

Решение теоретических заданий
Вычислительная математика (пилотный курс)

Коцевич Андрей Витальевич, группа Б02-920

5 семестр, 2021

А. Анализ эмпирических данных

В папках А2 и А3 было 2 листика с домашним заданием. Я выбирал те, где задач больше.

А2

1. Пусть дана выборка точек y_i . Решите задачу МНК, моделируя данные постоянной величиной \tilde{y} , что отвечает минимизации функции потерь

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^l (y_i - \tilde{y})^2 \rightarrow \min_{\tilde{y}} \quad (1)$$

Решение.

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \tilde{y}} = -2 \sum_{i=1}^l (y_i - \tilde{y}) = 0 \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^l y_i - l\tilde{y} = 0 \quad (3)$$

$$\boxed{\tilde{y} = \frac{\sum_{i=1}^l y_i}{l} = \bar{y}} \quad (4)$$

2. Покажите, что прямая, построенная по методу МНК, всегда проходит через точку (\bar{x}, \bar{y}) , где \bar{x} и \bar{y} – выборочные средние. Обобщите на случай многомерной регрессии.

Решение.

Линейная регрессия:

$$g_w(x) = xw + b \quad (5)$$

Формула МНК:

$$b = \bar{y} - w\bar{x} \quad (6)$$

$$g_w(x) = xw + \bar{y} - w\bar{x} = w(x - \bar{x}) + \bar{y} \rightarrow \boxed{g_w(\bar{x}) = \bar{y}} \quad (7)$$

По аналогии, в случае многомерной регрессии гиперплоскость, построенная по методу МНК, всегда проходит через точку $(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n, \bar{y}_1, \dots, \bar{y}_m)$.

5. На лекции обсуждалось, что метод наименьших квадратов – это способ поставить задачу о решении переопределенной системы $Xw = y$, которая имеет явный ответ, выражающийся через левую псевдообратную матрицу для X . Для недоопределенной системы $Xw = y$ (имеющей бесконечно много решений) можно поставить задачу о поиске решения с минимальной l_2 -нормой весов $\|w\|^2 = w^T w$. Решите такую задачу и покажите, что ответ выражается через правую псевдообратную матрицу для X . Считайте, что прямоугольная матрица X имеет полный ранг (максимально возможный).

Решение. Для поиска решения с минимальной l_2 -нормой весов $\|w\|^2 = w^T w$ (условного экстремума) воспользуемся методом множителей Лагранжа:

$$\mathcal{L} = \lambda^T (Xw - y) + w^T w \rightarrow \min_w |_{w \rightarrow \min} \quad (8)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \lambda} = (Xw - y)^T = 0 \rightarrow y = Xw \quad (9)$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial w} = \lambda^T X + 2w^T = 0 \rightarrow w^T = -\frac{1}{2}\lambda^T X \quad (10)$$

Транспонируем левую и правую части:

$$w = -\frac{1}{2}X^T \lambda \quad (11)$$

$$y = Xw = -\frac{1}{2}XX^T \lambda \rightarrow \lambda = -2(XX^T)^{-1}y \quad (12)$$

$$\lambda = -2(X^{-1})^T X^{-1}y = -2(XX^T)^{-1}y \quad (13)$$

Отсюда получаем

$$\boxed{w = X^T(XX^T)^{-1}y} \quad (14)$$

где $R = X^T(XX^T)^{-1}$ – правая псевдообратная матрица.

7. На лекции обсуждался учет влияния систематической погрешности путем усреднения решения задачи МНК по гауссовому нормальному распределению для y -координат точек выборки: $\tilde{y}_i \sim \mathcal{N}(y_i, s^2)$, где погрешность по оси ординат считалась равной s . Обобщите этот вывод на случай, когда каждая точка имеет свою y -погрешность s_i . Для этого проведите усреднение по многомерному нормальному распределению для \tilde{y}_i с произвольной симметричной матрицей ковариации A^{-1} :

$$\tilde{y} \sim \frac{1}{(2\pi)^{\frac{l}{2}} \sqrt{\det A}} \exp \left(-\frac{(\tilde{y} - y)^T A^{-1}(\tilde{y} - y)}{2} \right), \quad (15)$$

где $y = (y_1, \dots, y_l)^T$, а $\tilde{y} = (\tilde{y}_1, \dots, \tilde{y}_l)^T$.

1. Покажите, что распределение правильно нормированно. Указание: Выполните замену координат $\tilde{y} - y = Sz$, где матрица S диагонализует A .
2. Вычислите неприводимые парные корреляторы $\ll \tilde{y}_i \tilde{y}_j \gg$, усредняя по распределению. Указание: Сделайте замену $\tilde{y} - y = Y$. Для вычисления гауссового интеграла с предэкспонентой вычислите интеграл $\int d^l Y \exp(-Y^T A^{-1} Y / 2 + J^T Y)$ и выполните дифференцирование по параметрам J_i (компоненты вектора J).
3. Оцените погрешности параметров модели w_α , следуя вычислению, приведенному на лекции, и используя корреляторы, полученные в предыдущем пункте.
4. Запишите решение в частном случае диагональной матрицы $A = \text{diag}(A_1, \dots, A_l)$. Как следует выбирать величины A_i для моделирования y -погрешности i -ой точки, равной s_i ?

