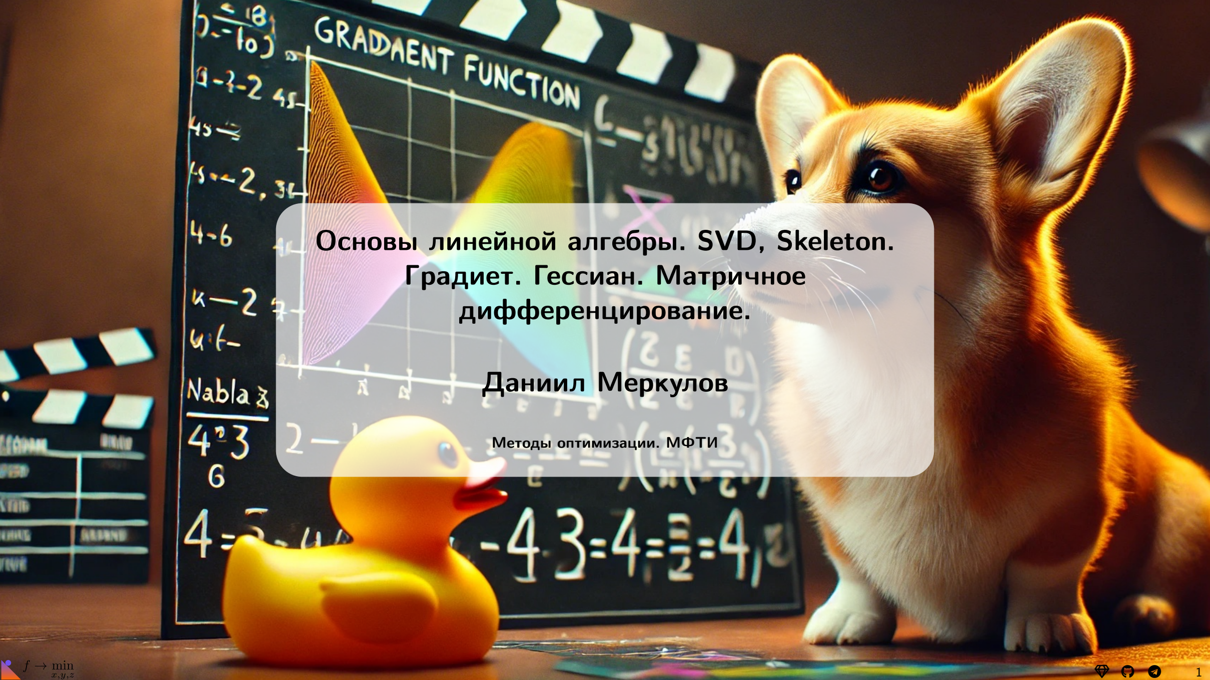


Основы линейной алгебры. SVD, Skeleton. Градиет. Гессиан. Матричное дифференцирование.

Даниил Меркулов

Методы оптимизации. МФТИ

Основы линейной алгебры

Векторы и матрицы

По умолчанию мы будем рассматривать все векторы как векторы-столбцы. Линейное пространство вещественных векторов длины n обозначается $\mathbb{R}^n$, а пространство вещественных матриц размера $m \times n$ обозначается $\mathbb{R}^{m \times n}$. То есть: [1]

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad x^T = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{bmatrix} \quad x \in \mathbb{R}^n, x_i \in \mathbb{R} \tag{1}$$

[1] A full introduction to applied linear algebra can be found in Introduction to Applied Linear Algebra -- Vectors, Matrices, and Least Squares - book by Stephen Boyd & Lieven Vandenberghe, which is indicated in the source. Also, a useful refresher for linear algebra is in Appendix A of the book Numerical Optimization by Jorge Nocedal Stephen J. Wright.

Векторы и матрицы

По умолчанию мы будем рассматривать все векторы как векторы-столбцы. Линейное пространство вещественных векторов длины n обозначается $\mathbb{R}^n$, а пространство вещественных матриц размера $m \times n$ обозначается $\mathbb{R}^{m \times n}$. То есть: [1]

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad x^T = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{bmatrix} \quad x \in \mathbb{R}^n, x_i \in \mathbb{R} \tag{1}$$

Аналогично, если $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ мы обозначаем транспонированную матрицу как $A^T \in \mathbb{R}^{n \times m}$:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad A^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \dots & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \dots & a_{m2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, a_{ij} \in \mathbb{R}$$

Будем писать $x \geq 0$ и $x \neq 0$, подразумевая покомпонентные соотношения.

[1] A full introduction to applied linear algebra can be found in Introduction to Applied Linear Algebra -- Vectors, Matrices, and Least Squares - book by Stephen Boyd & Lieven Vandenberghe, which is indicated in the source. Also, a useful refresher for linear algebra is in Appendix A of the book Numerical Optimization by Jorge Nocedal Stephen J. Wright.

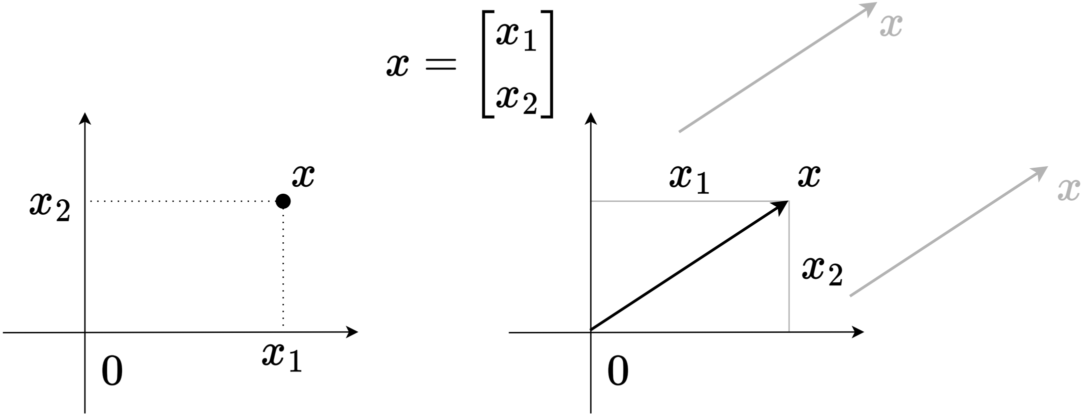


Рис. 1: Equivivalent representations of a vector

Матрица называется симметричной(симметрической), если $A = A^T$. Это обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество симметричных матриц размера $n \times n$). Из определения следует, что только квадратные матрицы могут быть симметричными.

