Введение в анализ данных

Лекция 3

Линейная алгебра и метрические методы

Евгений Соколов

esokolov@hse.ru

НИУ ВШЭ, 2017

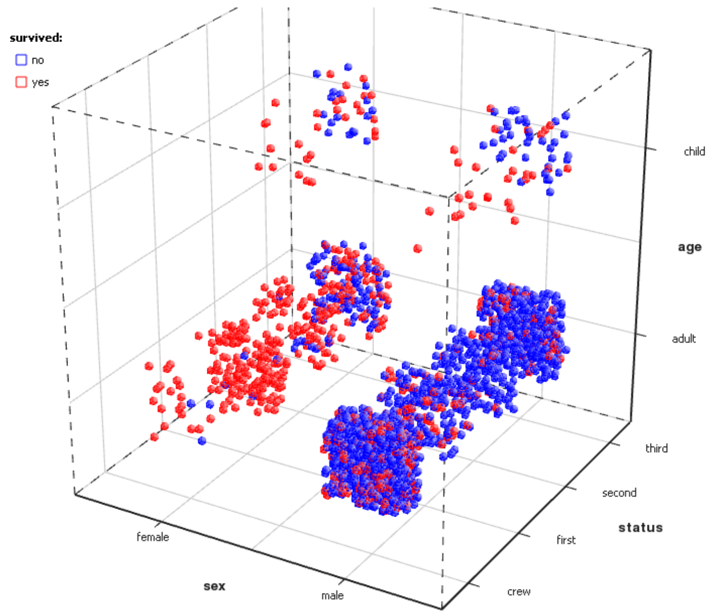
Векторы и матрицы

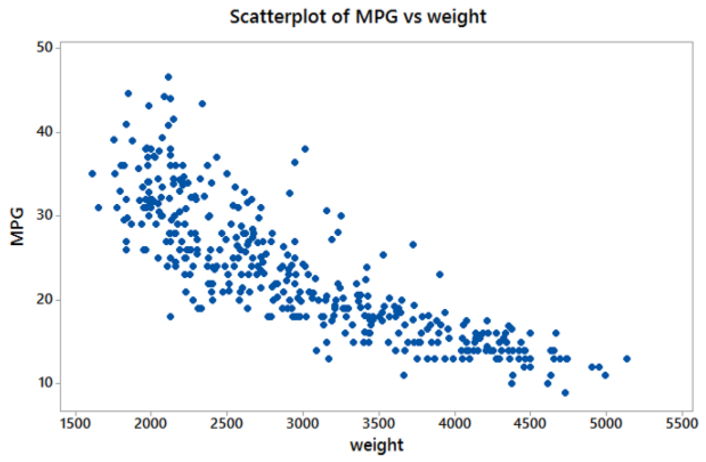
Вектор

- $x = (x^1, \dots, x^d)$ — признаковое описание
- $x^1, \dots, x^d$ — 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. $\mathbf{x}+\mathbf{y}=\mathbf{y}+\mathbf{x}$, для любых $\mathbf{x},\mathbf{y}\in V$ (*коммутативность сложения*);
2. $\mathbf{x}+(\mathbf{y}+\mathbf{z})=(\mathbf{x}+\mathbf{y})+\mathbf{z}$, для любых $\mathbf{x},\mathbf{y},\mathbf{z}\in V$ (*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
  - $a = (a_1, \dots, a_d)$
  - $b = (b_1, \dots, b_d)$
  - $a + b = (a_1 + b_1, \dots, a_d + b_d)$
- Умножение на число:
  - $a = (a_1, \dots, a_d)$
  - $\beta \in \mathbb{R}$
  - $\beta a = (\beta a_1, \dots, \beta a_d)$

Матрицы

- Вектор описывает один объект
- А если объектов несколько?

Матрицы

36,18	2	1	2	3	59090	1
46,47671233	0	1	4	3	14773	1
45,13424658	0	1	3	3	19376	2
25,88767123	1	1	4	3	16098	0
25,70410959	1	1	3	3	20338	0
33,03	0	1	3	1	501667	2
46,44931507	3	1	2	1	26100	0
51,24383562	0	0	4	2	20727	0
46,8739726	0	1	1	3	27861	0
39,8630137	3	1	4	2	33495	1
37,09	0	1	4	3	55825	1
38,14	3	1	3	2	60000	1
45,46849315	3	1	1	1	40000	1
42,99726027	3	1	4	2	40343	0
29,98082192	3	0	4	2	27583,78	2
46,20547945	3	1	2	2	45385	1

Объект

Признак

Матрицы

- 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
- $a_{11} = 1$
- $a_{23} = 9$

Матрицы

- 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!)

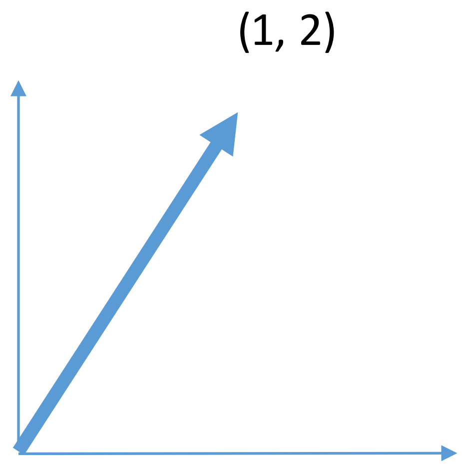
Матрицы

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

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

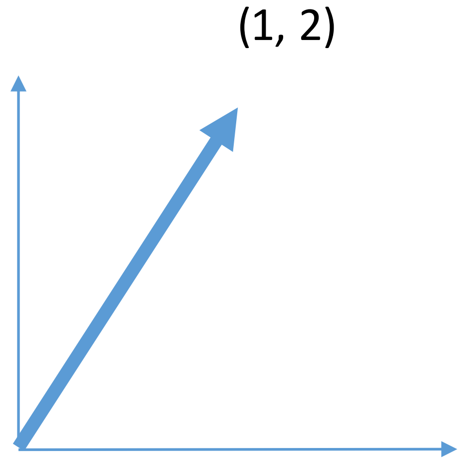
Операции в векторных пространствах

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

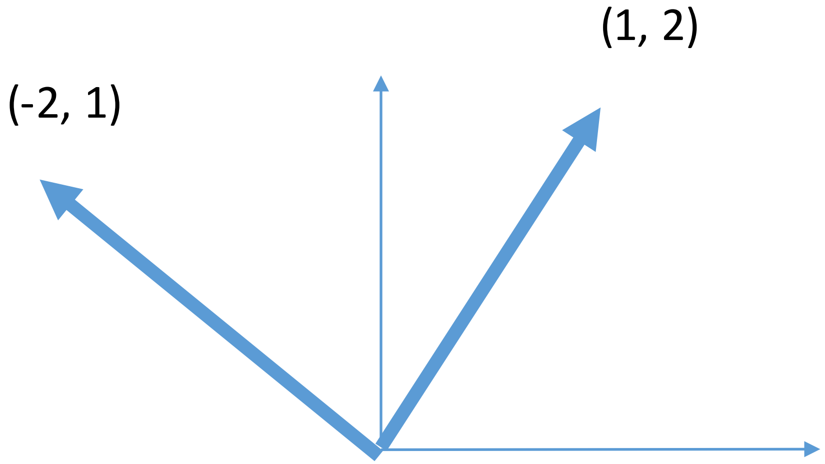


- Длина вектора:

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

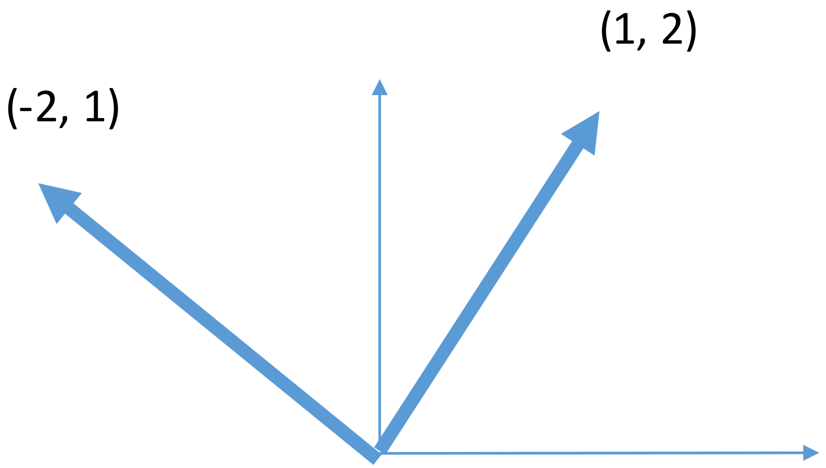


- Можем измерить угол с помощью транспортира: 90 градусов



- 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 $x = 0$
- $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$
- $\|\alpha x\| = |\alpha| \, \|x\|$

- Векторное пространство с нормой — нормированное

Примеры норм

- Евклидова норма:

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

- Манхэттенская норма:

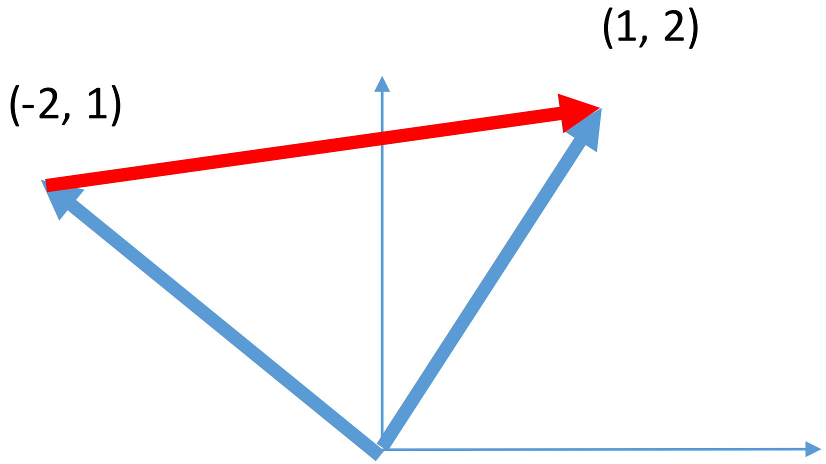
$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{d} |x_i|$$

Метрика

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

- Соответствует геометрическим представлениям

- Векторное пространство с метрикой — метрическое



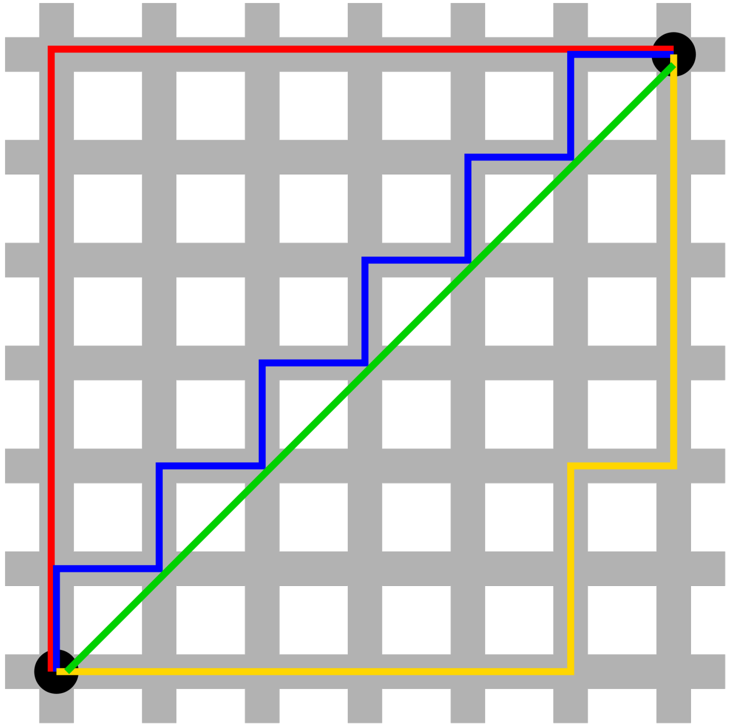
Примеры метрик

- Евклидова метрика:

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

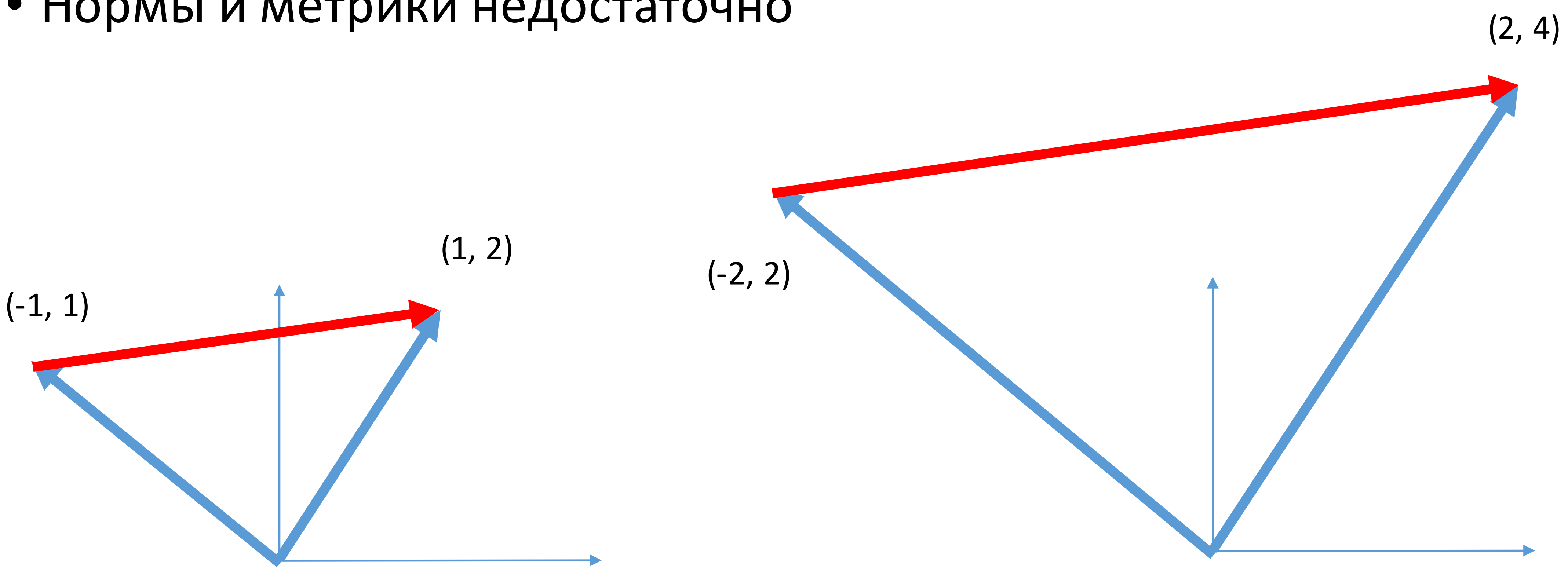
- Манхэттенская метрика:

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



Как искать углы?