Решение.

1. Поскольку матрица A^{-1} симметрична, то $\exists S : S^T A^{-1} S = E$ и $\det S = \sqrt{\det A}$. Выполним замену координат $\tilde{y} - y = Sz$.

$$\int \tilde{y} d^l \tilde{y} = \frac{\det S}{(2\pi)^{\frac{l}{2}} \sqrt{\det A}} \int d^l z \exp \left(-\frac{zz^T}{2} \right) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{l}{2}}} (2\pi)^{\frac{l}{2}} = 1 \quad (16)$$

Распределение правильно нормированно.

2. Сделаем замену $\tilde{y} - y = Y$.

$$\ll \tilde{y}_i \tilde{y}_j \gg = \langle (\tilde{y}_i - y_i)(\tilde{y}_j - y_j) \rangle = \langle Y_i Y_j \rangle \quad (17)$$

Обозначим интеграл с током

$$\begin{aligned} I_J &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{l}{2}} \sqrt{\det A}} \int d^l Y \exp \left(-\frac{Y^T A^{-1} Y}{2} + J^T Y \right) = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{l}{2}} \sqrt{\det A}} \int d^l Y \exp \left(-\frac{(Y - AJ)^T A^{-1} (Y - AJ)}{2} + \frac{(AJ)^T A^{-1} AJ}{2} \right) = \\ &= \exp \left(\frac{J^T A^T J}{2} \right) = \exp \left(\frac{J^T A J}{2} \right), \end{aligned} \quad (18)$$

поскольку A – симметричная.

$$\frac{\partial I_J}{\partial J_i} \Big|_{J=0} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{l}{2}} \sqrt{\det A}} \int d^l Y Y_i \exp \left(-\frac{Y^T A^{-1} Y}{2} \right) = \langle Y_i \rangle = 0 \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 I_J}{\partial J_i \partial J_j} \Big|_{J=0} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{l}{2}} \sqrt{\det A}} \int d^l Y Y_i Y_j \exp \left(-\frac{Y^T A^{-1} Y}{2} \right) = \langle Y_i Y_j \rangle \quad (20)$$

$$\frac{\partial^2 I_J}{\partial J_i \partial J_j} \Big|_{J=0} = A_{ij} \quad (21)$$

Таким образом, неприводимые парные корреляторы

$$\boxed{\ll \tilde{y}_i \tilde{y}_j \gg = A_{ij}} \quad (22)$$

3.

$$w = Qy, \quad Q = (X^T X)^{-1} X^T \quad (23)$$

В индексных обозначениях:

$$w_\alpha = Q_{\alpha i} y_i, \quad \tilde{w}_\alpha = Q_{\alpha i} \tilde{y}_i \quad (24)$$

$$\text{var} \tilde{w}_\alpha = \ll \tilde{w}_\alpha \tilde{w}_\alpha \gg = Q_{\alpha i} Q_{\alpha j} \ll \tilde{y}_i \tilde{y}_j \gg = Q_{\alpha i} Q_{\alpha j} A_{ij} \quad (25)$$

$$\boxed{\text{var} \tilde{w}_\alpha = (Q A Q^T)_{\alpha\alpha}} \quad (26)$$

4. Из предыдущего пункта:

$$\boxed{\text{var} \tilde{w}_\alpha = \sum_{i=1}^n Q_{\alpha i}^2 A_i} \quad (27)$$

Для моделирования y -погрешности i -ой точки, равной s_i , нужно выбрать A_i :

$$\boxed{A_i = \ll \tilde{y}_i \tilde{y}_i \gg = s_i^2} \quad (28)$$

Необязательное дополнение. Случай линейной регрессии:

$$X = \begin{pmatrix} x_1 & 1 \\ \dots & \dots \\ x_l & 1 \end{pmatrix}, \quad Q = (X^T X)^{-1} X^T = \frac{1}{l(\text{var}x)^2} \begin{pmatrix} x_1 - \bar{x} & \dots & x_l - \bar{x} \\ \bar{x}^2 - \bar{x}x_1 & \dots & \bar{x}^2 - \bar{x}x_l \end{pmatrix} \quad (29)$$

$$\text{var}\tilde{w}_1 = \frac{1}{l(\text{var}x)^2} \left(\overline{x^2 A^2} - 2\bar{x}\overline{x A^2} + \bar{x}^2 \overline{A^2} \right), \quad \text{var}\tilde{w}_0 = \frac{1}{l(\text{var}x)^2} \left(\overline{x^2^2 A^2} - 2\bar{x}\overline{x^2 A^2} + \bar{x}^2 \overline{x^2 A^2} \right)$$

$$\text{var}\tilde{w}_1 = \frac{1}{l(\hat{\text{var}}x)^2} \left(\overline{x^2 s^2} - 2\bar{x}\overline{x s^2} + \bar{x}^2 \overline{s^2} \right), \quad \text{var}\tilde{w}_0 = \frac{1}{l(\hat{\text{var}}x)^2} \left(\overline{x^2^2 s^2} - 2\bar{x}\overline{x^2 s^2} + \bar{x}^2 \overline{x^2 s^2} \right)$$

