Theoretical part:

1.1: Regularization

a) $X \in \mathbb{R}^{m\times d}$, $y \in \mathbb{R}^m$ $\qquad X^TX$ - הפיך

$\hat{w}$ = LS solution, $\hat{w}_\lambda$ = ridge solution $\lambda \geq 0$

$$y = Xw + \varepsilon \quad , \quad \varepsilon_i \overset{iid}{\sim} N(0,\sigma^2) \quad , \quad Bias(\hat{w}) = 0$$

$$E(\hat{w}) = E\left(w + (X^TX)^{-1}X^T\varepsilon\right) = w + (X^TX)^{-1}X^T E(\varepsilon) = w$$

$$\hat{w}_\lambda = (X^TX + \lambda I_d)^{-1}(X^TX)\cdot\hat{w}$$ צ.ל:

בתרגול מצאנו נוסחה סגורה לridge, נשתמש בה באגף השמאלי:

$$\hat{w}_\lambda = \underbrace{(X^TX + \lambda I_d)^{-1}X^Ty}_{} = \arg\min \|Xw - y\|^2 + \lambda\|w\|^2$$

בנוסף ל LS יש נוסחה סגורה מהגדרתו ולכן האגף הימני של המשוואה יוצא:

$$\hat{w} = (X^TX)^{-1}X^Ty$$

$$\Downarrow$$

$$(X^TX + \lambda I_d)^{-1}\overbrace{(X^TX)\cdot(X^TX)^{-1}}^{I_d}X^Ty = \underbrace{(X^TX + \lambda I_d)^{-1}X^Ty}_{}$$

וקיבלנו שוויון בין שני האומדים כנדרש ▨

בסעיף a הראנו ש:

b) $$\hat{w}_x = (X^TX+\lambda I_d)^{-1}(X^TX)\cdot\hat{w}$$

$$E(\hat{w}_x) = E\left[(X^TX+\lambda I_d)^{-1}(X^TX)\cdot\hat{w}\right]$$

$$\overset{\text{מלינאריות התוחלת}}{=} (X^TX+\lambda I_d)^{-1}(X^TX)\cdot E(\hat{w}) \overset{\text{נתון } E(\hat{w})=w}{=} \underbrace{(X^TX+\lambda I_d)^{-1}X^TX\cdot w}$$

ניתן לראות בנוסחה שלכל $\lambda>0$ שנבחר נקבל מטריצה שאינה המטריצה ההופכית של X^TX וכשנכפול אותן נקבל מטריצה שאינה מטריצת היחידה ולכן כשנכפול ב w נקבל וקטור שאינו w

כלומר ה $bias\neq 0$ ולכן $E(\hat{w}_x)\neq w$ אם $\lambda>0$ ▨

c) $$Var(\hat{w}_x) \overset{\text{סעיף } a}{=} Var(A_x\hat{w}) \overset{\text{מהרצאה}}{=} A_x\, Var(\hat{w})\, A_x^T$$

$$\overset{\text{מהרצאה}}{=} A_x \underbrace{\sigma^2}_{\text{סקלר}} (X^TX)^{-1}A_x^T \overset{\text{חוקי מטריצות}}{=} \sigma^2 A_x (X^TX)^{-1} A_x^T$$ כנדרש ▨

d) $$MSE(\hat{x}_x) = E\left[\|\hat{w}_x - w\|^2\right] = E\left[(\hat{w}_x-w)^T(\hat{w}_x-w)\right]$$

$$\overset{\text{שיקולי הסתברות}}{=} \|E(\hat{w}_x-w)\|^2 + E\left(\|\hat{w}_x - E(\hat{w}_x)\|^2\right)$$

bias^2 Var

$$\text{bias}^2(\lambda) = \left(E(\hat{w}_\lambda) - E(\hat{w})\right)^2 = \left((A_\lambda - I)w\right)^2$$

$$\text{Var}(\lambda) = \sigma^2 \, Tr\left(A_\lambda (X^T X)^{-1} A_\lambda^T\right) =$$