Матрица называется симметричной(симметрической), если $A = A^T$. Это обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество симметричных матриц размера $n \times n$). Из определения следует, что только квадратные матрицы могут быть симметричными.

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ называется **положительно (отрицательно) определенной**, если для всех $x \neq 0 : x^T A x > (<) 0$. Мы обозначаем это как $A \succ (\prec) 0$. Множество таких матриц обозначается $\mathbb{S}^n_{++} (\mathbb{S}^n_{--})$.

Матрица называется симметричной(симметрической), если $A = A^T$. Это обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество симметричных матриц размера $n \times n$). Из определения следует, что только квадратные матрицы могут быть симметричными.

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ называется **положительно (отрицательно) определенной**, если для всех $x \neq 0 : x^T A x > (<) 0$. Мы обозначаем это как $A \succ (\prec) 0$. Множество таких матриц обозначается $\mathbb{S}^n_{++} (\mathbb{S}^n_{--})$.

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ называется **положительно (отрицательно) полуопределенной**, если для всех $x : x^T A x \geq (\leq) 0$. Мы обозначаем это как $A \succeq (\preceq) 0$. Множество таких матриц обозначается $\mathbb{S}^n_{+} (\mathbb{S}^n_{-})$

Question

Верно ли, что у положительно определенной матрицы все элементы положительны?

Матрица называется симметричной(симметрической), если $A = A^T$. Это обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество симметричных матриц размера $n \times n$). Из определения следует, что только квадратные матрицы могут быть симметричными.

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ называется **положительно (отрицательно) определенной**, если для всех $x \neq 0 : x^T Ax > (<) 0$. Мы обозначаем это как $A \succ (\prec) 0$. Множество таких матриц обозначается $\mathbb{S}^n_{++} (\mathbb{S}^n_{--})$.

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ называется **положительно (отрицательно) полуопределенной**, если для всех $x : x^T Ax \geq (\leq) 0$. Мы обозначаем это как $A \succeq (\preceq) 0$. Множество таких матриц обозначается $\mathbb{S}^n_{+} (\mathbb{S}^n_{-})$

Question

Верно ли, что у положительно определенной матрицы все элементы положительны?

Question

Верно ли, что симметричная матрица должна быть положительно определенной?

Матрица называется симметричной(симметрической), если $A = A^T$. Это обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество симметричных матриц размера $n \times n$). Из определения следует, что только квадратные матрицы могут быть симметричными.

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ называется **положительно (отрицательно) определенной**, если для всех $x \neq 0 : x^T A x > (<) 0$. Мы обозначаем это как $A \succ (\prec) 0$. Множество таких матриц обозначается $\mathbb{S}^n_{++} (\mathbb{S}^n_{--})$.

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ называется **положительно (отрицательно) полуопределенной**, если для всех $x : x^T A x \geq (\leq) 0$. Мы обозначаем это как $A \succeq (\preceq) 0$. Множество таких матриц обозначается $\mathbb{S}^n_{+} (\mathbb{S}^n_{-})$

Question

Верно ли, что у положительно определенной матрицы все элементы положительны?

Question

Верно ли, что симметричная матрица должна быть положительно определенной?

Question

Верно ли, что положительно определенная матрица должна быть симметричной?

Матричное умножение (matmul)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, B - матрица размера $n \times p$. Рассмотрим их произведение AB:

$$C = AB,$$

где C - матрица размера $m \times p$ с элементами (i, j) заданными следующим образом:

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} b_{kj}.$$

Наивная реализация матричного умножения требует $\mathcal{O}(n^3)$ арифметических операций, где в качестве n берётся наибольший из размеров матриц.

Question

Возможно ли перемножить две матрицы быстрее, чем за $\mathcal{O}(n^3)$ операций? Что насчет $\mathcal{O}(n^2)$, $\mathcal{O}(n)$?

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, x - вектор размера n (или, что то же самое, x - матрица размера $n \times 1$). Тогда i-я компонента произведения:

$$z = Ax$$

задается выражением:

$$z_i = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k$$

Наивная реализация матричного умножения требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где в качестве n берётся наибольший из размеров матриц.

Следует помнить, что:

- $C = AB \quad C^T = B^T A^T$

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, x - вектор размера n (или, что то же самое, x - матрица размера $n \times 1$). Тогда i-я компонента произведения:

$$z = Ax$$

задается выражением:

$$z_i = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k$$

Наивная реализация матричного умножения требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где в качестве n берётся наибольший из размеров матриц.

Следует помнить, что:

- $C = AB \quad C^T = B^T A^T$
- $AB \neq BA$

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, x - вектор размера n (или, что то же самое, x - матрица размера $n \times 1$). Тогда i-я компонента произведения:

$$z = Ax$$

задается выражением:

$$z_i = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k$$

Наивная реализация матричного умножения требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где в качестве n берётся наибольший из размеров матриц.

Следует помнить, что:

- $C = AB \quad C^T = B^T A^T$
- $AB \neq BA$
- $e^A = \sum\limits_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k$

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, x - вектор размера n (или, что то же самое, x - матрица размера $n \times 1$). Тогда i-я компонента произведения:

$$z = Ax$$

задается выражением:

$$z_i = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k$$

Наивная реализация матричного умножения требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где в качестве n берётся наибольший из размеров матриц.