(30)

При $s_i = s = \text{const}$ получаем формулы с лекции:

$$\text{var}\tilde{w}_1 = \frac{s^2}{l\hat{\text{var}}x}, \quad \text{var}\tilde{w}_0 = \frac{s^2 \bar{x}^2}{l\hat{\text{var}}x} \quad (31)$$

А3

1. Пусть дана выборка точек на прямой $\{x_i\}$. Максимизируйте правдоподобие (или его логарифм) в гауссовой вероятностной модели:

$$\prod_i p(x_i) \rightarrow \max_{\mu, \sigma}, \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (32)$$

Решение. Пусть при измерении величины μ мы получили выборку $\{x_i\}$. Плотность вероятности того, что величина μ примет значение x_i :

$$p(x_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (33)$$

Плотность вероятности того, что величина μ примет значения x_1, \dots, x_n :

$$p(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\right)^n \exp\left(-\sum_{i=1}^n \frac{(x_i-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (34)$$

Логарифм правдоподобия:

$$\log p(x_1, \dots, x_n) = -\frac{n}{2} \log(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 \quad (35)$$

Условия максимума правдоподобия:

$$\frac{\partial(\log p(x_1, \dots, x_n))}{\partial \mu} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)}{\sigma^2} = 0 \rightarrow \hat{\mu} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} = \bar{x}_i \quad (36)$$

$$\frac{\partial(\log p(x_1, \dots, x_n))}{\partial \sigma} = -\frac{n}{\sigma} + \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}{\sigma^3} = 0 \rightarrow \hat{\sigma}^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2}{n} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n} \quad (37)$$

$\hat{\sigma}^2 = \hat{\text{var}} x$

(38)

2. Количество срабатываний счетчика Гейгера за минуту n подчиняется распределению Пуассона:

$$P_\lambda(n) = \frac{\lambda^n}{n!} e^{-\lambda} \quad (39)$$

1. В ходе эксперимента счетчик Гейгера сработал за минуту m раз. С помощью теоремы Байеса определите апостериорное распределение на λ . Указание: априорную плотность вероятности λ можно считать постоянной (так как мы изначально ничего не знаем про λ).
2. Эксперимент повторили ещё раз, в этот раз счетчик Гейгера сработал за минуту m' раз. Как обновилось апостериорное распределение на λ ?

Решение.

1. $P(\lambda) = P_0 = \text{const}$ – априорное распределение, $P(\lambda|m)$ – апостериорное. По теореме Байеса:

$$P(\lambda|m) = \frac{P(m|\lambda)P(\lambda)}{P(m)} = \frac{P(m|\lambda)P(\lambda)}{\int d\lambda P(m|\lambda)P(\lambda)} = \frac{P_\lambda(m)}{\int_0^\infty d\lambda P_\lambda(m)} = P_\lambda(m) \quad (40)$$

$$\boxed{P(\lambda|m) = \frac{\lambda^m}{m!} e^{-\lambda}} \quad (41)$$

2. Теперь $P(\lambda) = P(\lambda|m) = P_\lambda(m)$ – априорное распределение, $P(\lambda|m, m')$ – апостериорное. По теореме Байеса:

$$P(\lambda|m, m') = \frac{P(m'|\lambda)P(\lambda)}{P(m')} = \frac{P(m'|\lambda)P(\lambda)}{\int d\lambda P(m'|\lambda)P(\lambda)} = \frac{P_\lambda(m')P_\lambda(m)}{\int_0^\infty d\lambda P_\lambda(m')P_\lambda(m)} \quad (42)$$

$$\boxed{P(\lambda|m, m') = \frac{2^{1+m+m'} \lambda^{m+m'}}{(m+m')!} e^{-2\lambda}} \quad (43)$$

3. Ультрчувствительный тест от коронавируса ошибается в 1% случаев (как в одну, так и в другую сторону). В данный момент в популяции доля заболевших 10^{-5} . Петя получил положительный тест на коронавирус. С какой вероятностью он действительно болеет коронавирусом?

Решение. Обозначим через событие A – болезнь коронавирусом, через B – положительный результат теста. Тогда

$$P(A) = 10^{-5}, \quad P(B|A) = 0,99, \quad P(B|\neg A) = 0,01 \quad (44)$$

По теореме Байеса:

$$P(A|B) = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B)} = \frac{P(B|A)P(A)}{P(B|A)P(A) + P(B|\neg A)P(\neg A)} \quad (45)$$

$$\boxed{P(A|B) = \frac{0,99 \cdot 10^{-5}}{0,99 \cdot 10^{-5} + 0,01 \cdot (1 - 10^{-5})} = 9,89 \cdot 10^{-4}} \quad (46)$$

Как видно, Пете следует сделать повторный тест.