סכום השונות
של כל הקורדינטות
על האלכסון

$$\Downarrow$$

$$\boxed{MSE(\hat{x}_\lambda) = \|(A_\lambda - I)w\|^2 + \sigma^2 \, Tr\left(A_\lambda (X^T X)^{-1} A_\lambda^T\right)}$$

e) מאחר והנגזרת של ביטוי השגיאה שלילית ב $\lambda=0$ אז
הפונקציה נמצאת בשיפוע שלילי והגדלת λ תקטין את
ערכה הכללי. זה קורה בגלל שב $\lambda=0$ ה bias אמנם
הכי נמוך אבל ה Variance גבוה וכשמגדילים את λ הירידה
ב Var תשפיע יותר מהעלייה ב bias וזאת בסך הכל כך שהשגיאה
שלילית ולכן האומד הלינארי נכון גם לגבי רגרסיית ridge שעוזרת
תעזור לשפר את השגיאה הכללית,

1.2-

a) $X\in\mathbb{R}^{m\times d}$, $y\in\mathbb{R}^{m}$, $L\in\mathbb{R}^{k\times d}$, X^TX - הפיכה

נרצה למצוא נוסחה סגורה ל $\underset{w\in\mathbb{R}^d}{\arg\min}\left(\|Xw-y\|^2+\|Lw\|^2\right)$

נגזיר את הפונקציה ונשווה ל0 וכך נמצא את המינימום בדומה לפרק בה עשינו בתרגול Ridge.

$$\|Xw-y\|^2+\|Lw\|^2=(Xw-y)^T(Xw-y)+(Lw)^T(Lw)$$

$$\overset{\text{כפל מחוגר}}{=} w^TX^TXw-2y^TXw+y^Ty+w^TL^TLw$$

$$=w^T(X^TXw+L^TLw)-2y^TXw+y^Ty$$

$$=w^T(X^TX+L^TL)w-2y^TXw+y^Ty$$

כעת, נגזור לפי w: $w^TAw=2Aw$, $b^Tw=b$

$$\nabla=2(X^TX+L^TL)w-2X^Ty$$

נשווה ל-0 כדי למצוא מינימום!

$$\cancel{2}(X^TX+L^TL)w=\cancel{2}X^Ty$$

$$\hat{w}_L^{TIK}=\boxed{w=(X^TX+L^TL)^{-1}X^Ty}$$

b)

X^TX לא מובטח להיות הפיכה מאחר והתלות
של y היא ב X^TX+L^TL ולא רק ב X^TX כלומר
כדי שיהיה פתרון אנו צריכים ש X^TX+L^TL תהיה הפיכה
ותנאי זה מתקיים כאשר L^TL היא מטריצת PSD מחיוי
מטריצת. ולכן תנאי זה שהיא חלש יותר מספיק לקיים פתרון.

c)

$$X=\begin{bmatrix}1&2\\3&4\end{bmatrix},\quad y=\begin{bmatrix}5\\6\end{bmatrix}\Rightarrow X^T=\begin{bmatrix}1&3\\2&4\end{bmatrix}$$

$$LS\rightarrow \hat{w}=(X^TX)^{-1}X^Ty$$

i)

$$\hat{w}=\left(\begin{bmatrix}1&3\\2&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1&2\\3&4\end{bmatrix}\right)^{-1}\cdot\begin{bmatrix}1&3\\2&4\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}5\\6\end{bmatrix}$$

$$=\begin{bmatrix}10&14\\14&20\end{bmatrix}^{-1}\cdot\begin{bmatrix}1&3\\2&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5\\6\end{bmatrix}=\frac{1}{200-196}\begin{bmatrix}20&-14\\-14&10\end{bmatrix}\cdot\overbrace{\begin{bmatrix}1&3\\2&4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}5\\6\end{bmatrix}}^{X^Ty}$$

$$=\frac{1}{4}\begin{bmatrix}20&-14\\-14&10\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}23\\34\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5&-\frac{14}{4}\\-\frac{14}{4}&2.5\end{bmatrix}\begin{bmatrix}23\\34\end{bmatrix}=\boxed{\begin{bmatrix}-4\\4.5\end{bmatrix}}$$

ii) $\underline{\lambda=1}$

$$\hat{w}_{\lambda}^{Ridge}=(X^TX+\lambda I_d)^{-1}X^Ty$$

חישבנו בסעיף הקודם:

$$X^T y = \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix}$$

טוב נמשיך מפה:

$$X^T X = \begin{bmatrix} 10 & 14 \\ 14 & 20 \end{bmatrix}$$

$$\hat{w}_x^{Ridge} = \left(\begin{bmatrix} 10 & 14 \\ 14 & 20 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 11 & 14 \\ 14 & 21 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix} = \frac{1}{21 \cdot 11 - 196} \begin{bmatrix} 21 & -14 \\ -14 & 11 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \frac{21}{35} & -\frac{14}{35} \\ -\frac{14}{35} & \frac{11}{35} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix} = \boxed{\begin{bmatrix} 0.2 \\ 1.48 \end{bmatrix}}$$

iii) $$\hat{w}^{Tik} = (X^T X + L^T L)^{-1} X^T y \qquad L = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