Следует помнить, что:

- $C = AB \quad C^T = B^T A^T$
- $AB \neq BA$
- $e^A = \sum\limits_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k$
- $e^{A+B} \neq e^A e^B$ (но если A и B - коммутирующие матрицы, то есть $AB = BA$, тогда $e^{A+B} = e^A e^B$)

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, x - вектор размера n (или, что то же самое, x - матрица размера $n \times 1$). Тогда i-я компонента произведения:

$$z = Ax$$

задается выражением:

$$z_i = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k$$

Наивная реализация матричного умножения требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где в качестве n берётся наибольший из размеров матриц.

Следует помнить, что:

- $C = AB \quad C^T = B^T A^T$
- $AB \neq BA$
- $e^A = \sum\limits_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k$
- $e^{A+B} \neq e^A e^B$ (но если A и B - коммутирующие матрицы, то есть $AB = BA$, тогда $e^{A+B} = e^A e^B$)
- $\langle x, Ay \rangle = \langle A^T x, y \rangle$

Пример. Простой, но важный сюжет про матричное умножение

Предположим, имеется следующее выражение

$$
b = A_1 A_2 A_3 x,
$$

где $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ - какие-либо квадратные плотные(почти не содержащие нулевых элементов) матрицы и $x \in \mathbb{R}^n$ - какой-то вектор. Необходимо вычислить b.

Каким образом лучше это сделать?

1. $A_1 A_2 A_3 x$ (слева направо)

Проверьте ответ на примере кода.

Пример. Простой, но важный сюжет про матричное умножение

Предположим, имеется следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ - какие-либо квадратные плотные(почти не содержащие нулевых элементов) матрицы и $x \in \mathbb{R}^n$ - какой-то вектор. Необходимо вычислить b.

Каким образом лучше это сделать?

1. $A_1 A_2 A_3 x$ (слева направо)
2. $\left(A_1 \left(A_2 \left(A_3 x\right)\right)\right)$ (справа налево)

Проверьте ответ на примере кода.

Пример. Простой, но важный сюжет про матричное умножение

Предположим, имеется следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ - какие-либо квадратные плотные(почти не содержащие нулевых элементов) матрицы и $x \in \mathbb{R}^n$ - какой-то вектор. Необходимо вычислить b.

Каким образом лучше это сделать?

1. $A_1 A_2 A_3 x$ (слева направо)
2. $(A_1 (A_2 (A_3 x)))$ (справа налево)
3. Без разницы

Проверьте ответ на примере кода.

Пример. Простой, но важный сюжет про матричное умножение

Предположим, имеется следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ - какие-либо квадратные плотные(почти не содержащие нулевых элементов) матрицы и $x \in \mathbb{R}^n$ - какой-то вектор. Необходимо вычислить b.

Каким образом лучше это сделать?

1. $A_1 A_2 A_3 x$ (слева направо)
2. $\left(A_1 \left(A_2 \left(A_3 x\right)\right)\right)$ (справа налево)
3. Без разницы
4. Результаты, полученные первыми двумя предложенными способами, будут различаться.

Проверьте ответ на примере кода.

Нормы

Норма - это **качественная мера малости вектора**, обычно обозначаемая $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять следующим свойствам:

1. $\|\alpha x\| = |\alpha|\|x\|$, $\alpha \in \mathbb{R}$

Нормы

Норма - это **качественная мера малости вектора**, обычно обозначаемая $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять следующим свойствам:

1. $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$, $\alpha \in \mathbb{R}$
2. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (неравенство треугольника)

Нормы

Норма - это **качественная мера малости вектора**, обычно обозначаемая $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять следующим свойствам:

1. $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$, $\alpha \in \mathbb{R}$
2. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (неравенство треугольника)
3. Если $\|x\| = 0$, то $x = 0$

Нормы

Норма - это **качественная мера малости вектора**, обычно обозначаемая $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять следующим свойствам:

1. $\|\alpha x\| = |\alpha|\|x\|$, $\alpha \in \mathbb{R}$
2. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (неравенство треугольника)
3. Если $\|x\| = 0$, то $x = 0$

Нормы

Норма - это **качественная мера малости вектора**, обычно обозначаемая $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять следующим свойствам:

1. $\|\alpha x\| = |\alpha|\|x\|$, $\alpha \in \mathbb{R}$
2. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ (неравенство треугольника)
3. Если $\|x\| = 0$, то $x = 0$

Тогда расстояние между двумя векторами определяется как:

$$d(x, y) = \|x - y\|.$$

Наиболее известная и широко используемая норма - это **Евклидова норма**:

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

которая соответствует расстоянию в нашей реальной жизни. Если векторы имеют комплексные компоненты, мы используем их модуль. Евклидова норма, или 2-норма, - подкласс важного класса p-норм:

$$\|x\|_p = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{1/p}.$$

p-норма вектора

Имеется два очень важных особых случая. Бесконечная норма, или норма Чебышева, определяется как максимальный модуль компоненты вектора x:

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$$

p-норма вектора

Имеется два очень важных особых случая. Бесконечная норма, или норма Чебышева, определяется как максимальный модуль компоненты вектора x:

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$$

L_1 норма (или **Манхэттенское расстояние, расстояние городских кварталов**), которая определяется как сумма модулей элементов x:

$$\|x\|_1 = \sum_i |x_i|$$

p-норма вектора

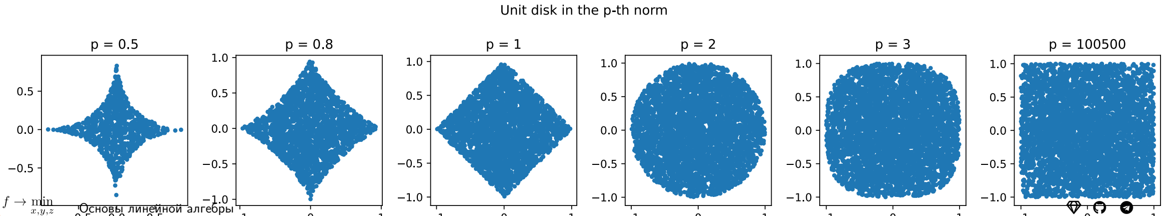
Имеется два очень важных особых случая. Бесконечная норма, или норма Чебышева, определяется как максимальный модуль компоненты вектора x:

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$$

L_1 норма (или **Манхэттенское расстояние, расстояние городских кварталов**), которая определяется как сумма модулей элементов x:

$$\|x\|_1 = \sum_i |x_i|$$

L_1 норма играет очень важную роль: она относится к методам **compressed sensing**, которые появились в середине 00-х годов как одна из самых популярных исследовательских тем. Код для картинок снизу доступен *здесь:*. Также посмотрите *это* видео.