4. Пусть имеется априорное распределение на вектор \vec{x} , задаваемое матрицей A :

$$p_0(\vec{x}) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\vec{x}^T A \vec{x}}{2}} \quad (47)$$

Было произведено измерение величин \vec{x} , которое дало значение \vec{x}_1 . Найдите апостериорное распределение на \vec{x} .

Решение.

Распишем априорное распределение на вектор \vec{x} :

$$p_0(\vec{x}) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\sum_{i,j=1}^n x_i A_{ij} x_j}{2}} = \frac{1}{Z} \prod_{i,j=1}^n e^{-\frac{x_i A_{ij} x_j}{2}} \quad (48)$$

$P(A) = P_0 = \text{const}$ – априорное распределение A , $P(A|\vec{x}_1)$ – апостериорное. По теореме Байеса:

$$P(A|\vec{x}_1) = \frac{P(\vec{x}_1|A)P(A)}{P(\vec{x}_1)} = \frac{P(\vec{x}_1|A)P(A)}{\int_{-\infty}^{\infty} P(\vec{x}_1|A)P(A)dA} = \frac{\prod_{i,j=1}^n e^{-\frac{x_{1i}A_{ij}x_{1j}}{2}} P_0}{\prod_{i,j=1}^n \int_0^{\infty} e^{-\frac{x_{1i}A_{ij}x_{1j}}{2}} P_0 dA_{ij}} \quad (49)$$

$$P(A|\vec{x}_1) = \frac{\prod_{i,j=1}^n e^{-\frac{x_{1i}A_{ij}x_{1j}}{2}}}{\prod_{i,j=1}^n \frac{2}{x_{1i}x_{1j}}} = \frac{\prod_{i=1}^n x_{1i}^{n^2}}{2^{n^2}} e^{-\frac{\sum_{i,j=1}^n x_{1i}A_{ij}x_{1j}}{2}} \quad (50)$$

Апостериорное распределение на \vec{x} :

$$P(\vec{x}) = \int_0^{\infty} P(\vec{x}|A)P(A|\vec{x}_1)dA = \frac{\prod_{i=1}^n x_{1i}^{n^2}}{2^{n^2}Z} \prod_{i,j=1}^n \int_0^{\infty} e^{-\frac{x_i A_{ij} x_j}{2}} e^{-\frac{x_{1i} A_{ij} x_{1j}}{2}} dA_{ij} \quad (51)$$

$$P(\vec{x}) = \frac{\prod_{i=1}^n x_{1i}^{n^2}}{Z} \prod_{i,j=1}^n \frac{1}{x_i x_j + x_{1i} x_{1j}} \quad (52)$$

7. Покажите, что задача минимизации квадратичной функции потерь с дополнительным ограничением (лассо Тибширани):

$$\mathcal{L} = \|Xw - y\|^2 \rightarrow \min_w, \quad \sum_{\alpha} |w_{\alpha}| < C \quad (53)$$

эквивалентна L_1 -регуляризации. *Указание:* можно воспользоваться условиями Каруша-Куна-Таккера (обобщение метода Лагранжа).

Доказательство. Для исследования дополнительного ограничения в задаче минимизации квадратичной функции потерь (лассо Тибширани) воспользуемся множителем Лагранжа μ :

$$\mathcal{L}' = \|Xw - y\|^2 + \mu \left(\sum_{\alpha} |w_{\alpha}| - C \right) \quad (54)$$

Достаточные условия Каруша - Куна - Таккера:

$$\begin{cases} \min_w \mathcal{L}'(w) = \mathcal{L}'(\hat{w}), \\ \mu \left(\sum_{\alpha} |\hat{w}_{\alpha}| - C \right) = 0, \\ \mu > 0 \end{cases} \quad (55)$$

L_1 -регуляризация:

$$\mathcal{L}'' = \|Xw - y\|^2 + \mu \sum_{\alpha} |w_{\alpha}| \rightarrow \min_w \quad (56)$$

Решение задачи минимизации удовлетворяет L_1 -регуляризации, поскольку при выполнении условий Каруша - Куна - Таккера при $w_a = \hat{w}_a$: $\mathcal{L}'' = \mu C \rightarrow$ достигает минимума. Обратно, устремление к минимуму \mathcal{L}'' при L_1 -регуляризации приводит к условиям Каруша-Куна-Таккера. \square

8.* Bias-Variance decomposition

Воспользуемся вероятностной моделью данных, в которой предполагается, что каждый элемент выборки не зависимо от других поступает из распределения $p(x, y)$. Тогда вероятность получить какой-то конкретный набор данных $(X_l, y_l) = (x_1, \dots, x_l; y_1, \dots, y_l)$ в обучающей выборке равна $p(X_l, y_l) = \prod_{i=1}^l p(x_i, y_i)$. В дальнейшем будем обозначать как (x, y) элемент тестовой выборки, который не входит в (X_l, y_l) .