נחשב את כל בחלקים

ונשתמש במה שכבר חישבנו:

$$L^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad X^T X = \begin{bmatrix} 10 & 14 \\ 14 & 20 \end{bmatrix}, \quad X^T y = \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix}$$

$$L^T L = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\hat{w}^{Tik} = \left(\begin{bmatrix} 10 & 14 \\ 14 & 20 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 4 \end{bmatrix} \right)^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} 10 & 14 \\ 14 & 24 \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix}$$

$$= \frac{1}{240 - 196} \begin{bmatrix} 24 & -14 \\ -14 & 10 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{24}{44} & -\frac{14}{44} \\ -\frac{14}{44} & \frac{10}{44} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 23 \\ 34 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.72 \\ 0.41 \end{bmatrix}$$

i) $\|\hat{w}\| = \sqrt{4^2+4.5^2} = 6.02$

$\|\hat{w}^{Ridge}_{\lambda=1}\| = \sqrt{0.2^2+1.48^2} = 1.493$

$\|\hat{w}^{Tik}\| = \sqrt{1.72^2+0.41^2} = 1.765$

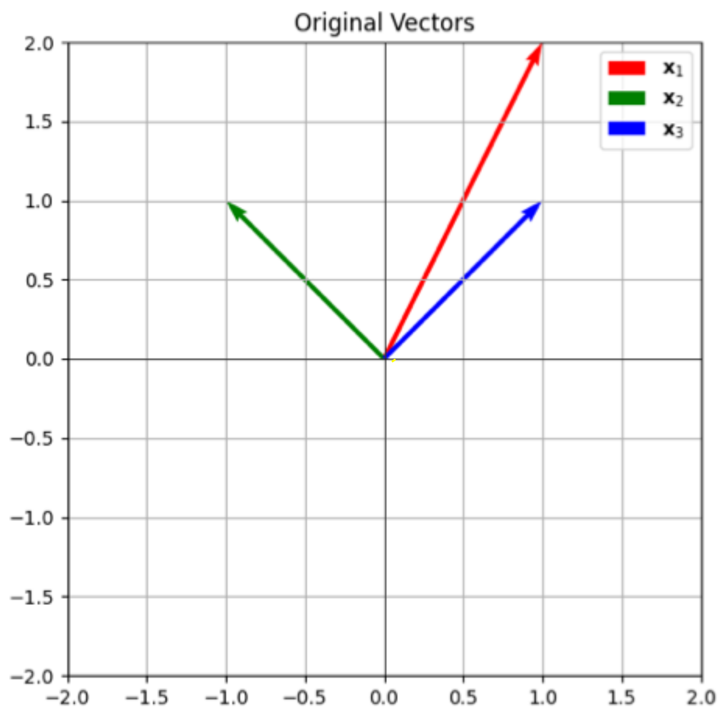
$$\boxed{\|\hat{w}^{Ridge}_{\lambda=1}\| < \|\hat{w}^{Tik}\| < \|\hat{w}\|}$$

LS ללא רגולריזציה בחר את הנורמה הכי גדולה מאחר והוא אינו מעניש כלל את גודל המשקלים והם יכולים להיות כרצונם. Ridge מתייחס לענישה שווה לכל הקואורדינטות ולכן החזיר במקרה זה את הנורמה הכי נמוכה מאחר והוא כיווץ את שתי הקואורדינטות, Tikonov מעניש קואורדינטות ספציפיות במקרה שלנו הענישה לפי איך ש L בנויה ולכן כיווץ בעיקר אותה ולכן הנורמה בגודל אמצעי בין שתי הנורמות האחרות.

ii) כפי שפירטתי בסעיף הקודם LS ללא רגולריזציה אינו מעניש את גודל המשקולות ולכן ערך הנורמה השנייה שלו מקסימלי אחריו Ridge שמעניש באופן שקול את כל הקואורדינטות ומכווץ את כולן באופן שווה ואחרון Tikonov שמענישים בצורה גיאומטרית לפי המטריצה L שבמקרה שלנו בנויה להעניש רק את הקואורדינטה השנייה ומכווץ אותה הכי הרבה ולכן היא המינימלית.