- Нормы и метрики недостаточно



Скалярное произведение

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

Скалярное произведение

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

- Норма: $\|x\|_2 = \sqrt{\langle x, x \rangle}$

Скалярное произведение

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

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

Скалярное произведение

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

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

Скалярное произведение

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

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

Скалярное произведение

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

- Важное соотношение: $\langle x, y \rangle = \|x\| \|y\| \boxed{\cos \angle(x, y)}$

Косинус угла

Скалярное произведение

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

Скалярное произведение

- 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 $\cos\angle(x, y) = 0$

Функционал ошибки для классификации

Ошибка классификации

- Доля неправильных ответов:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) \neq y_i]$$

- Нотация Айверсона:
  - $[\text{истина}] = 1$
  - $[\text{ложь}] = 0$

Ошибка классификации

$a(x)$	y
-1	-1
$+1$	$+1$
-1	-1
$+\mathbf{1}$	$-\mathbf{1}$
$+1$	$+1$

- Доля неправильных ответов:

$$\frac{1}{5} = 0.2$$

Accuracy

- Доля правильных ответов:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) = y_i]$$

- На английском: accuracy

Accuracy

- Доля правильных ответов:

$$Q(a, X) = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [a(x_i) = y_i]$$

- На английском: accuracy
- ВАЖНО: не переводите это как «точность»!

Оценивание обобщающей способности

Как оценить качество?

- Как алгоритм будет вести себя на новых данных?
- Какая у него будет доля ошибок?
- …или другая метрика качества
- По обучающей выборке нельзя это оценить

Отложенная выборка

- Разбиваем выборку на две части
  - Обучающая выборка
  - Отложенная выборка
- На первой обучаем алгоритм
- На второй измеряем качество

Пропорции разбиения

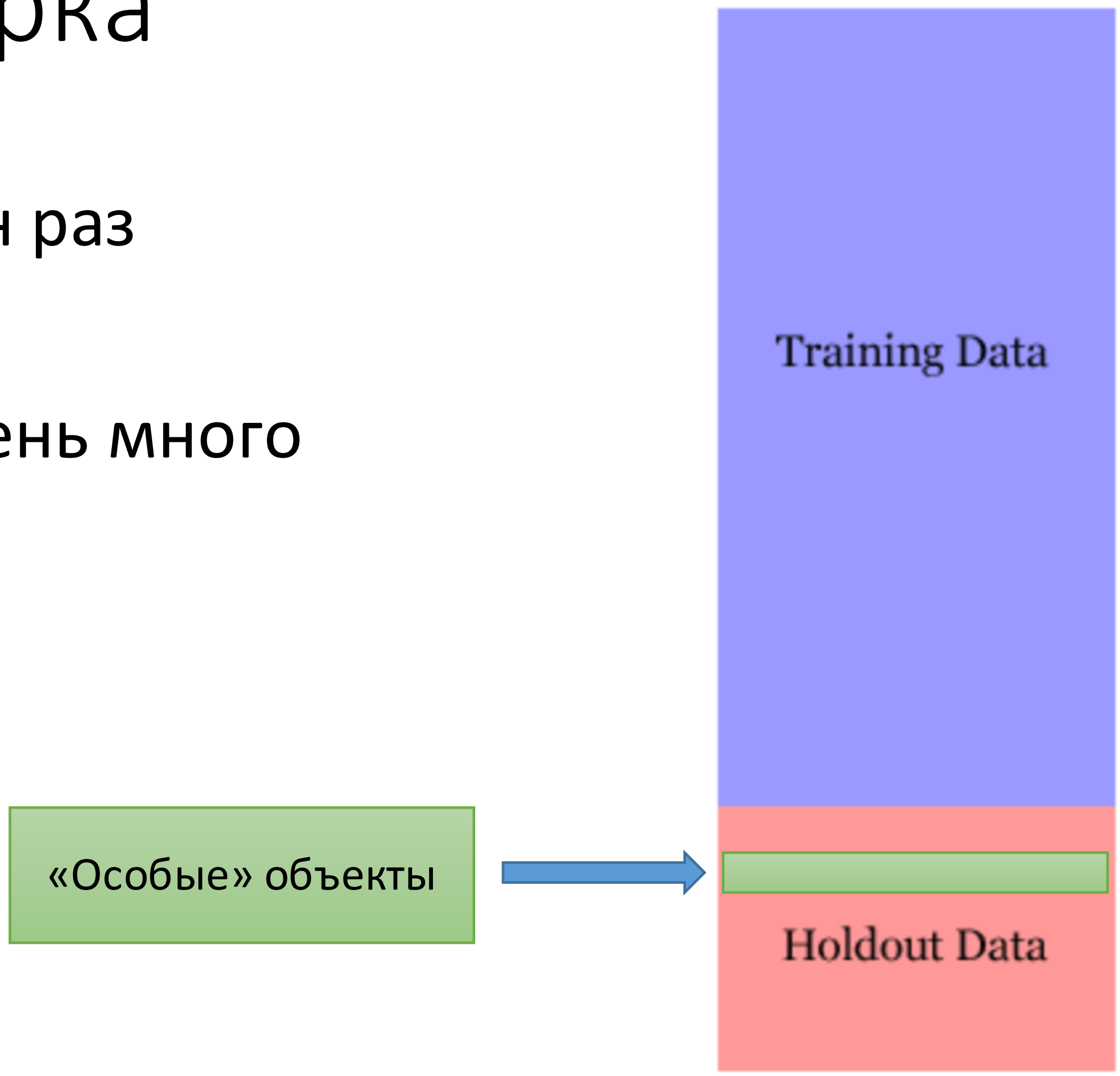
- Маленькая отложенная часть
  - (+) Обучающая выборка репрезентативная
  - (-) Оценка качества ненадежная
- Большая отложенная часть
  - (+) Оценка качества надежная
  - (-) Оценка качества смещенная
- Обычно: 70/30, 80/20, 0.632/0.368

Отложенная выборка

- (+) Обучаем алгоритм один раз
- (-) Зависит от разбиения
- Подходит, если данных очень много

Отложенная выборка

- (+) Обучаем алгоритм один раз
- (-) Зависит от разбиения
- Подходит, если данных очень много