В выбранной модели $\check{y} = g_{\theta}(x)$ параметры θ определяются с помощью фиттирования по обучающей выборке: $\theta = \theta(X_l, y_l)$, поэтому \check{y} зависит от x , X_l и y_l . Тогда формальное выражение для функции потерь (соответствующее пределу бесконечной большой тестовой выборки) можно записать как

$$L = \mathbb{E}_{X_l, y_l} [\mathbb{E}_{x, y} (y - \check{y})^2] \quad (57)$$

В этом выражении квадратичная функция потерь усредняется по элементу тестовой выборки (x, y) и по обучающей выборке (X_l, y_l) .

Покажите, что справедливо разложение этой величины на шум, смещение и разброс:

$$L = \mathbb{E}_{x, y} (y - \mathbb{E}(y|x))^2 + \mathbb{E}_{x, y} (\mathbb{E}_{X_l, y_l}(\check{y}) - \mathbb{E}(y|x))^2 + \mathbb{E}_{x, y} (\mathbb{E}_{X_l, y_l}(\check{y} - \mathbb{E}_{X_l, y_l}(\check{y}))^2) \quad (58)$$

где $\mathbb{E}_{x, y} (y - \mathbb{E}(y|x))^2$ – noise, $\mathbb{E}_{x, y} (\mathbb{E}_{X_l, y_l}(\check{y}) - \mathbb{E}(y|x))^2$ – bias, $\mathbb{E}_{x, y} (\mathbb{E}_{X_l, y_l}(\check{y} - \mathbb{E}_{X_l, y_l}(\check{y}))^2)$ – variance. *Указание:* сначала покажите, что

$$\mathbb{E}_{x, y} (y - \check{y})^2 = \mathbb{E}_{x, y} (y - \mathbb{E}(y|x))^2 + \mathbb{E}_{x, y} (\mathbb{E}(y|x) - \check{y})^2 \quad (59)$$

Доказательство. Пусть $y = f(x) + \varepsilon$ – функция с шумом, где шум ε имеет $\mathbb{E}(\varepsilon) = 0$ и $\text{var } \varepsilon = \mathbb{E}_{x, y} (y - \mathbb{E}(y|x))^2$.

$$\mathbb{E}_{x, y} y = \mathbb{E}_{x, y} (f(x) + \varepsilon) = \mathbb{E}_{x, y} (f(x)) = f(x) \quad (60)$$

$$\text{var } y = \mathbb{E}_{x, y} (y - \mathbb{E}_{x, y}(y))^2 = \mathbb{E}_{x, y} (y - f)^2 = \mathbb{E}_{x, y} \varepsilon^2 = (\mathbb{E}_{x, y} \varepsilon)^2 + \text{var } \varepsilon = \text{var } \varepsilon \quad (61)$$

Поскольку ε и f независимы, то запишем

$$\mathbb{E}_{x, y} (y - \check{y})^2 = \mathbb{E}_{x, y} (y^2 + \check{y}^2 - 2y\check{y})^2 = \text{var } y + \mathbb{E}_{x, y} y^2 + \text{var } \check{f} + \mathbb{E}_{x, y} \check{f}^2 - 2f\mathbb{E}_{x, y} \check{y} \quad (62)$$

$$\mathbb{E}_{x, y} (y - \check{y})^2 = \text{var } y + \text{var } \check{f} + (f^2 - 2f\mathbb{E}_{x, y} \check{y} + \mathbb{E}_{x, y} \check{y}^2) = \text{var } y + \text{var } \check{y} + (f - \mathbb{E}_{x, y} \check{y})^2 \quad (63)$$

где 1 слагаемое – прообраз noise, второе – variance, третье – bias. Усредняя также по обучающей выборке, получаем требуемое. \square

A4

2. Пусть X – матрица объект-признак (размерность $l \times F$), для которой сингулярное разложение имеет вид $X = V\sqrt{\Lambda}U^T$. После понижения размерности данных с помощью метода главных компонент, в диагональной матрице $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_F\}$ оставляются только \tilde{F} наибольших сингулярных чисел: $\tilde{\Lambda} = \text{diag}\{\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_{\tilde{F}}\}$. При этом данные, как правило, можно восстановить только с некоторой ошибкой: $\tilde{X} = V\sqrt{\tilde{\Lambda}}U^T \neq X$. Покажите, что L_2 норма ошибки выражается через сумму по оставшимся сингулярным числам:

$$\frac{1}{l} \|X - \tilde{X}\|^2 = \sum_{i=\tilde{F}+1}^F \lambda_i \quad (64)$$

Доказательство.

