + \dots + \beta_n x_n = 0$$

выполнено только при $\beta_1=\beta_2=\cdots=\beta_n=0$

Размерность векторного пространства

- Векторное пространство V
- Размерность максимальное число линейно независимых векторов в нем
- Обозначение: dim V

Размерность векторного пространства

- Для евклидова пространства: $\dim \mathbb{R}^d = d$
- Пример системы линейно независимых векторов:

$$e_1 = (1, 0, ..., 0)$$

 $e_2 = (0, 1, ..., 0)$
...
 $e_d = (0, 0, ..., 1)$

ullet Любой вектор из \mathbb{R}^d можно записать как

$$x = a_1 e_1 + \dots + a_d e_d$$

- $x_1 = (2, 1, 2)$
- $x_2 = (4, 2, 4)$
- $x_3 = (1, 2, 3)$
- $2x_1 x_2 + 0x_3 = 0$
- Линейно зависимы

- $x_1 = (2, 1, 2)$
- $x_2 = (5, 2, 4)$
- $x_3 = (1, 2, 3)$
- Линейно независимы

Как это можно было понять?

- Вариант 1 метод Гаусса
- Вариант 2 вычислить ранг

Ранг матрицы

- ullet Ранг системы строк матрицы A максимальное число линейно независимых строк среди них
- Ранг системы столбцов матрицы A максимальное число линейно независимых столбцов среди них
- Важный результат: ранг по столбцам и по строкам всегда совпадает
- \bullet Обозначение: $\operatorname{rg} A$

Ранг матрицы

• Характеристика количества информации в матрице

- rg A = 1
- Можно заменить на один столбец: $A = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}$

Ранг матрицы

- Задача кредитного скоринга
- 100,000 клиентов, 1000 признаков
- Нужно хранить 10^8 чисел!
- Вычисляем ранг: $\operatorname{rg} A = 10$
- Очень много линейно зависимых столбцов: избыточность в базах данных, таблицы-дубликаты и т.д.
- ullet Достаточно хранить 10^6 чисел
- Уменьшили необходимый объем памяти в 100 раз!

Линейные преобразования

Векторы и матрицы

- ullet Вектор размера d тоже матрица
- Вектор-строка: $w = (w_1, ..., w_d) \in \mathbb{R}^{1 \times d}$
- Вектор-столбец: $w = \begin{pmatrix} w_1 \\ ... \\ w_d \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{d \times 1}$

Линейная модель

•
$$a(x) = w_1 x^1 + \dots + w_d x^d$$

• Как применить модель к целой выборке?

$$egin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \ dots & dots & \ddots & dots \ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix} \qquad egin{pmatrix} \sum_{i=1}^{d} w_i x_{1i} \ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{2i} \ dots \ \sum_{i=1}^{d} w_i x_{\ell i} \end{pmatrix} \ egin{pmatrix} \sum_{i=1}^{d} w_i x_{\ell i} \end{pmatrix}$$

Умножение

- Мы еще не вводили умножение матрицы на вектор
- Определим его именно так
- Только для матрицы $\ell imes d$ и вектора d imes 1

$$Xw = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{d} w_{i} x_{1i} \\ \sum_{i=1}^{d} w_{i} x_{2i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{d} w_{i} x_{\ell i} \end{pmatrix}$$

Линейные преобразования

- Умножая матрицу $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ на вектор $x \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, получаем вектор $z \in \mathbb{R}^{m \times 1}$
- Матрица задает функцию из $\mathbb{R}^{n imes 1}$ в $\mathbb{R}^{m imes 1}$
- Эта функция линейная:
 - $A(x_1 + x_2) = Ax_1 + Ax_2$
 - $A(\alpha x) = \alpha Ax$
- Любая линейная функция описывается некоторой матрицей

Линейные преобразования

- Функции можно применять последовательно: g(f(x))
- В том числе линейные: A(Bx)
- Композиция линейных функций тоже линейная функция:
 - $A(B(x_1 + x_2)) = A(Bx_1) + A(Bx_2)$
 - $A(B(\alpha x)) = \alpha A(Bx)$
- А какая у нее матрица?
- Зададим матричное умножение так, чтобы оно соответствовало композиции линейных преобразований

Матричное умножение

- Только для матриц $A \in \mathbb{R}^{m \times k}$ и $A \in \mathbb{R}^{k \times n}$
- Результат: $AB = C \in \mathbb{R}^{m \times n}$
- Правило:

$$c_{ij} = \sum_{p=1}^{k} a_{ip} b_{pj}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & & \\ & & & \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ & & \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \\ & & & \\ & & & \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 1 \\ 10 & 0 \end{pmatrix} * \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 \\ 0 & & \end{pmatrix}$$

Сложение

- Можем складывать только матрицы одинакового размера
- Поэлементно:
- C = AB
- $\bullet \ c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$