Матричные нормы

В каком-то смысле нет сильных отличий между матрицами и векторами(вы можете векторизовать матрицу). Отсюда и получается простейшая матричная норма - **Фробениусова норма**:

$$\|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right)^{1/2}$$

Матричные нормы

В каком-то смысле нет сильных отличий между матрицами и векторами(вы можете векторизовать матрицу). Отсюда и получается простейшая матричная норма - **Фробениусова норма**:

$$\|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2\right)^{1/2}$$

Спектральная норма, $\|A\|_2$ является одной из наиболее используемых матричных норм (наряду с Фробениусовой нормой).

$$\|A\|_2 = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2},$$

Она не может быть посчитана напрямую через элементы с использованием какой-либо простой формулы, как, например, Фробениусова норма, однако, существуют эффективные алгоритмы для ее вычисления. Это напрямую связано с **сингулярным разложением** (SVD) матрицы. Из него следует

$$\|A\|_2 = \sigma_1(A) = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A)}$$

где $\sigma_1(A)$ - наибольшее сингулярное число матрицы A.

Скалярное произведение

Стандартное **скалярное произведение (inner product)** векторов x и y из $\mathbb{R}^n$ задается как:

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

Здесь x_i и y_i - значения i-й компоненты соответствующего вектора.

> **Example**
>
> Докажите, что можно переносить матрицу с транспонированием внутри скалярного произведения : $\langle x, Ay \rangle = \langle A^T x, y \rangle$ и $\langle x, yB \rangle = \langle xB^T, y \rangle$

Скалярное произведение матриц

Стандартное **скалярное произведение (inner product)** матриц X и Y из $\mathbb{R}^{m \times n}$ задается как:

$$\langle X, Y \rangle = \text{tr}(X^T Y) = \sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} X_{ij} Y_{ij} = \text{tr}(Y^T X) = \langle Y, X \rangle$$

> **Question**
>
> Существует ли какая-то связь между Фробениусовой нормой $\| \cdot \|_F$ и скалярным произведением матриц $\langle \cdot, \cdot \rangle$?

Собственные числа и собственные вектора

Скаляр λ называется собственным числом матрицы A размера $n \times n$, если существует ненулевой вектор q такой, что

$$Aq = \lambda q.$$

вектор q называется собственным вектором матрицы A. Матрица A невырожденная, если все ее собственные числа отличны от нуля. Все собственные числа симметричной матрицы являются вещественными, в то время как у несимметричной матрицы могут быть комплексные собственные числа. Если матрица положительно определена, а значит, и симметрична, ее собственные числа - вещественные.

Собственные числа и собственные вектора

Theorem

$$A \succeq (\succ) 0 \Leftrightarrow \text{все собственные числа матрицы } A \geq (>) 0$$

Proof

1. $\rightarrow$ *Предположим, что собственное число λ отрицательно и пусть x - соответсвующий ему собственный вектор. Тогда*

$$Ax = \lambda x \rightarrow x^T A x = \lambda x^T x < 0$$

что противоречит условию $A \succeq 0$.

Собственные числа и собственные вектора

Theorem

$$A \succeq (\succ) 0 \Leftrightarrow \text{все собственные числа матрицы } A \geq (>) 0$$

Proof

1. $\rightarrow$ *Предположим, что собственное число λ отрицательно и пусть x - соответсвующий ему собственный вектор. Тогда*

$$Ax = \lambda x \rightarrow x^T Ax = \lambda x^T x < 0$$

что противоречит условию $A \succeq 0$.

2. $\leftarrow$ *Для любой симметричной матрицы мы можем выбрать множество собственных векторов $v_1, \ldots, v_n$, составляющих ортогональный базис в $\mathbb{R}^n$. Рассмотрим любой $x \in \mathbb{R}^n$.*

$$\begin{aligned} x^T A x &= (\alpha_1 v_1 + \ldots + \alpha_n v_n)^T A (\alpha_1 v_1 + \ldots + \alpha_n v_n) \\ &= \sum \alpha_i^2 v_i^T A v_i = \sum \alpha_i^2 \lambda_i v_i^T v_i \geq 0 \end{aligned}$$

здесь мы использовали тот факт, что $v_i^T v_j = 0$ для $i \neq j$.

Спектральное разложение матрицы

Предположим, что $A \in S_n$, то есть A вещестенная симметричная матрица размера $n \times n$. Тогда A может быть разложена как

$$
A = Q\Lambda Q^T,
$$

[2] A good cheat sheet with matrix decomposition is available at the NLA course website.

Спектральное разложение матрицы

Предположим, что $A \in S_n$, то есть A вещестенная симметричная матрица размера $n \times n$. Тогда A может быть разложена как

$$A = Q\Lambda Q^T,$$

где $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ортогональная, то есть удовлетворяет соотношению $Q^TQ = I$, и матрица $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. (Вещественные) числа λ_i - собственные числа матрицы A и корни характеристического многочлена $\text{det}(A - \lambda I)$. Столбцы Q образуют ортонормированный базис из собственных векторов A. Такая факторизация матрицы A называется спектральным разложением, или разложением матрицы на основе собственных векторов. [2]

[2]A good cheat sheet with matrix decomposition is available at the NLA course website.