$$X = V\sqrt{\Lambda}U^T, \quad \tilde{X} = V\sqrt{\tilde{\Lambda}}U^T \quad (65)$$

$$X - \tilde{X} = V \left(\sqrt{\Lambda} - \sqrt{\tilde{\Lambda}} \right) U^T \quad (66)$$

$$\begin{aligned} \|X - \tilde{X}\|^2 &= \text{Tr}((X - \tilde{X})(X - \tilde{X})^T) = \text{Tr} \left(V \left(\sqrt{\Lambda} - \sqrt{\tilde{\Lambda}} \right) U^T \left(V \left(\sqrt{\Lambda} - \sqrt{\tilde{\Lambda}} \right) U^T \right)^T \right) = \\ &= \text{Tr} \left(V \left(\sqrt{\Lambda} - \sqrt{\tilde{\Lambda}} \right) U^T U \left(\sqrt{\Lambda} - \sqrt{\tilde{\Lambda}} \right)^T V^T \right) = \text{Tr} \left(\left(\sqrt{\Lambda} - \sqrt{\tilde{\Lambda}} \right) \left(\sqrt{\Lambda} - \sqrt{\tilde{\Lambda}} \right)^T \right) \end{aligned} \quad (67)$$

$$\boxed{\|X - \tilde{X}\|^2 = \sum_{i=\tilde{F}+1}^F \lambda_i} \quad (68)$$

□

3. Покажите, что сингулярный вектор матрицы X , отвечающий наибольшему сингулярному числу, является решением задачи

$$\vec{u} = \text{argmax}_{\|\vec{u}\|=1} (X\vec{u})^2 \quad (69)$$

где подразумевается матричное умножение X на \vec{u} .

Доказательство. Сингулярное разложение:

$$X = V\sqrt{\Lambda}U^T, \quad \sqrt{\Lambda} = \text{diag}\{\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_F\} \quad (70)$$

$$XU = V\sqrt{\Lambda} \rightarrow X\vec{u} = \sqrt{\lambda}\vec{v} \quad (71)$$

Как видно, максимум $(X\vec{u})^2$ достигается при максимальном $\lambda = \lambda_1$, этому сингулярному числу соответствует вектор \vec{u} , удовлетворяющий

$$\boxed{\vec{u} = \text{argmax}_{\|\vec{u}\|=1} (X\vec{u})^2} \quad (72)$$

□

4. Пусть дан набор точек на плоскости (x_i, y_i) , для которых выборочные средние x_i и y_i равны нулю. Покажите, что сингулярный вектор для матрицы объект-признак, отвечающий наибольшему сингулярному числу, задаёт прямую a (проходящую через начало координат), которая является решением следующей задачи оптимизации:

$$L' = \sum_{i=1}^N \text{distance}^2[(x_i, y_i); a] \rightarrow \min_a \quad (73)$$

где $\text{distance}[(x_i, y_i); a]$ – расстояние от точки (x_i, y_i) до прямой a (равное длине перпендикуляра).

Обратите внимание, что такая задача отличается от задачи МНК, в которой расстояние от точки до аппроксимирующей прямой вычисляется не по перпендикуляру, а вдоль оси y , отвечающей целевой переменной.

Доказательство. По теореме Пифагора:

$$\sum_{i=1}^N \text{distance}^2[(x_i, y_i); a] = \sum_{i=1}^N (r_i^2 - (\vec{r}_i, \vec{a})^2) \rightarrow \min_a \quad (74)$$

где \vec{r}_i – радиус-вектор i -й точки. $\sum_{i=1}^N r_i^2$ фиксирована и не зависит от направления прямой, поэтому

$$\sum_{i=1}^N (\vec{r}_i, \vec{a})^2 = (X\vec{a})^T (X\vec{a}) = (X\vec{a})^2 \rightarrow \max_a \quad (75)$$

где столбцы матрицы X – векторы \vec{r}_i . Из предыдущей задачи известно, что максимум достигается на сингулярном векторе \vec{a} , отвечающем наибольшему сингулярному числу. \square

5. Пусть дан набор из N точек в трёхмерном пространстве $X_{i\alpha}, i \in \{1, \dots, N\}, \alpha \in \{1, 2, 3\}$. Покажите, что задача нахождения сингулярных чисел матрицы X эквивалентна нахождению главных моментов инерции твёрдого тела, составленного из набора точечных масс, расположенных в точках (X_{i1}, X_{i2}, X_{i3}) (можно представлять себе, что точечные массы соединены между собой невесомыми и абсолютно жёсткими стержнями).