1.2 - PCA -

$$x_1 = \begin{bmatrix}1\\2\end{bmatrix}, \quad x_2 = \begin{bmatrix}-1\\1\end{bmatrix}, \quad x_3 = \begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$$

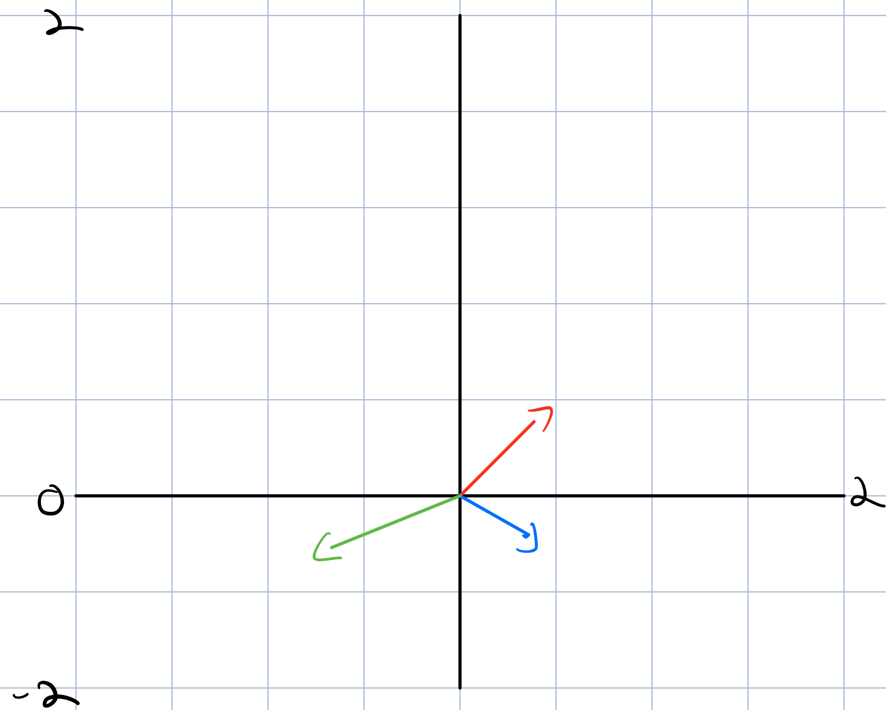


a) $$\bar{x} = \frac{1}{3} \sum_{i=1}^{3} x_i = \frac{1}{3} \begin{pmatrix}1-1+1\\2+1+1\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\4\end{pmatrix} = \boxed{\begin{pmatrix}\frac{1}{3}\\\frac{4}{3}\end{pmatrix}}$$

$$z_1 = \begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\frac{1}{3}\\\frac{4}{3}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{2}{3}\\\frac{2}{3}\end{pmatrix}$$