Много отложенных выборок

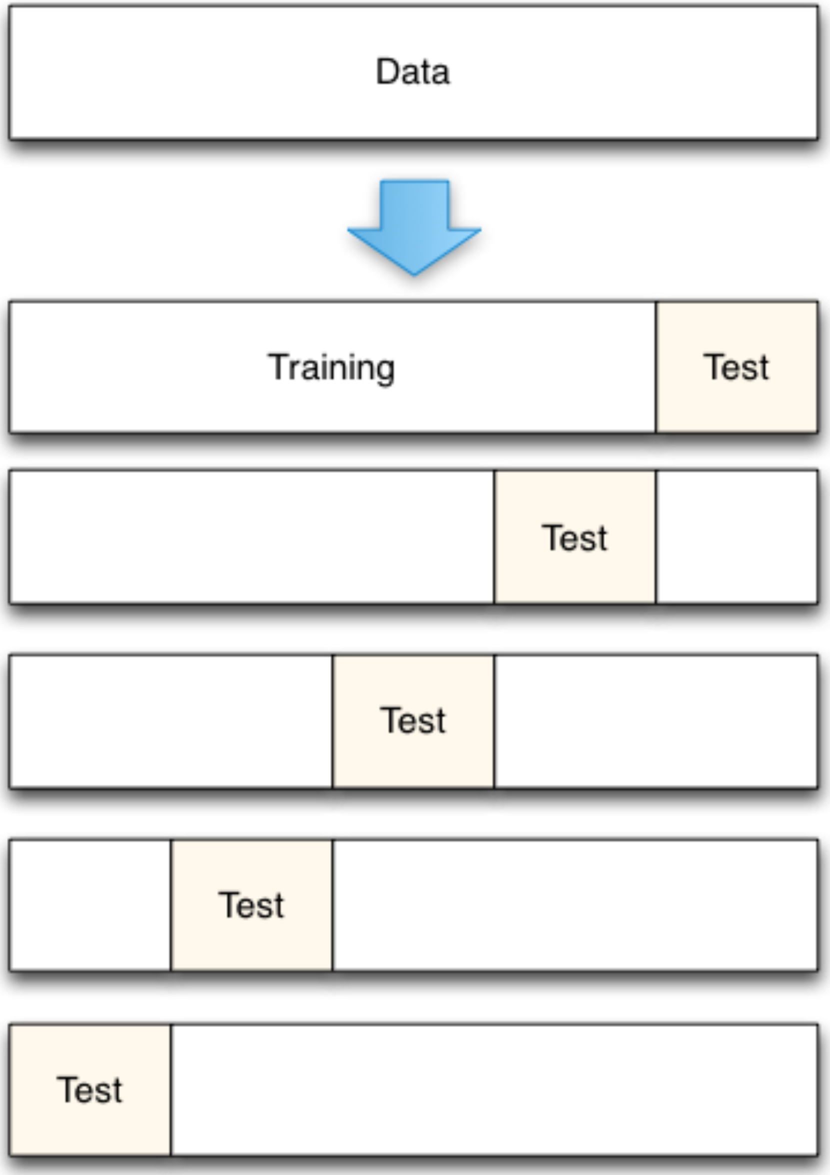
- Улучшение: разбиваем выборку на две части n раз
- Усредняем оценку качества

Много отложенных выборок

- Нет гарантий, что каждый объект побывает в обучении

Кросс-валидация

- Разбиваем выборку на k блоков
- Каждая по очереди выступает как тестовая



Число блоков

- Мало блоков
  - Тестовая выборка всегда большая — (+) надежные оценки
  - Обучение маленькое — (-) смещенные оценки
- Много блоков
  - (-) Ненадежные оценки
  - (+) Несмещенные оценки

Число блоков

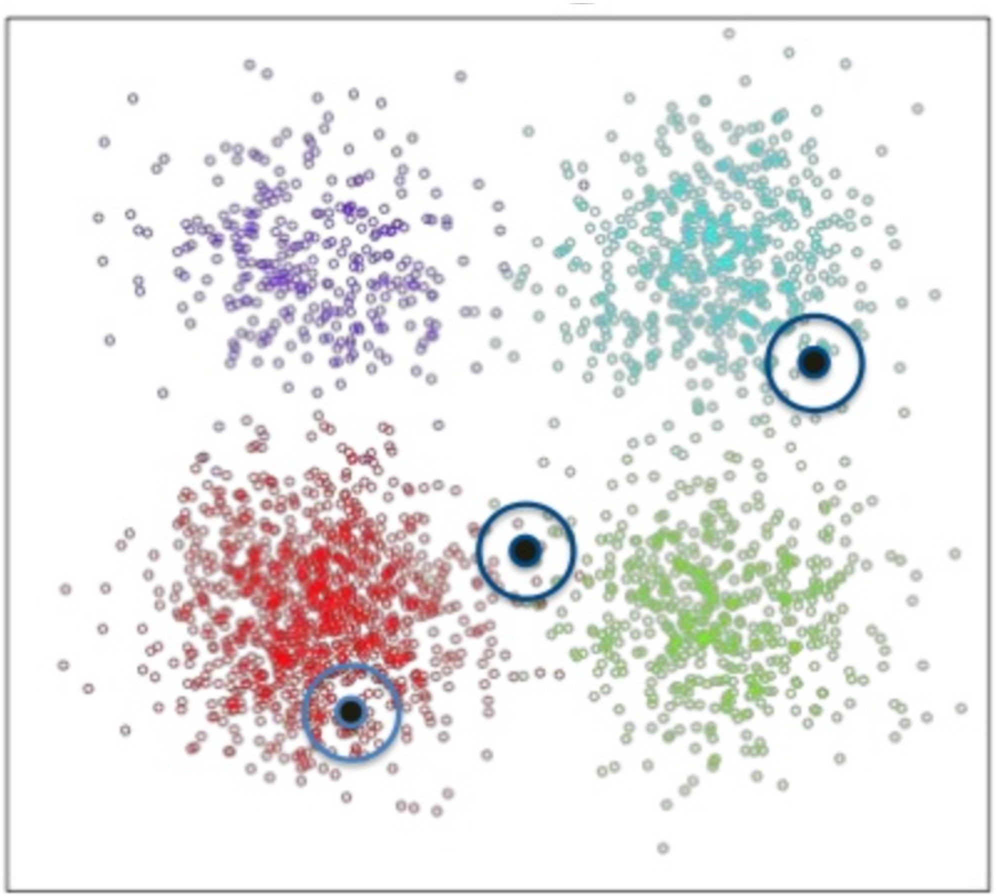
- Обычно: $k = 3, 5, 10$
- Чем больше выборка, тем меньше нужно k
- Чем больше k, тем больше раз надо обучать алгоритм

Совет

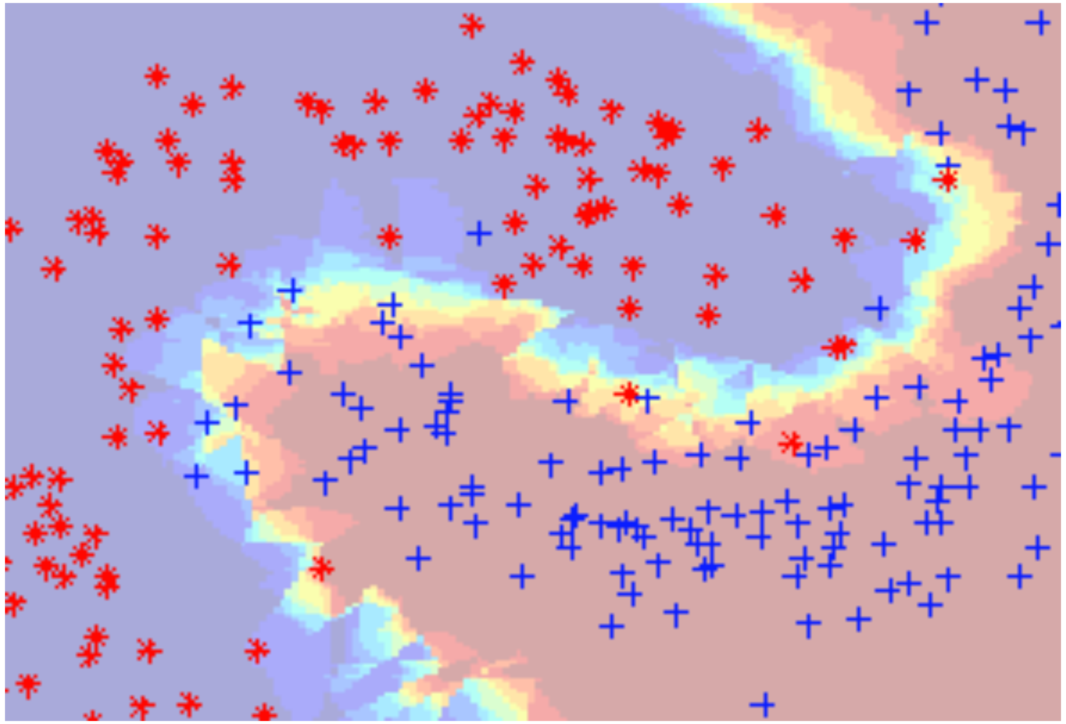
- Перемешивайте выборку!
- Объекты могут быть отсортированы
- При разбиении в обучении могут оказаться только мальчики, в контроле — только девочки