Доказательство. Распишем X :

$$X = \begin{pmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ \dots & \dots & \dots \\ x_l & y_l & z_l \end{pmatrix} \quad (76)$$

$$X^T X \equiv \hat{\text{Cov}} X = \begin{pmatrix} \sum_i x_i^2 & \sum_{i,j} x_i y_j & \sum_{i,j} x_i z_j \\ \sum_{i,j} x_i y_j & \sum_i y_i^2 & \sum_{i,j} y_i z_j \\ \sum_{i,j} x_i z_j & \sum_{i,j} y_i z_j & \sum_i z_i^2 \end{pmatrix} \quad (77)$$

Момент инерции

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} \sum_i y_i^2 + z_i^2 & -\sum_{i,j} x_i y_j & -\sum_{i,j} x_i z_j \\ -\sum_{i,j} x_i y_j & \sum_i x_i^2 + z_i^2 & -\sum_{i,j} y_i z_j \\ -\sum_{i,j} x_i z_j & -\sum_{i,j} y_i z_j & \sum_i x_i^2 + y_i^2 \end{pmatrix} \quad (78)$$

Матрицы $X^T X$ и I диагонализуются совместно. В системе координат, где они обе диагональные, $\sum_{i,j} x_i y_j = 0$. Собственные числа $X^T X$ (которые являются сингулярными числами X) и главные моменты инерции совпадают. \square

В. Численные методы линейной алгебры

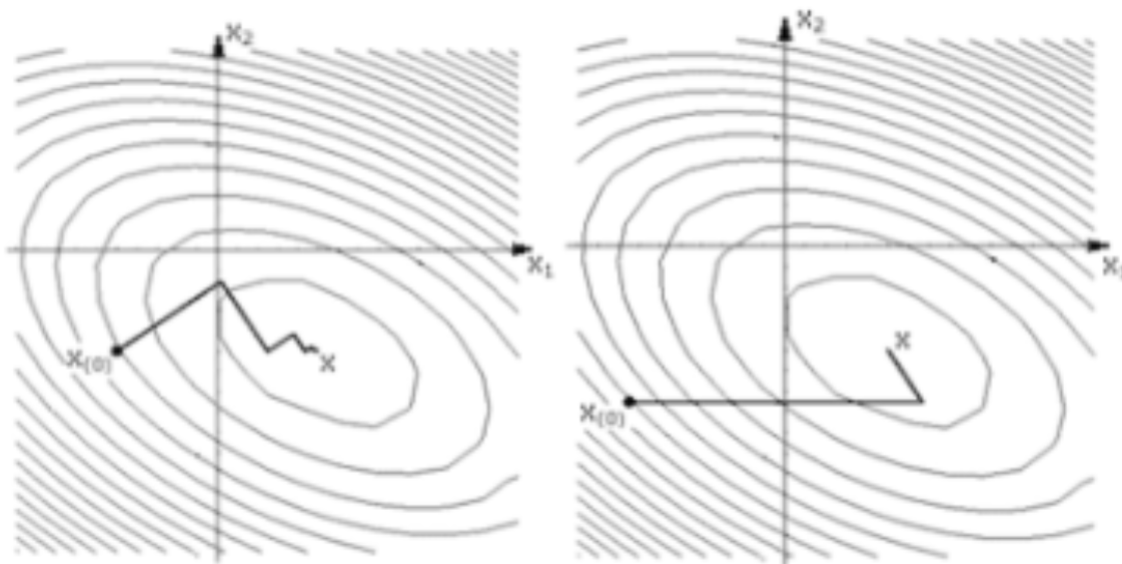
В4

3. Доказать, что при условии наличия диагонального преобладания у матрицы системы метод Зейделя сходится, причем быстрее метода Гаусса–Якоби.

Доказательство. Доказано в конспекте лекции. \square

В5

4. На этих рисунках изображены траектории движения в точку минимума методами сопряжённых градиентов и наискорейшего спуска:



Определите, на каком из них какой из этих двух методов проиллюстрирован. Ответ аргументируйте. Что изображают замкнутые линии? Докажите, что один из этих двух методов (какой?) позволяет решать квадратичные задачи за конечное число шагов. Каково максимально возможное количество этих шагов для матрицы размера n ?

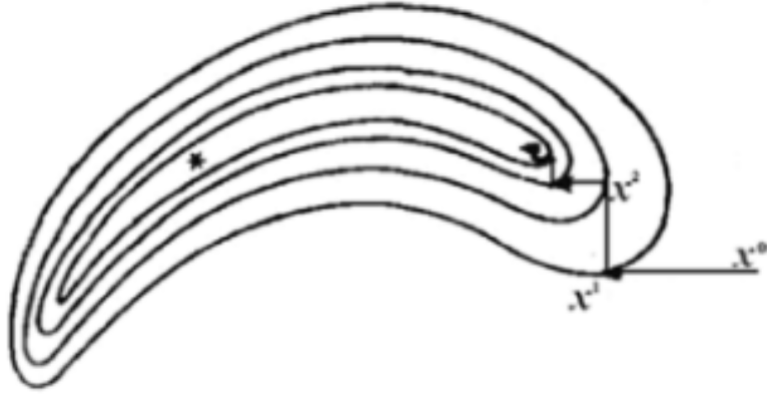
Решение.

На левой картинке каждый шаг перпендикулярен уровням и направлен против направления градиента. Поэтому это метод наискорейшего спуска.

На правой картинке изображён метод сопряжённых градиентов. Каждая новая невязка в этом методе перпендикулярна остальным, следовательно в конечномерном пространстве с n размерностью $n + 1$ невязка нулевая и максимально возможное число шагов n .