Спектральное разложение матрицы

Предположим, что $A \in S_n$, то есть A вещестенная симметричная матрица размера $n \times n$. Тогда A может быть разложена как

$$A = Q\Lambda Q^T,$$

где $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ортогональная, то есть удовлетворяет соотношению $Q^T Q = I$, и матрица $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. (Вещественные) числа λ_i - собственные числа матрицы A и корни характеристического многочлена $\det(A - \lambda I)$. Столбцы Q образуют ортонормированный базис из собственных векторов A. Такая факторизация матрицы A называется спектральным разложением, или разложением матрицы на основе собственных векторов. [2]

Обычно собтвенные числа упорядочивают следующим образом: $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n$. Будем использовать нотацию $\lambda_i(A)$ для обозначения i-го по значению собственного числа матрицы $A \in S$. Обычно будем обозначать наибольшее собственное число как $\lambda_1(A) = \lambda_{\text{max}}(A)$, а наименьшее как $\lambda_n(A) = \lambda_{\text{min}}(A)$.

[2] A good cheat sheet with matrix decomposition is available at the NLA course website.

Ещё о собственных значениях

Максимальное и минимальное собственное значение удовлетворяют соотношениям

$$
\lambda_{\text{min}}(A) = \inf_{x \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}, \qquad \lambda_{\text{max}}(A) = \sup_{x \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}
$$

Ещё о собственных значениях

Максимальное и минимальное собственное значение удовлетворяют соотношениям

$$\lambda_{\text{min}}(A) = \inf_{x \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}, \qquad \lambda_{\text{max}}(A) = \sup_{x \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}$$

и, следовательно, $\forall x \in \mathbb{R}^n$ (отношение Рэлея):

$$\lambda_{\text{min}}(A) x^T x \leq x^T A x \leq \lambda_{\text{max}}(A) x^T x$$

Ещё о собственных значениях

Максимальное и минимальное собственное значение удовлетворяют соотношениям

$$
\lambda_{\text{min}}(A) = \inf_{x \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}, \qquad \lambda_{\text{max}}(A) = \sup_{x \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}
$$

и, следовательно, $\forall x \in \mathbb{R}^n$ (отношение Рэлея):

$$
\lambda_{\text{min}}(A) x^T x \leq x^T A x \leq \lambda_{\text{max}}(A) x^T x
$$

Число обусловленности невырожденной матрицы вводится следующим образом

$$
\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\|
$$

Ещё о собственных значениях

Максимальное и минимальное собственное значение удовлетворяют соотношениям

$$\lambda_{\text{min}}(A) = \inf_{x \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}, \qquad \lambda_{\text{max}}(A) = \sup_{x \neq 0} \frac{x^T A x}{x^T x}$$

и, следовательно, $\forall x \in \mathbb{R}^n$ (отношение Рэлея):

$$\lambda_{\text{min}}(A) x^T x \leq x^T A x \leq \lambda_{\text{max}}(A) x^T x$$

Число обусловленности невырожденной матрицы вводится следующим образом

$$\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$$

Если мы используем спектральную норму, то можно получить:

$$\kappa(A) = \frac{\sigma_{\text{max}}(A)}{\sigma_{\text{min}}(A)}$$

Если, более того, $A \in \mathbb{S}^n_{++}$: $\kappa(A) = \dfrac{\lambda_{\text{max}}(A)}{\lambda_{\text{min}}(A)}$

Сингулярное разложение

Предположим, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ и rank $A = r$. Тогда A может быть представлена как

$$A = U\Sigma V^T$$

Сингулярное разложение

Предположим, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ и rank $A = r$. Тогда A может быть представлена как

$$A = U\Sigma V^T$$

где $U \in \mathbb{R}^{m \times r}$ удовлетворяет $U^T U = I$, $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$ удовлетворяет $V^T V = I$ и Σ - диагональная матрица $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_r)$ такая, что

Сингулярное разложение

Предположим, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ и rank $A = r$. Тогда A может быть представлена как

$$A = U\Sigma V^T$$

где $U \in \mathbb{R}^{m \times r}$ удовлетворяет $U^T U = I$, $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$ удовлетворяет $V^T V = I$ и Σ - диагональная матрица $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_r)$ такая, что

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_r > 0.$$

Сингулярное разложение

Предположим, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ и rank $A = r$. Тогда A может быть представлена как

$$A = U\Sigma V^T$$

где $U \in \mathbb{R}^{m \times r}$ удовлетворяет $U^TU = I$, $V \in \mathbb{R}^{n \times r}$ удовлетворяет $V^TV = I$ и Σ - диагональная матрица $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_r)$ такая, что

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_r > 0.$$

Эта факторизация называется **сингулярным разложением (SVD)** матрицы A. Столбцы U называется левыми сингулярными векторами A, столбцы V - правыми сингулярными векторами, и σ_i являются сингулярными числами. Сингулярное разложение может быть записано как

$$A = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i u_i v_i^T,$$

где $u_i \in \mathbb{R}^m$ - левые сингулярные векторы, а $v_i \in \mathbb{R}^n$ - правые сингулярные векторы.

Сингулярное разложение

Question

Предположим, матрица $A \in \mathbb{S}^n_{++}$. Что можно сказать о связи собственных чисел с сингулярными числами?

Сингулярное разложение

Question

Предположим, матрица $A \in \mathbb{S}^n_{++}$. Что можно сказать о связи собственных чисел с сингулярными числами?

Question

Как сингулярные числа матрицы связаны с собственными числами, главным образом, для симметричных матриц?

Ранговое разложение (Skeleton)

Простое, но очень интересное разложение матрицы - ранговое разложение, которое может быть записано в двух формах:

$$
A = UV^T \quad A = \hat{C}\hat{A}^{-1}\hat{R}
$$

Ранговое разложение (Skeleton)

Простое, но очень интересное разложение матрицы - ранговое разложение, которое может быть записано в двух формах:

$$A = UV^T \quad A = \hat{C}\hat{A}^{-1}\hat{R}$$

Последнее выражение основано на забавном факте: можно случайно выбрать r линейно независимых столбцов матрицы и любые r линейно независимых строк матрицы и только по ним восстановить исходную матрицу.

Ранговое разложение (Skeleton)

Простое, но очень интересное разложение матрицы - ранговое разложение, которое может быть записано в двух формах:

$$A = UV^T \quad A = \hat{C}\hat{A}^{-1}\hat{R}$$

Последнее выражение основано на забавном факте: можно случайно выбрать r линейно независимых столбцов матрицы и любые r линейно независимых строк матрицы и только по ним восстановить исходную матрицу.