Гипотеза компактности

Гипотеза компактности



Гипотеза компактности



Гипотеза компактности

Гипотеза компактности

- Для классификации: близкие объекты, как правило, лежат в одном классе
- Для регрессии: близким объектам соответствуют близкие ответы

- Что такое «близкие объекты»?

Измерение сходства

- Необходимо ввести расстояние между объектами
- $\rho(x, z)$ — функция расстояния (не обязательно метрика)

- Типичный пример: евклидова метрика

$$\rho(x, z) = \sqrt{\sum_{j=1}^{d} \left(x_j - z_j\right)^2}$$

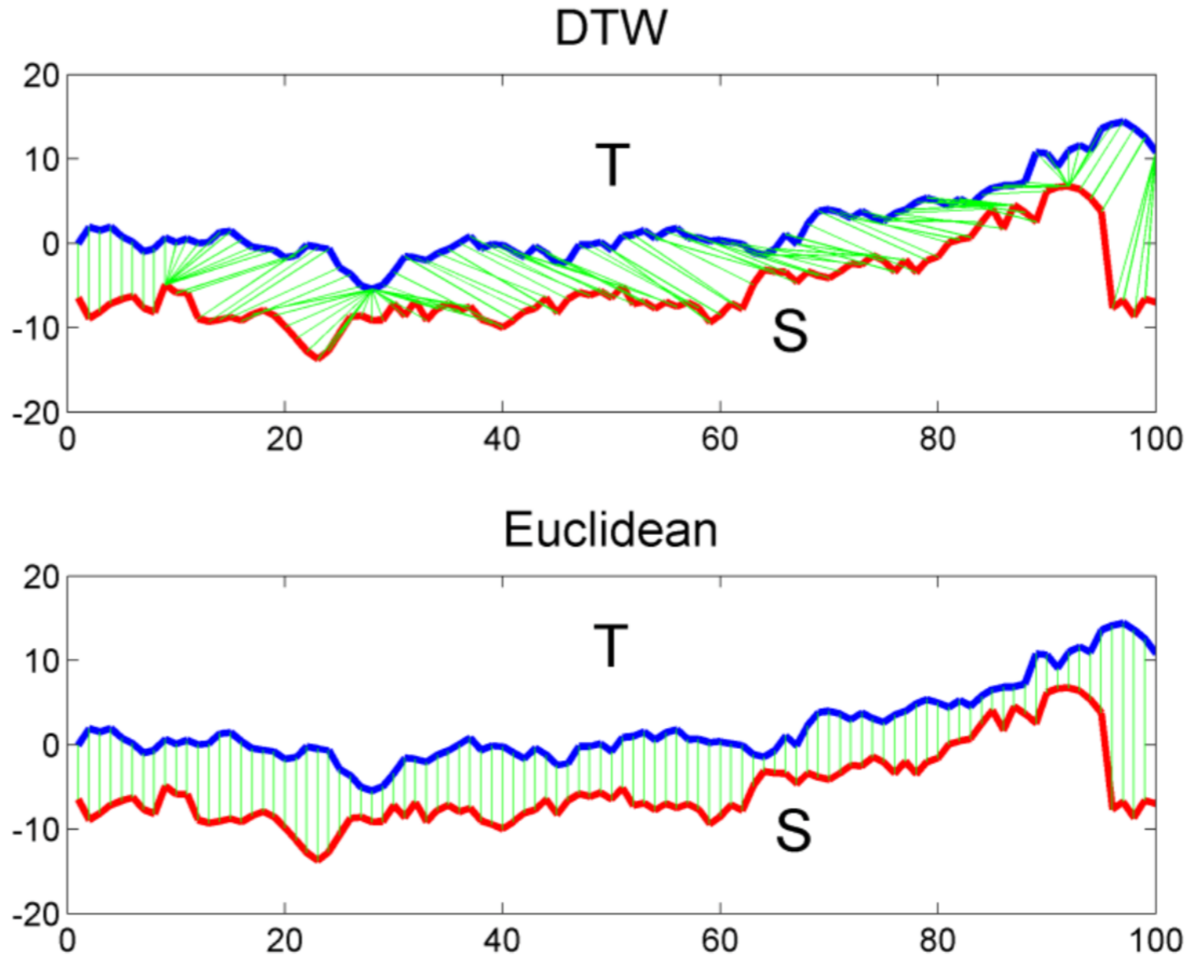
Расстояния на текстах

- Расстояние Левенштейна
- Количество вставок и удалений символов, необходимое для преобразования одной строки в другую

```
CTGGGCTAAAGGTCCCTTAGCC..TTTAGAAAAA.GGGCCATTAGGAAATTGC
CTGGGACTAAA....CCTTAGCCTATTTACAAAAATGGGCCATTAGG...TTGC
```

Расстояния на временных рядах

- Суммарное евклидово расстояние
- Dynamic time warping
- И другие



Метрические методы классификации

Метод k ближайших соседей

- k nearest neighbors (kNN)

- Задача классификации
- Дано: выборка $X = (x_i, y_i)_{i=1}^{\ell}$
- Этап обучения: запоминаем выборку X