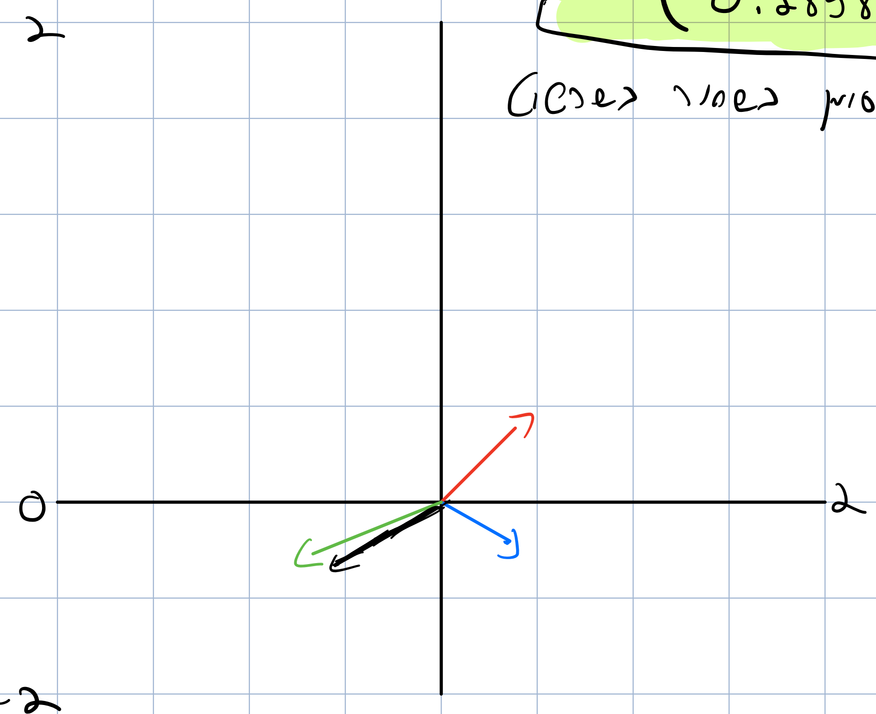
$$z_2 = \begin{pmatrix}-1\\1\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\frac{1}{3}\\\frac{4}{3}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-\frac{4}{3}\\-\frac{1}{3}\end{pmatrix}$$

$$z_3 = \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}\frac{1}{3}\\\frac{4}{3}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\frac{2}{3}\\-\frac{1}{3}\end{pmatrix}$$



b)

$$\Sigma = \begin{bmatrix} [illegible] & [illegible] \\ [illegible] & [illegible] \end{bmatrix} \Rightarrow \underset{\text{ע"ע מקסימלי}}{\lambda = 0.9562} \Rightarrow \underbrace{\underset{\text{ו"ע מנורמל}}{V = \begin{pmatrix} -0.9571 \\ -0.2898 \end{pmatrix}}}_{\text{מסומן בשחור בגרף}}$$

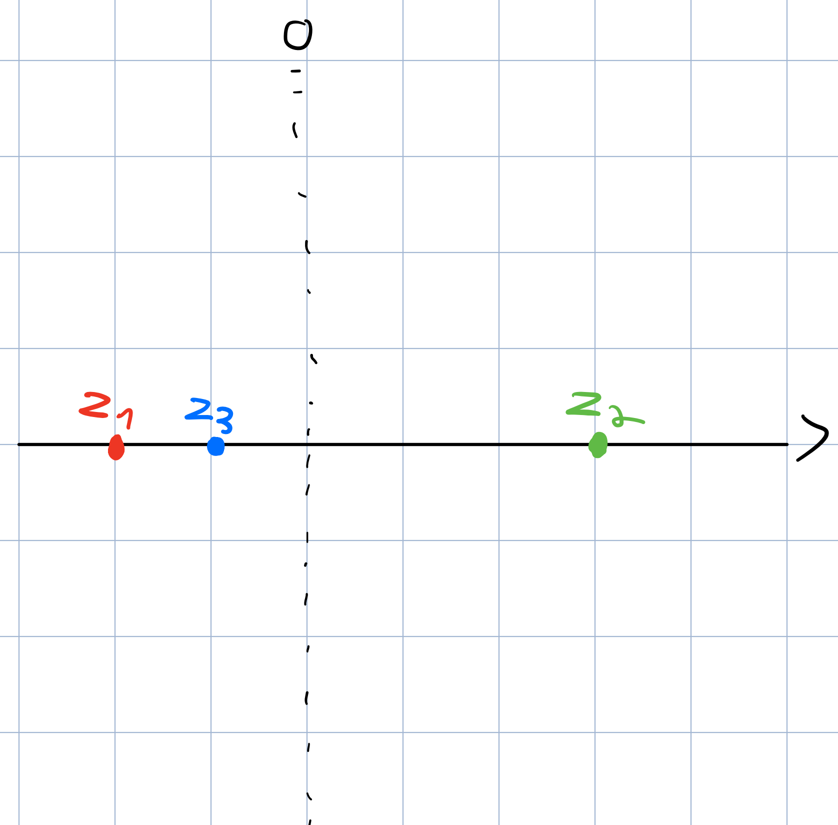


c)