Случаи применения рангового разложения:

- Сокращение моделей, сжатие данных и ускорение вычислений в численных методах: заданная матрица с rank r, где $r \ll n, m$ требует для хранения $\mathcal{O}((n+m)r) \ll nm$ элементов.

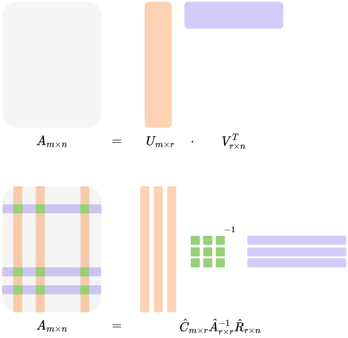


Рис. 3: Illustration of Skeleton decomposition

Ранговое разложение (Skeleton)

Простое, но очень интересное разложение матрицы - ранговое разложение, которое может быть записано в двух формах:

$$
A = UV^T \quad A = \hat{C}\hat{A}^{-1}\hat{R}
$$

Последнее выражение основано на забавном факте: можно случайно выбрать r линейно независимых столбцов матрицы и любые r линейно независимых строк матрицы и только по ним восстановить исходную матрицу.

Случаи применения рангового разложения:

- Сокращение моделей, сжатие данных и ускорение вычислений в численных методах: заданная матрица с rank r, где $r \ll n, m$ требует для хранения $\mathcal{O}((n+m)r) \ll nm$ элементов.
- Выделение признаков в машинном обучении, где это также известно как матричная факторизация

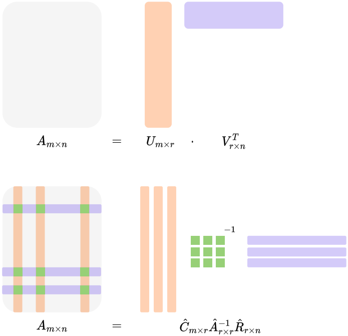


Рис. 3: Illustration of Skeleton decomposition

Ранговое разложение (Skeleton)

Простое, но очень интересное разложение матрицы - ранговое разложение, которое может быть записано в двух формах:

$$
A = UV^T \quad A = \hat{C}\hat{A}^{-1}\hat{R}
$$

Последнее выражение основано на забавном факте: можно случайно выбрать r линейно независимых столбцов матрицы и любые r линейно независимых строк матрицы и только по ним восстановить исходную матрицу.

Случаи применения рангового разложения:

- Сокращение моделей, сжатие данных и ускорение вычислений в численных методах: заданная матрица с rank r, где $r \ll n, m$ требует для хранения $\mathcal{O}((n+m)r) \ll nm$ элементов.
- Выделение признаков в машинном обучении, где это также известно как матричная факторизация
- Все приложения, где применяется SVD, поскольку ранговое разложение может быть преобразовано в усеченную форму SVD.

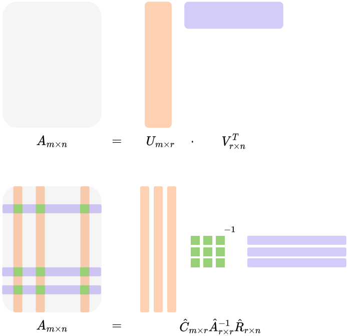


Рис. 3: Illustration of Skeleton decomposition

Каноническое тензорное разложение

Можно рассмотреть обобщение ранговой декомпозиции на структуры данных более высокого порядка, такие как тензоры, что подразумевает представление тензора в виде суммы r примитивных тензоров.

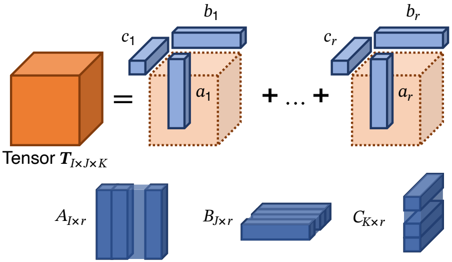


Рис. 4: Illustration of Canonical Polyadic decomposition

> **Example**
>
> Обратите внимание, что существует множество тензорных разложений: Canonical, Tucker, Tensor Train (TT), Tensor Ring (TR) и другие. В тензорном случае у нас нет прямого определения *ранга* для всех типов разложений. Например, для разложения TT ранг - это не скаляр, а вектор.

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

$$
\text{det}A = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i, \qquad \text{tr}A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i
$$

Определитель обладает несколькими привлекательными (и показательными) свойствами. Например,

- $\text{det}A = 0$ тогда и только тогда, когда A вырожденная;

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

$$\text{det}A = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i, \qquad \text{tr}A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

Определитель обладает несколькими привлекательными (и показательными) свойствами. Например,

- $\text{det}A = 0$ тогда и только тогда, когда A вырожденная;
- $\text{det}AB = (\text{det}A)(\text{det}B)$;

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

$$
\text{det}A = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i, \qquad \text{tr}A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i
$$

Определитель обладает несколькими привлекательными (и показательными) свойствами. Например,

- $\text{det}A = 0$ тогда и только тогда, когда A вырожденная;
- $\text{det}AB = (\text{det}A)(\text{det}B)$;
- $\text{det}A^{-1} = \frac{1}{\text{det}\ A}$.

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

$$\text{det}A = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i, \qquad \text{tr}A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

Определитель обладает несколькими привлекательными (и показательными) свойствами. Например,

- $\text{det}A = 0$ тогда и только тогда, когда A вырожденная;
- $\text{det}AB = (\text{det}A)(\text{det}B)$;
- $\text{det}A^{-1} = \frac{1}{\text{det}\ A}$.

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

$$\text{det}A = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i, \qquad \text{tr}A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

Определитель обладает несколькими привлекательными (и показательными) свойствами. Например,

- $\text{det}A = 0$ тогда и только тогда, когда A вырожденная;
- $\text{det}AB = (\text{det}A)(\text{det}B)$;
- $\text{det}A^{-1} = \frac{1}{\text{det}\ A}$.