Метод k ближайших соседей

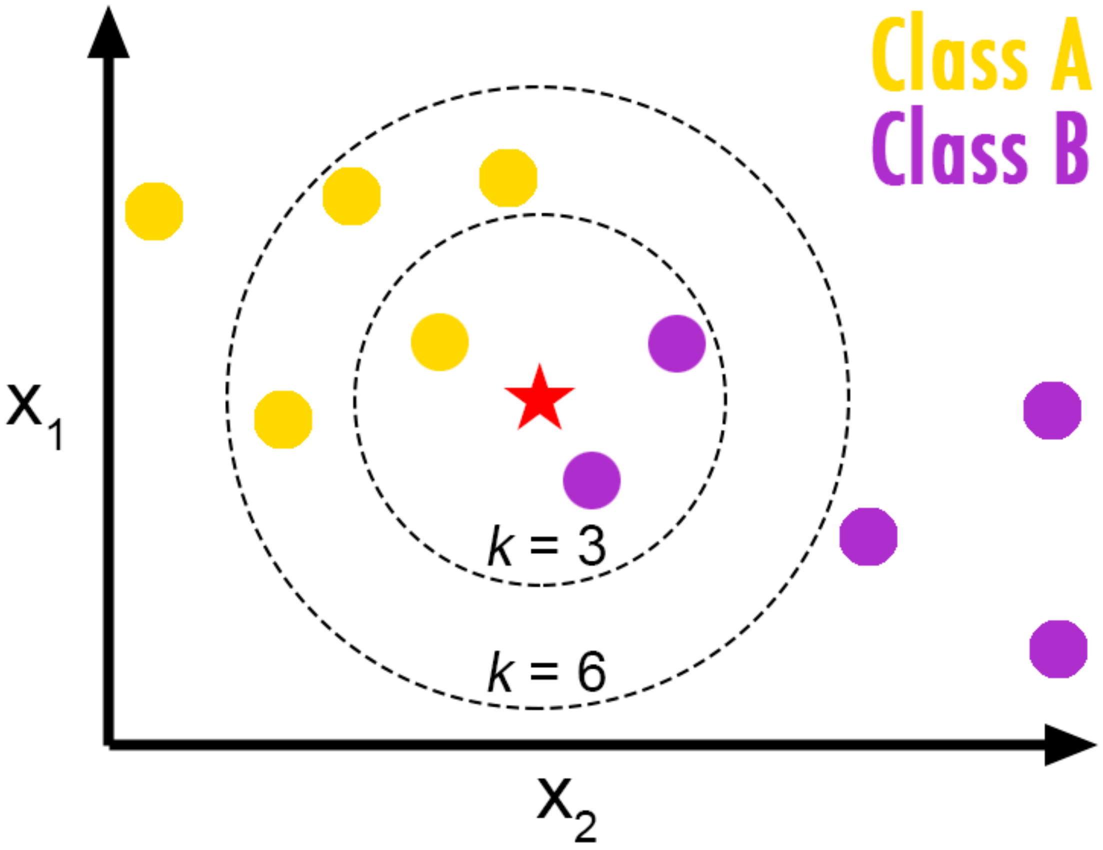
- Новый объект x
- Сортируем объекты обучающей выборки по расстоянию до x:

$$\rho\left(x, x_{(1)}\right) \leq \cdots \leq \rho\left(x, x_{(\ell)}\right)$$

- Выбираем класс, наиболее популярный среди k ближайших соседей:

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{\boldsymbol{k}} [y_{(i)} = y]$$

Метод k ближайших соседей

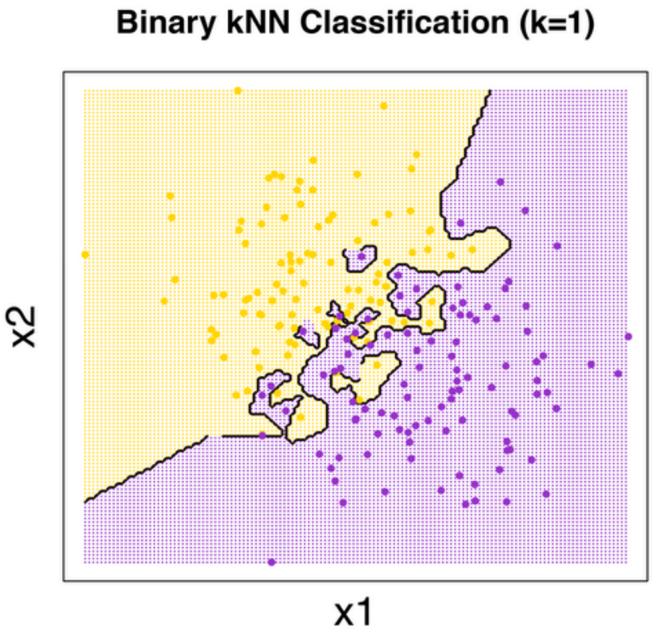


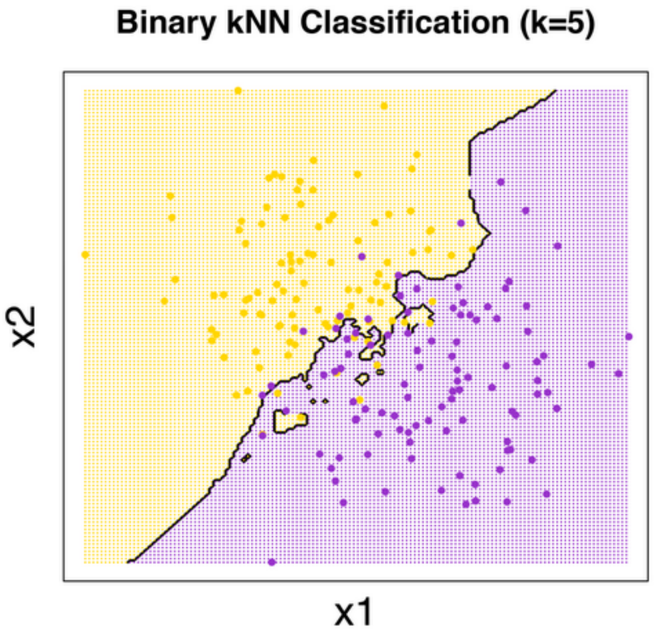
Метод k ближайших соседей

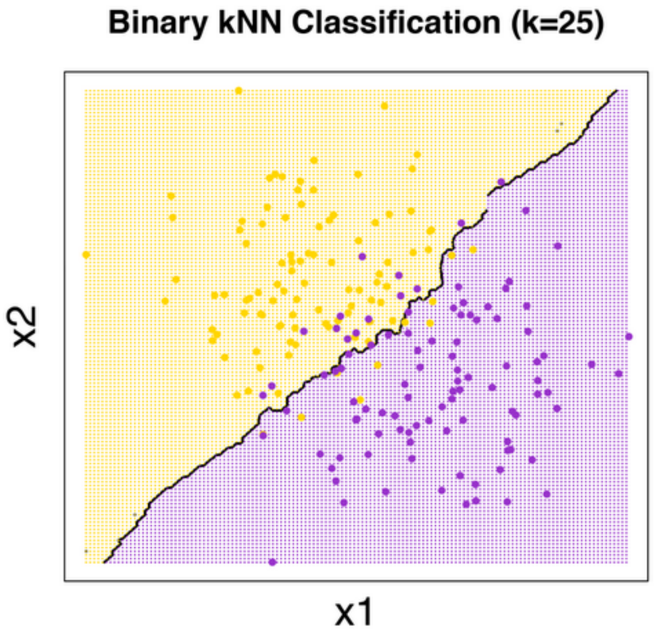
$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{\boldsymbol{k}} [y_{(i)} = y]$$

- k — гиперпараметр алгоритма
- Подбирается с помощью holdout-выборки или кросс-валидации
- Чем больше k, тем проще разделяющая поверхность