$V^T z_1 = -0.83$

$V^T z_2 = 1.32$

$V^T z_3 = -0.48$

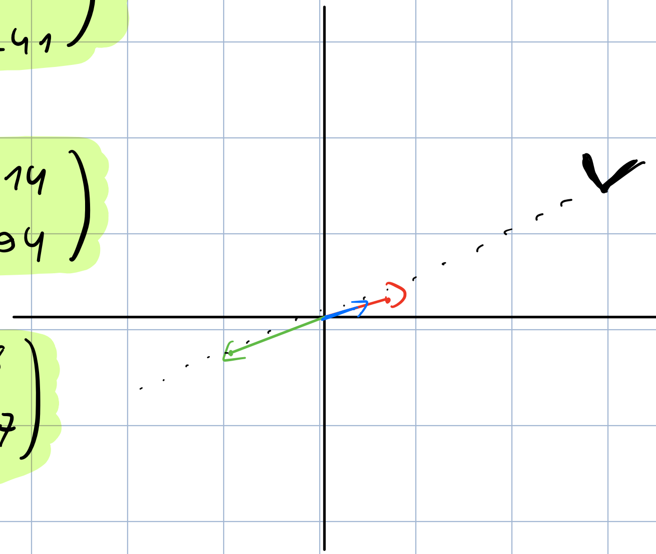


d)

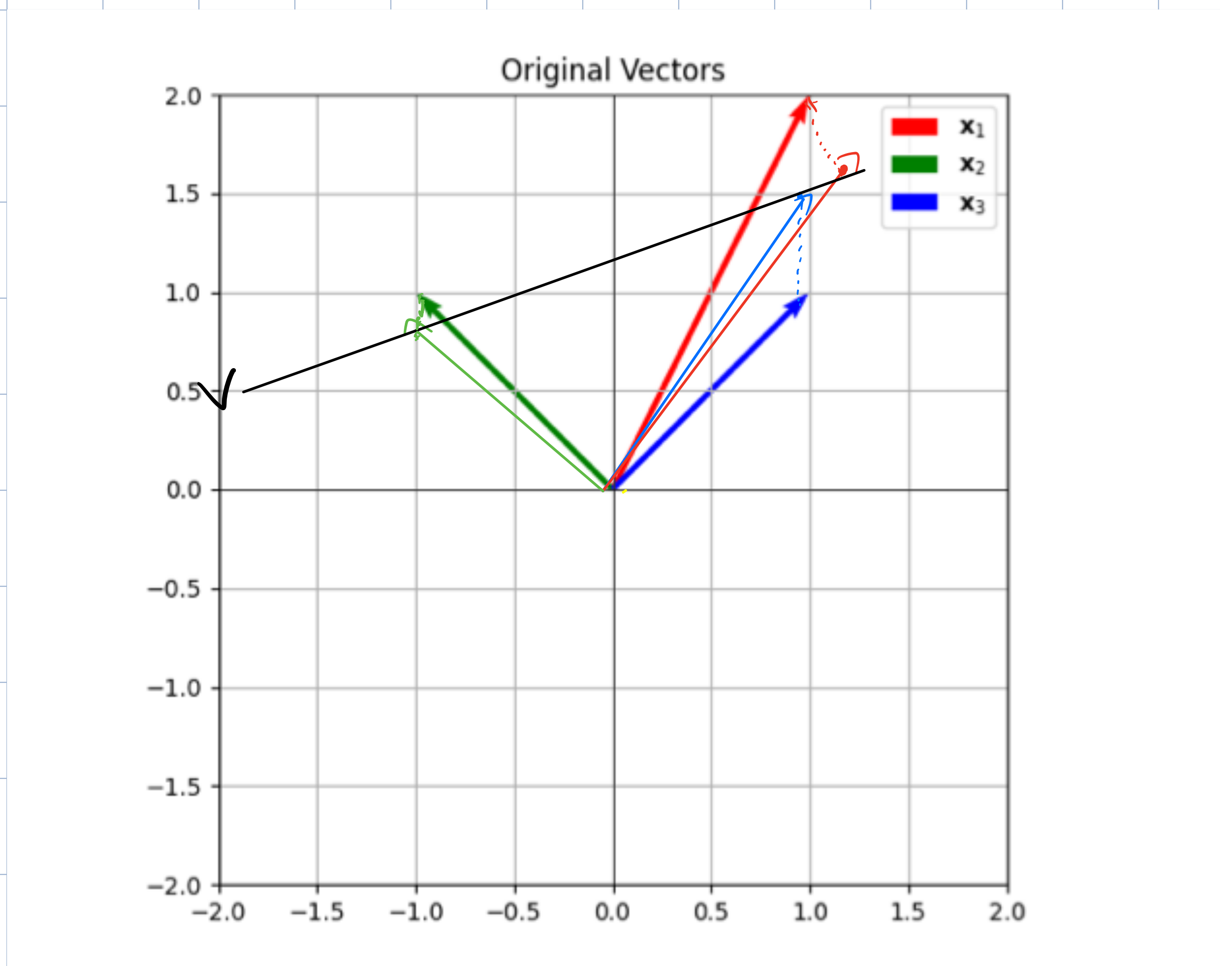
$$v(v^T z_1) = \begin{pmatrix}-0.9571\\-0.2898\end{pmatrix}\cdot -0.83 = \begin{pmatrix}0.796\\0.241\end{pmatrix}$$