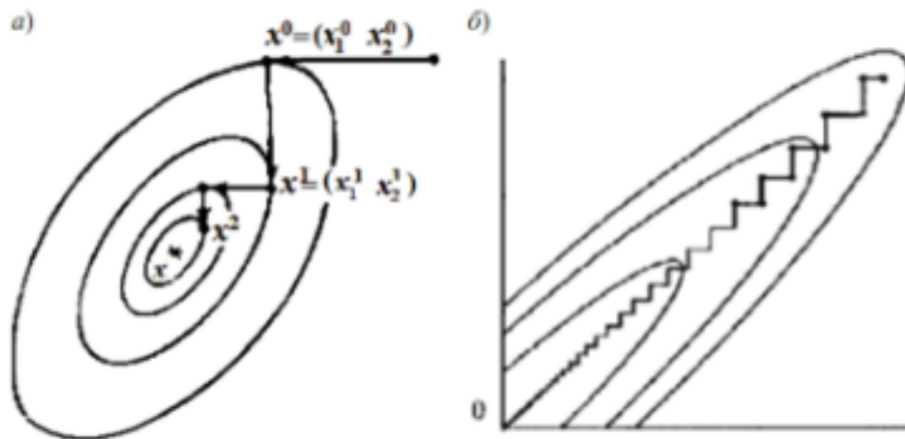
5. Градиентный метод сходится достаточно быстро, если для минимизируемой функции $f(x)$ поверхности уровня близки к сферам (при $n = 2$ – к окружностям). Если же линии уровня сильно вытянуты в каком-то направлении, то по нормали к этому направлению целевая функция меняется значительно быстрее, чем вдоль направления. Такой характер целевой

функции называется овражным. Исходя из рисунка, объясните, почему в этих случаях градиентный метод сходится хуже.



Как связан овражный характер функции с величиной наименьшего сингулярного числа матрицы квадратичной формы? А с величиной числа обусловленности матрицы?

На рисунке ниже изображена работа метода покоординатного спуска для функций овражного характера. Какой вывод можно сделать из этого рисунка?



Решение. Если начальная точка попадает на склон оврага, то направление градиентного спуска оказывается почти перпендикулярным дну оврага и следующее приближение попадает на противоположный склон оврага. Следующий шаг возвращает приближение на первоначальное место. В результате траектория – зигзагообразные скачки, которые почти не приближаются к цели.

Овраг получается при большом числе обусловленности и от минимального сингулярного числа не зависит (только от отношения). Число обусловленности задаёт отношение полуосей оврага.

Из рисунков можно сделать вывод, что если выбрать оси, совпадающие с полуосями оврага, то сходимость будет быстрой.

6. Докажите, что для симметричной невырожденной матрицы A , у которой все собственные числа различны, следующий набор векторов является базисом:

$$v_1 = v, \quad v_2 = Av_1, \quad v_3 = Av_2, \quad \dots, \quad v_m = Av_{m-1} \quad (79)$$

Пространством Крылова называется линейная оболочка этих векторов. Какова размерность подпространства Крылова, если есть одинаковые собственные числа?

Указание: действуя от противного, разложить все слагаемые линейной комбинации этих векторов по базису из собственных векторов симметричной матрицы A .

Доказательство. Разложим вектор v по базису собственных векторов A (они образуют базис, поскольку все собственные значения различные):

$$v = a_1 u_1 + a_2 u_2 + \dots + a_m u_m, \quad Au_i = \lambda_i u_i \quad (80)$$

$$v_2 = Av = a_1 Au_1 + a_2 Au_2 + \dots + a_m Au_m = a_1 \lambda_1 u_1 + a_2 \lambda_2 u_2 + \dots + a_m \lambda_m u_m \quad (81)$$

$$v_{i+1} = A^i v = a_1 A^i u_1 + a_2 A^i u_2 + \dots + a_m A^i u_m = a_1 \lambda_1^i u_1 + a_2 \lambda_2^i u_2 + \dots + a_m \lambda_m^i u_m \quad (82)$$

Матрица перехода:

$$S = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_m \\ a_1 \lambda_1 & a_2 \lambda_2 & \dots & a_m \lambda_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_1 \lambda_1^m & a_2 \lambda_2^m & \dots & a_m \lambda_m^m \end{pmatrix} \quad (83)$$

Векторы v_i являются базисом, если

$$\det S \neq 0 \quad (84)$$

$$\det S = \prod_{i=1}^m a_i \det \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_m \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1^m & \lambda_2^m & \dots & \lambda_m^m \end{pmatrix} \quad (85)$$

Получилась матрица Вандермонда с определителем

$$\det S = \prod_{i=1}^m a_i \prod_{1 \leq j < i \leq m} (\lambda_i - \lambda_j) \quad (86)$$

Если все λ_i разные, то это базис.

Если две лямбды совпадают, то матрица имеет одинаковые строки и её ранг уменьшается на 1. Следовательно, размерность такой линейной оболочки

$$\dim\{v_1, \dots, v_m\} = m - 1 \quad (87)$$

□