Не забывайте о циклическом свойстве следа для произвольных матриц A, B, C, D (при условии, что все размерности согласованы).:

$$\text{tr}(ABCD) = \text{tr}(DABC) = \text{tr}(CDAB) = \text{tr}(BCDA)$$

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

$$\text{det} A = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i, \qquad \text{tr} A = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

Определитель обладает несколькими привлекательными (и показательными) свойствами. Например,

- $\text{det} A = 0$ тогда и только тогда, когда A вырожденная;
- $\text{det} AB = (\text{det} A)(\text{det} B)$;
- $\text{det} A^{-1} = \frac{1}{\text{det } A}$.

Не забывайте о циклическом свойстве следа для произвольных матриц A, B, C, D (при условии, что все размерности согласованы).:

$$\text{tr}(ABCD) = \text{tr}(DABC) = \text{tr}(CDAB) = \text{tr}(BCDA)$$

Question

Как определитель матрицы связан с ее обратимостью?

Аппроксимация Тейлора первого порядка

Аппроксимация Тейлора первого порядка, также известная как линейная аппроксимация, рассматривается вокруг некоторой точки x_0. Если $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация Тейлора первого порядка задается:

$$f_{x_0}^I(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T(x - x_0)$$

Где:

- $f(x_0)$ - значение функции в точке x_0.

Аппроксимация Тейлора первого порядка

Аппроксимация Тейлора первого порядка, также известная как линейная аппроксимация, рассматривается вокруг некоторой точки x_0. Если $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация Тейлора первого порядка задается:

$$f_{x_0}^I(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T(x - x_0)$$

Где:

- $f(x_0)$ - значение функции в точке x_0.
- $\nabla f(x_0)$ - градиент функции в точке x_0.

Аппроксимация Тейлора первого порядка

Аппроксимация Тейлора первого порядка, также известная как линейная аппроксимация, рассматривается вокруг некоторой точки x_0. Если $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация Тейлора первого порядка задается:

$$f_{x_0}^I(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T (x - x_0)$$

Где:

- $f(x_0)$ - значение функции в точке x_0.
- $\nabla f(x_0)$ - градиент функции в точке x_0.

Аппроксимация Тейлора первого порядка

Аппроксимация Тейлора первого порядка, также известная как линейная аппроксимация, рассматривается вокруг некоторой точки x_0. Если $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация Тейлора первого порядка задается:

$$f^I_{x_0}(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T (x - x_0)$$

Где:

- $f(x_0)$ - значение функции в точке x_0.
- $\nabla f(x_0)$ - градиент функции в точке x_0.

Для простоты анализа некоторых подходов часто удобно заменить $f(x)$ на $f^I_{x_0}(x)$ вблизи точки x_0.

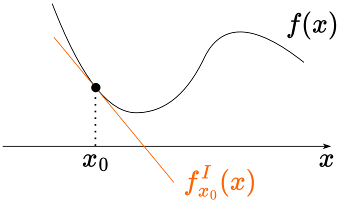


Рис. 5: First order Taylor approximation near the point x_0

Аппроксимация Тейлора второго порядка

Аппроксимация Тейлора второго порядка, также известная как квадратичная аппроксимация, учитывает кривизну функции. Для дважды дифференцируемой функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, ее аппроксимация Тейлора второго порядка в окрестности некоторой точки x_0 имеет вид:

$$
f_{x_0}^{II}(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T(x - x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T \nabla^2 f(x_0)(x - x_0)
$$

Где $\nabla^2 f(x_0)$ - Гессиан функции f в точке x_0.

Аппроксимация Тейлора второго порядка

Аппроксимация Тейлора второго порядка, также известная как квадратичная аппроксимация, учитывает кривизну функции. Для дважды дифференцируемой функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, ее аппроксимация Тейлора второго порядка в окрестности некоторой точки x_0 имеет вид:

$$f_{x_0}^{II}(x) = f(x_0) + \nabla f(x_0)^T (x - x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^T \nabla^2 f(x_0)(x - x_0)$$

Где $\nabla^2 f(x_0)$ - Гессиан функции f в точке x_0.
Когда использование линейного приближения функции недостаточно, можно рассмотреть замену $f(x)$ на $f_{x_0}^{II}(x)$ вблизи точки x_0. В общем случае аппроксимации Тейлора дают нам возможность локально аппроксимировать функции. Аппроксимация первого порядка представляет собой плоскость, касательную к функции в точке x_0, а аппроксимация второго порядка включает кривизну и представлена параболой. Эти аппроксимации особенно полезны в оптимизации и численных методах, так как обеспечивают удобный способ работы со сложными функциями.

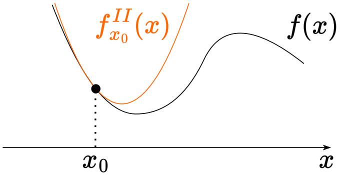


Рис. 6: Second order Taylor approximation near the point x_0

Матричное дифференцирование

Градиент

Пусть $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Тогда вектор, содержащий все частные производные первого порядка:

$$\nabla f(x) = \dfrac{df}{dx} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

Градиент

Пусть $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Тогда вектор, содержащий все частные производные первого порядка:

$$\nabla f(x) = \frac{df}{dx} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2} \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n} \end{pmatrix}$$

называется градиентом функции $f(x)$. Этот вектор указывает направление самого крутого подъема. Таким образом, вектор $-\nabla f(x)$ соответствует направлению наикрутейшего спуска функции в точке. Более того, вектор градиента всегда ортогонален линии уровня (изолинии) в точке.

Example

Для функции $f(x, y) = x^2 + y^2$ градиент равен:

$$\nabla f(x, y) = \begin{bmatrix} 2x \\ 2y \end{bmatrix}$$

Этот вектор указывается направление наибольшего роста функции в точке.

Question

Как величина градиента связана с крутизной функции?