$$v(v^T z_2) = \begin{pmatrix}-0.9571\\-0.2898\end{pmatrix}\cdot 1.32 = \begin{pmatrix}-1.314\\-0.394\end{pmatrix}$$

$$v(v^T z_3) = \begin{pmatrix}-0.9571\\-0.2898\end{pmatrix}\cdot -0.48 = \begin{pmatrix}0.518\\0.157\end{pmatrix}$$



e)



$$x_1^R = \begin{pmatrix}1.12\\1.574\end{pmatrix} \qquad x_2^R = \begin{pmatrix}-0.98\\0.93\end{pmatrix} \qquad x_3^R = \begin{pmatrix}0.85\\1.49\end{pmatrix}$$

$$V = \begin{pmatrix}\frac{1}{3}\\\frac{3}{4}\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}-0.9571\\-0.2898\end{pmatrix}\alpha$$

2) $z_i = x_i - \bar{x}$, $W^T W$ אורתוגונלית

a)

$$\sum_{i=1}^{m} \|x_i - \bar{x} - W^T W(x_i - \bar{x})\|^2 = \sum_{i=1}^{m} \|z_i\|^2 - z_i^T W^T W z_i$$:צ"ל

$z_i = x_i - \bar{x}$

$$\sum_{i=1}^{m} \|x_i - \bar{x} - W^T W(x_i - \bar{x})\|^2 = \sum_{i=1}^{m} \|z_i - W^T W z_i\|^2$$

נוסחת כפל

$$= \sum_{i=1}^{m} \|z_i\|^2 - 2 z^T \cdot W^T W z_i + \|W^T W z_i\|^2$$

תכונות נורמה

$$= \sum_{i=1}^{m} \|z_i\|^2 - 2 z^T W^T W z_i + z_i^T W^T W W^T W z_i$$

$W^T W$ אורתוגונלית

$W^T W W^T W = W^T W$

$$\Longrightarrow \sum_{i=1}^{m} \|z_i\|^2 - 2 z_i^T W^T W z_i + z_i^T W^T W z_i$$

חיבור

$$= \sum_{i=1}^{m} \|z_i\|^2 - z_i^T W^T W z_i$$

$\blacksquare$

b) $\sum_{i=1}^{m} z_i^T w^T w z_i = m \cdot Tr(w \Sigma w^T)$ צ"ל

$$a \in \mathbb{R}$$
$$Tr(a) = a$$

$$\sum_{i=1}^{m} z_i^T w^T w z_i = \sum_{i=1}^{m} Tr(z_i^T w^T w z_i)$$

$$\overset{Tr(AB)=Tr(BA)}{\Longrightarrow} \sum_{i=1}^{m} Tr(w z_i z_i^T w^T) \overset{\text{לינאריות}}{=} Tr\left(w\left(\sum_{i=1}^{m} z_i z_i^T\right) w^T\right)$$

$$\Sigma = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m}(x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})^T = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} z_i z_i^T$$

$$\Longrightarrow Tr(w(m \cdot \Sigma) w^T) \overset{m \text{ סקלר}}{\Longrightarrow} m \cdot Tr(w \Sigma w^T)$$