Умножение на число

- Поэлементно:
- $C = \alpha B$
- $c_{ij} = \alpha b_{ij}$

• Главная диагональ — a_{ii}

- Транспонирование поворот относительно главной диагонали
- A размера $m \times n$ превращается в A^T размера $n \times m$
- $a_{ij}^T = a_{ji}$
- Строки становятся столбцами

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 2 & 3 & 3 \\ 2 & 1 & 0 \\ 5 & 1 & 1 \end{pmatrix} \longrightarrow A^{T} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 & 5 \\ 4 & 3 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Системы линейных уравнений

Система линейных уравнений

• Линейная модель должна давать верные ответы на обучении

$$\begin{cases} w_1 x_{11} + w_2 x_{12} + \dots + w_d x_{1d} = y_1 \\ \dots \\ w_1 x_{\ell 1} + w_2 x_{\ell 2} + \dots + w_d x_{\ell d} = y_\ell \end{cases}$$

Система линейных уравнений

• В матричном виде: Xw = y

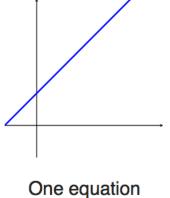
Система линейных уравнений

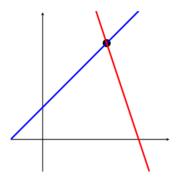
• Три уравнения:

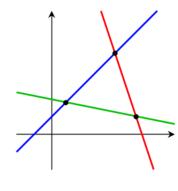
$$y = x + 1$$

$$y = -3x + 9$$

$$y = -1x + 2$$







n Two equations

Three equations

Три случая

- Бесконечно много решений
- Одно решение
- Ни одного решения

Как определить тип?

• Сравниваем ранг матрицы X и ранг $(X \mid y)$

$$\begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1d} & y_1 \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2d} & y_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ x_{\ell 1} & x_{\ell 2} & \cdots & x_{\ell d} & y_{\ell} \end{pmatrix}$$

- Если равны, то правая часть выражается через признаки
- Если ранги равны, то есть хотя бы одно решение
- Если ранг второй матрицы больше, то решений нет

Сколько решений у системы?

- Нужно сравнить ранг X и число неизвестных (т.е. d)
- \bullet Если $\operatorname{rg} X = d$, то решение одно
- Если $\operatorname{rg} X < d$, то решений бесконечно много (уравнений меньше, чем неизвестных)
- Пример: $x_1 + 5x_2 = 10$
- Решение: $x_1 = 10 5x_2$ для любого $x_2 \in \mathbb{R}$

Как решать?

• Численное решение систем линейных уравнений — на следующей лекции

Обратная матрица

- A^{-1} обратная к А
- $\bullet AA^{-1} = A^{-1}A = I$
- І единичная матрица
- Только для квадратных матриц

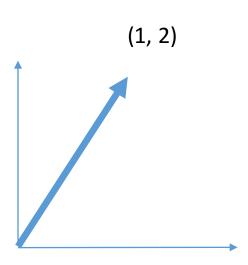
- Существует тогда и только тогда, когда $\det A \neq 0$
- Можно найти с помощью SciPy

Квадратные матрицы

- $\bullet Ax = b$
- Решение: $x = A^{-1}b$
- Решение единственно тогда и только тогда, когда существует A^{-1}

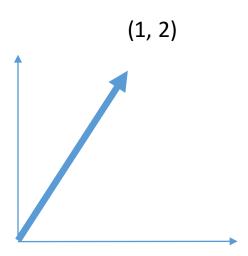
Операции в векторных пространствах

• Вектор — точка и стрелка, идущая к ней из нуля

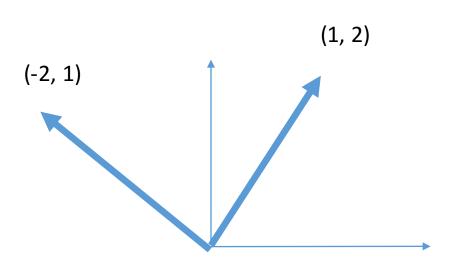


• Длина вектора:

$$\sqrt{1^2 + 2^2} = \sqrt{5}$$

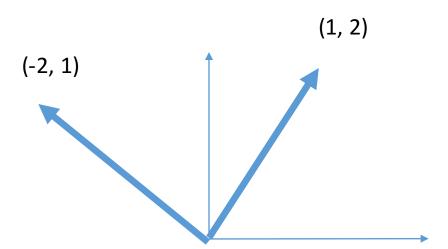


 Можем измерить угол с помощью транспортира:
 90 градусов



• Можем измерить расстояние между точками:

$$\sqrt{\left(1 - (-2)\right)^2 + (2 - 1)^2} = \sqrt{10}$$



Норма

- Обобщение понятия длины вектора
- Функция ||x|| от вектора
- Если ||x|| = 0, то x = 0
- $||x + y|| \le ||x|| + ||y||$
- $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$

• Векторное пространство с нормой — нормированное

Примеры норм

• Евклидова норма:

$$||x||_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^d x_i^2}$$

• Манхэттенская норма:

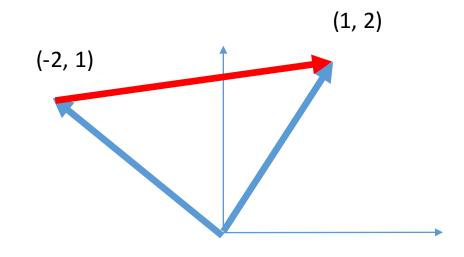
$$||x||_1 = \sum_{i=1}^{a} |x_i|$$

Метрика

- Обобщение понятия расстояния
- $\bullet \ \rho(x,y) = \|x y\|$

• Соответствует геометрическим представлениям

• Векторное пространство с метрикой — метрическое



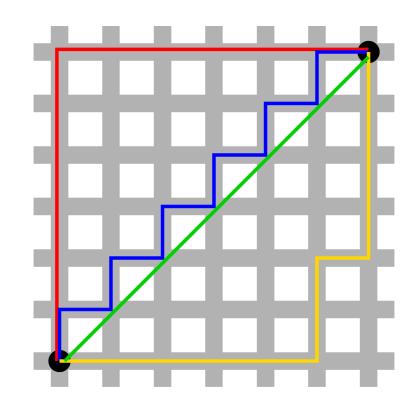
Примеры метрик

• Евклидова метрика:

$$\rho_2(x, z) = \sqrt{\sum_{i=1}^d (x_i - z_i)^2}$$

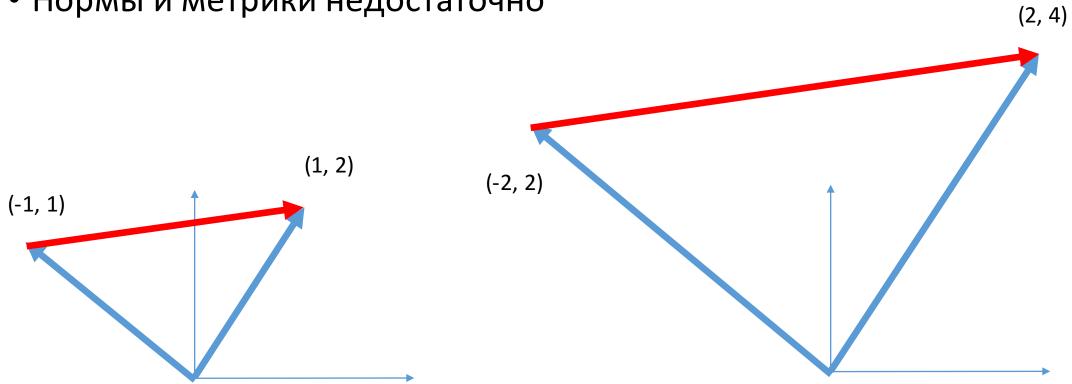
• Манхэттенская метрика:

$$\rho_1(x,z) = \sum_{i=1}^d |x_i - z_i|$$



Как искать углы?

• Нормы и метрики недостаточно



$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

• Hopma: $||x||_2 = \sqrt{\langle x, x \rangle}$

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

- Hopma: $||x||_2 = \sqrt{\langle x, x \rangle}$
- Расстояние: $\rho_2(x,z) = \|x-z\| = \sqrt{\langle x-z, x-z \rangle}$

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

- Hopma: $||x||_2 = \sqrt{\langle x, x \rangle}$
- Расстояние: $\rho_2(x,z) = \|x-z\| = \sqrt{\langle x-z, x-z \rangle}$
- Угол?

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

• Важное соотношение: $\langle x, y \rangle = ||x|| ||y|| \cos \angle (x, y)$

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i$$

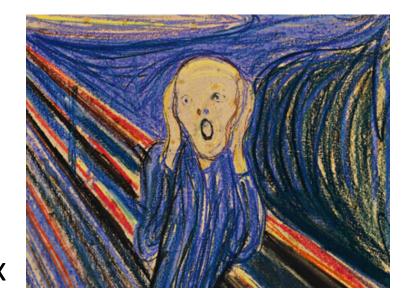
• Важное соотношение: $\langle x,y \rangle = \|x\| \|y\| \cos \angle (x,y)$

• Косинус угла: $\cos \angle(x,y) = \frac{\langle x,y \rangle}{\|x\| \|y\|}$

- Косинус угла: $\cos \angle(x,y) = \frac{\langle x,y \rangle}{\|x\| \|y\|}$
- Мера сонаправленности векторов
- Для параллельных векторов $\cos \angle (x, y) = 1$
- Для перпендикулярных векторов $\cos \angle (x, y) = 0$

Резюме

- Виды чисел
- Векторы и матрицы способ описания данных
- Линейная независимость и ранг измерение количества информации в данных
- Матричное умножение для удобства работы с линейными моделями
- Норма, метрика, угол измерение сходства между объектами



На следующей лекции

- Математический анализ
- Как настроить линейную модель под данные?
- Как грамотно подобрать функционал качества?