Выбор числа соседей

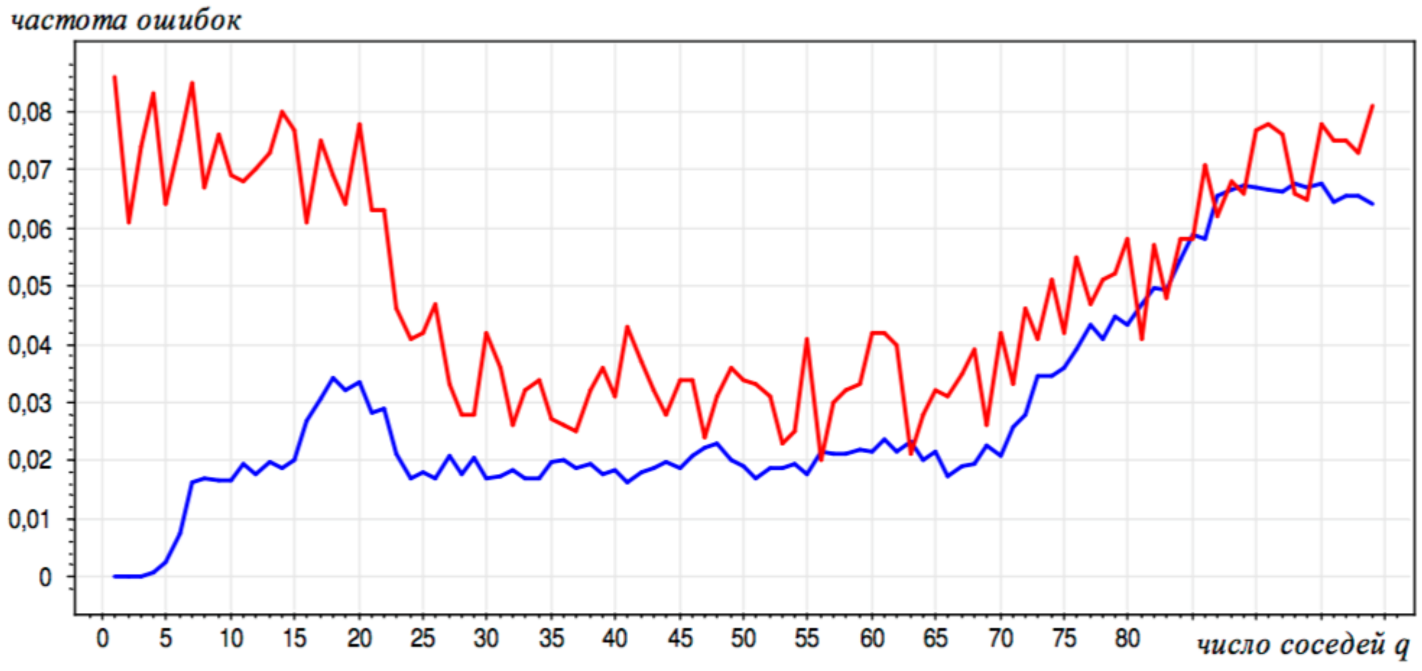




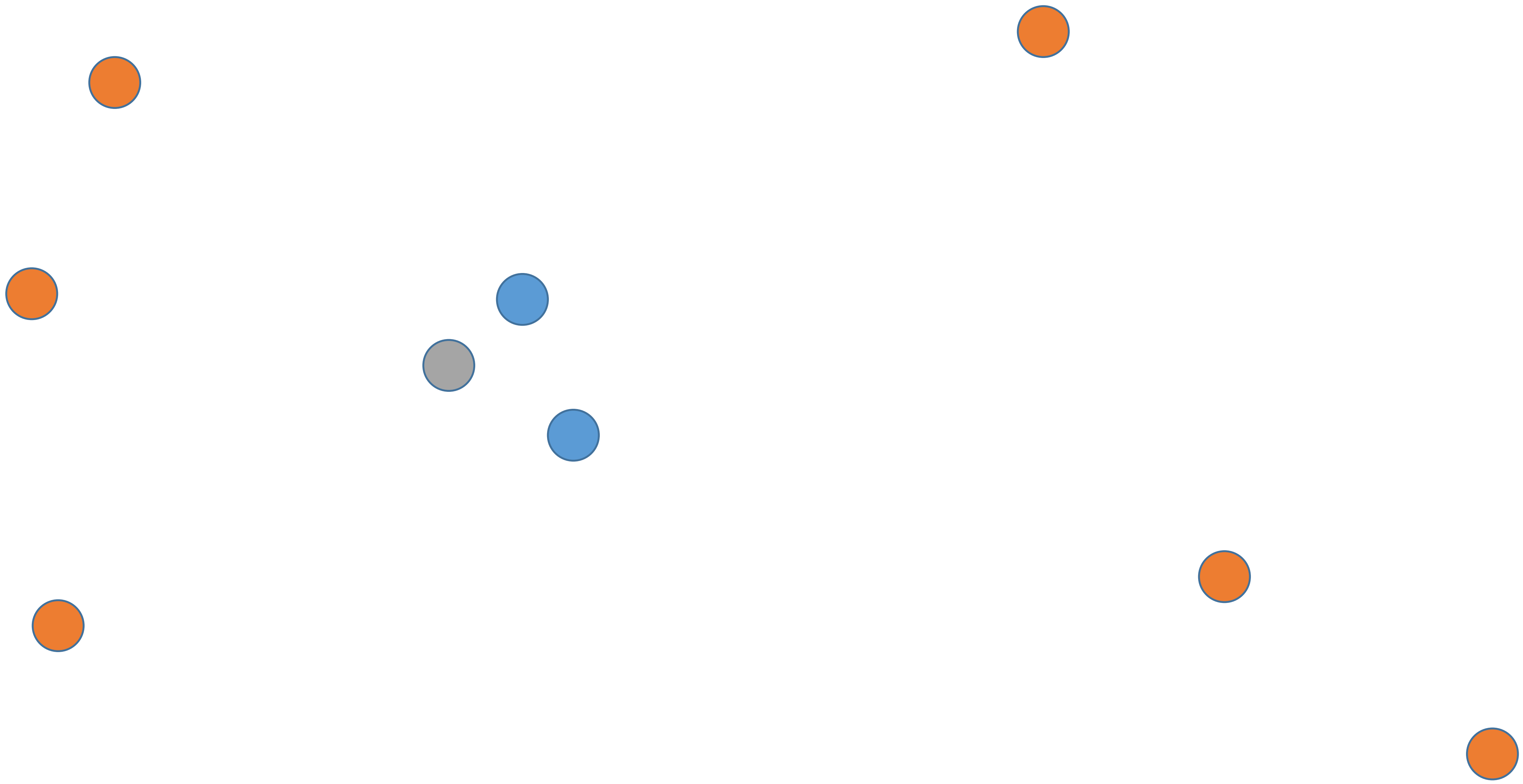


Выбор числа соседей

- Синий — ошибка на обучении
- Красный — ошибка на кросс-валидации



Проблема kNN



Проблема kNN

- Никак не учитываются расстояния до k ближайших соседей
- Более близкие соседи должны быть важнее

kNN с весами

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{k} w_i [y_{(i)} = y]$$

Варианты:

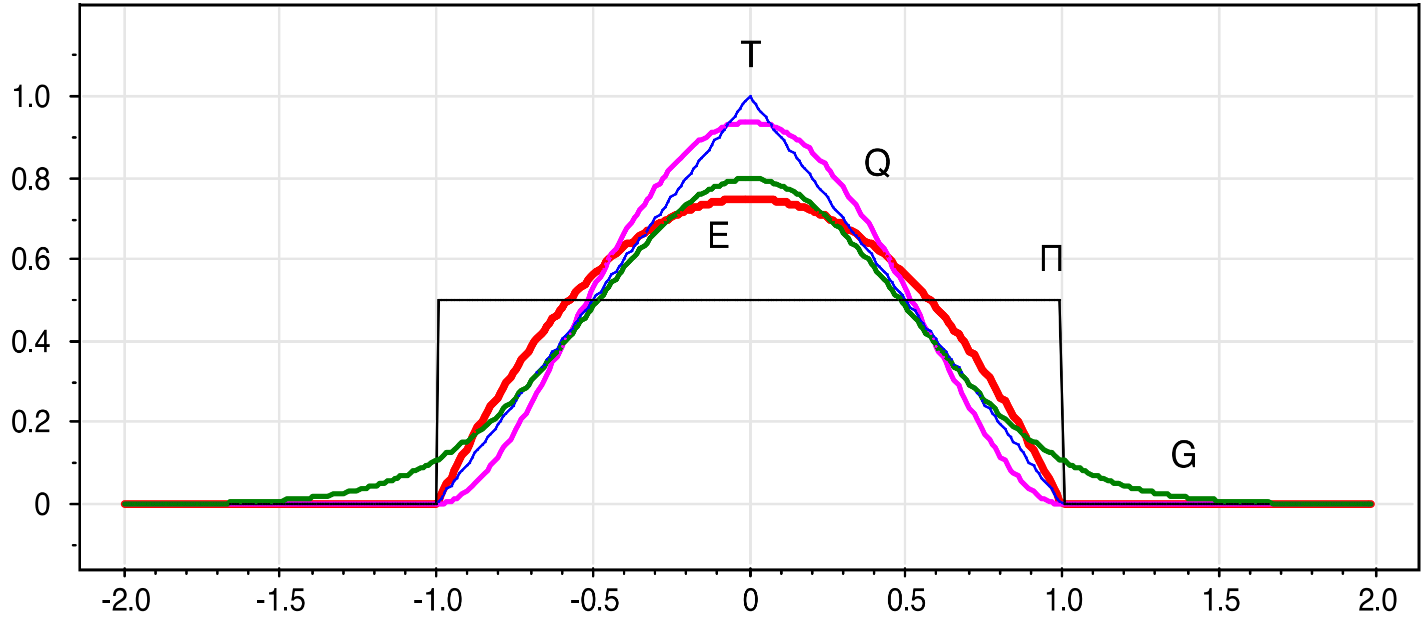
- $w_i = \frac{k+1-i}{k}$
- $w_i = q^i$
- Не учитывают сами расстояния

kNN с весами

$$a(x) = \arg\max_{y \in \mathbb{Y}} \sum_{i=1}^{k} w_i [y_{(i)} = y]$$

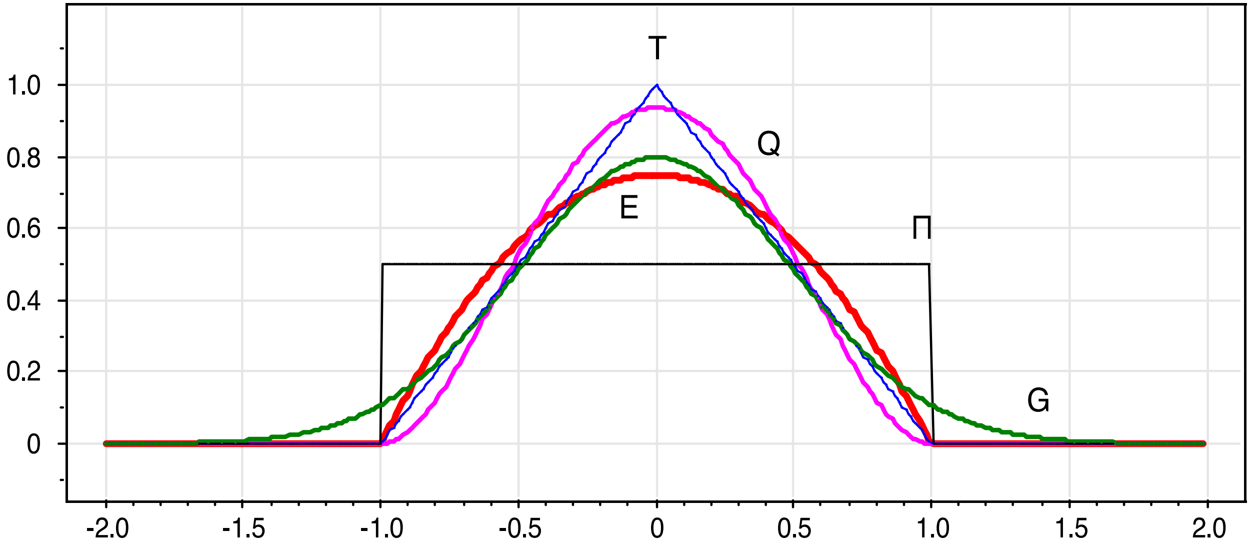
Парзеновское окно:

- $w_i = K\left(\frac{\rho(x, x_{(i)})}{h}\right)$
- K — ядро
- h — ширина окна

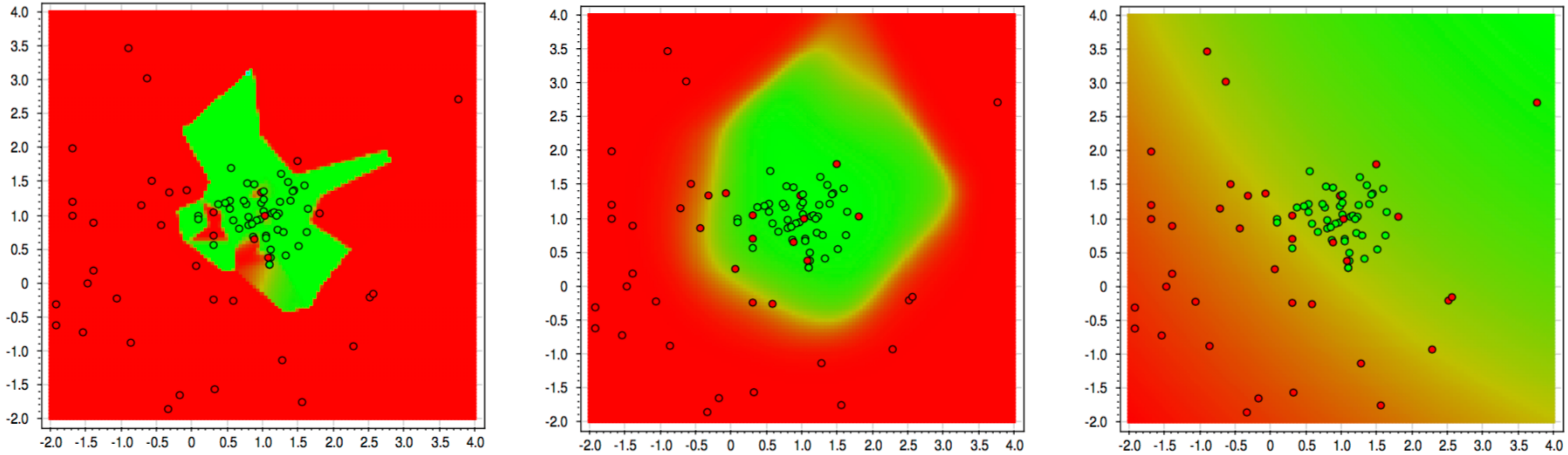


Ядра

- Гауссовское ядро: $K(z) = (2\pi)^{-0.5} \exp\left(-\frac{1}{2}z\right)$
- И много других



Ядра



$h = 0.05$ $h = 0.5$ $h = 5$

Особенности kNN

- Обучение как таковое отсутствует — нужно лишь запомнить обучающую выборку
- Для применения модели необходимо вычислить расстояния от нового объекта до всех обучающих объектов
- Применение требует ℓd операций
- Существуют специальные методы для поиска ближайших соседей