$\boxed{}$

c) $w = \begin{bmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_k^T \end{bmatrix}$ $\quad Tr(w \Sigma w^T) = \sum_{j=1}^{k} v_j^T \Sigma v_j$:צ"ל

$$Tr(w \Sigma w^T) = Tr\left(\begin{bmatrix} v_1^T \\ \vdots \\ v_k^T \end{bmatrix} \Sigma \cdot [v_1 \cdots v_k]\right)$$

$$= Tr\begin{pmatrix} v_1^T \cdot \Sigma \cdot v_1 & \cdots & v_1^T \Sigma v_k \\ \vdots & \ddots & \\ v_k^T \Sigma v_1 & \cdots & v_k^T \Sigma \cdot v_k \end{pmatrix} \overset{\text{הגדרת Trace}}{=} \sum_{j=1}^{k} v_j^T \Sigma \cdot v_j$$

$\boxed{}$

d)

מה קיבלנו:

$$\overbrace{\sum_{i=1}^{m}\|x_i-\bar{x}-W^TW(x_i-\bar{x})\|^2}^{\text{שגיאת הבנייה מחדש}}=\sum_{i=1}^{m}\|z_i\|^2-z_i^TW^TWz_i$$

$$=\underbrace{\sum_{i=1}^{m}\|z_i\|^2}_{\text{קבוע}}-\underbrace{\sum_{i=1}^{m}z_i^TW^TWz_i}$$

כלומר בשביל למזער את שגיאת הבנייה מחדש נרצה למקסם את $\sum_{i=1}^{m}z_i^TW^TWz_i$

מסעיפים ב׳ וג׳ קיבלנו ש: אם $W=\begin{bmatrix}v_1^T\\ \vdots \\ v_k^T\end{bmatrix}$ אז,

$$\sum_{i=1}^{m}z_i^TW^TWz_i=m\cdot Tr(W\Sigma W^T)=m\cdot\sum_{j=1}^{k}v_j^T\Sigma v_j$$

שזאת בדיוק הגדרת בעיית מקסום השונות ולכן הראנו שהבעיות שקולות ☒

3)

נתונים: $V\in\mathbb{R}^d$, $\|V\|_2=1$ $\quad\Sigma\in\mathbb{R}^{d\times d}\quad X:\Omega\to\mathbb{R}^d$

$E[X]=0$

נסמן λ_1 - הע״ע המקסימלי ב PCA ו v_1 הוקטור העצמי שלו, רק וקטור עצמי רלוונטי לבעיה כי ה PCA מוריד למימד אחד כלומר למרחב הנפרש על ידי v_1.

בנוסף מהגדרת PCA מתקיים $v_1^T\Sigma v_1=\lambda_1$

נרצה להראות שמתקיים לכל v שמקיים $\|v\|=1$

$$Var(\langle v,x\rangle)\le v_1^T\Sigma v_1=\lambda_1$$

$$Var(\langle v,x\rangle)=E((v^Tx)^2)=v^TE[xx^T]v\overset{\text{הגדרת }\Sigma}{=}v^T\Sigma v=\lambda_v$$

ומאחר ופעולת PCA בוחרת את הערך העצמי המקסימלי נקבל:

$$Var(\langle v,x\rangle)=\lambda_v\le\lambda_1=v_1^T\Sigma v_1$$

כלומר השונות היא לכל היותר השונות שנבחרת מ PCA כנדרש

$\blacksquare$

1.3 - clustering:

a) True

לכל m שנבחר יש אפשרות שKmeans יחזיר קלאסטר עם נקודה אחת שלפי פעולת האלגוריתם יכנס ל C_{final}.

b) False

Kmeans יכול לתת פתרונות שונים לפי דרך פעולתו (בחירה ברנדומליות תלויה באתחול ההתחלתי) ולכן כל האלגוריתם יחזיר פתרונות שונים ובפרט C לא בהכרח את האופטימלי.

c) True

כשמגדילים את מספר הקלאסטרים בK-means אנחנו מגדילים את מספר הקלאסטרים ובכך מצמצמים את מספר האפשרויות לכל דגימה ובתוצאה מכך השונות בתוך הקלאסטר אמנם תרד אך השונות הכללית של הממוצעת תגדל.

d) True

מכך שKmeans עצמו רגיש לצעד האתחול שלו כאמור שהאלגוריתם בכלליות רגיש וייתן תוצאות שונות לפי צעד האתחול השונה.