Гессиан

Пусть $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Тогда матрица, содержащая все частные производные второго порядка:

$$
f''(x) = \nabla^2 f(x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}
$$

Гессиан

Пусть $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Тогда матрица, содержащая все частные производные второго порядка:

$$f''(x) = \nabla^2 f(x) = \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{pmatrix}$$

На самом деле, Гессиан может быть тензором в таком случае: $(f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m)$ - это просто 3d-тензор, где каждый срез - это Гессиан соответствующей скалярной функции $(\nabla^2 f_1(x), \ldots, \nabla^2 f_m(x))$.

Example

Для функции $f(x, y) = x^2 + y^2$ Гессиан:

$$H_f(x, y) = \begin{bmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$$

Эта матрица содержит информацию о кривизне функции по разным направлениям.

Question

Как Гессиан может быть использован для определения вогнутости или выпуклости функции?

Теорема Шварца

Пусть функция $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Если смешанные частные производные $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$ и $\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$ непрерывны на открытом множестве, содержащем точку a, то они равны в точке a. Таким образом,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(a) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(a)$$

Теорема Шварца

Пусть функция $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$. Если смешанные частные производные $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$ и $\frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}$ непрерывны на открытом множестве, содержащем точку a, то они равны в точке a. Таким образом,

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(a) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(a)$$

По теореме Шварца, если смешанные частицы непрерывны на открытом множестве, то Гессиан симметричен. Это означает, что элементы над главной диагональю равны элементам, которые зеркально симметричны относительно главной диагонали:

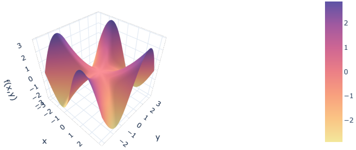
$$\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i} \qquad \nabla^2 f(x) = \left(\nabla^2 f(x)\right)^T$$

Эта симметрия упрощает вычисления и анализ с использованием Гессиана в различных приложениях, особенно в оптимизации.

Контрпример Шварца

$$f(x,y) = \begin{cases} \frac{xy(x^2-y^2)}{x^2+y^2} & \text{для } (x,\, y) \neq (0,\, 0), \\ 0 & \text{для } (x, y) = (0, 0). \end{cases}$$

Counterexample ♣



Можно убедиться, что $\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y}(0,0) \neq \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x}(0,0)$, хотя смешанные частные производные существуют, и в любой другой точке симметрия сохраняется.

Якобиан

Расширение понятися градиента многомерной функции $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ - это следующая матрица:

$$
J_f = f'(x) = \frac{df}{dx^T} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_1} \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_1}{\partial x_n} & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{pmatrix}
$$

Эта матрица предоставляет информацию о скорости изменения функции по отношению к ее входам.

Question

Можем ли мы как-то связать эти три определения (градиент, Якобиан и Гессиан) одним корректным утверждением?

Example

Для функции

$$
f(x, y) = \begin{bmatrix} x + y \\ x - y \end{bmatrix},
$$

Якобиан равен:

$$
J_f(x, y) = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}
$$

Question

Как матрица Якоби связана с градиентом для скалярно-значных функций?

Резюме

$$f(x) : X \to Y; \qquad \frac{\partial f(x)}{\partial x} \in G$$

X	Y	G	Name
$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}$	$f'(x)$ (производная)
$\mathbb{R}^n$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}^n$	$\dfrac{\partial f}{\partial x_i}$ (градиент)
$\mathbb{R}^n$	$\mathbb{R}^m$	$\mathbb{R}^{n \times m}$	$\dfrac{\partial f_i}{\partial x_j}$ (Якобиан)
$\mathbb{R}^{m \times n}$	$\mathbb{R}$	$\mathbb{R}^{m \times n}$	$\dfrac{\partial f}{\partial x_{ij}}$

Дифференциалы

Theorem

Пусть $x \in S$ - внутренняя точка множества S, и пусть $D : U \to V$ - линейный оператор. Мы говорим, что функция f дифференцируема в точке x с производной D, если для всех достаточно малых $h \in U$ имеет место следующее разложение:

$$f(x+h) = f(x) + D[h] + o(\|h\|)$$

Если для любого линейного оператора $D : U \to V$ функция f не дифференцируема в точке x с производной D, то мы говорим, что f не дифференцируема в точке x.

Дифференциалы

Введя дифференциальное обозначение df, мы можем получить градиент по следующей формуле:

$$df(x) = \langle \nabla f(x), dx \rangle$$

Дифференциалы

Введя дифференциальное обозначение df, мы можем получить градиент по следующей формуле:

$$df(x) = \langle \nabla f(x), dx \rangle$$

Тогда, если у нас есть дифференциал указанной выше формы и нам нужно вычислить вторую производную матрицы/векторной функции, мы рассматриваем «старый» dx как константу dx_1, а затем вычисляем $d(df) = d^2 f(x)$.

$$d^2 f(x) = \langle \nabla^2 f(x) dx_1, dx \rangle = \langle H_f(x) dx_1, dx \rangle$$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X + Y) = dX + dY$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X + Y) = dX + dY$
- $d(X^T) = (dX)^T$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X + Y) = dX + dY$
- $d(X^T) = (dX)^T$
- $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X+Y) = dX + dY$
- $d(X^T) = (dX)^T$
- $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$
- $d\langle X, Y\rangle = \langle dX, Y\rangle + \langle X, dY\rangle$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X+Y) = dX + dY$
- $d(X^T) = (dX)^T$
- $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$
- $d\langle X, Y\rangle = \langle dX, Y\rangle + \langle X, dY\rangle$
- $d\left(\dfrac{X}{\phi}\right) = \dfrac{\phi dX - (d\phi)X}{\phi^2}$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X + Y) = dX + dY$
- $d(X^T) = (dX)^T$
- $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$
- $d\langle X, Y\rangle = \langle dX, Y\rangle + \langle X, dY\rangle$
- $d\left(\frac{X}{\phi}\right) = \frac{\phi dX - (d\phi)X}{\phi^2}$
- $d\left(\det X\right) = \det X \langle X^{-T}, dX\rangle$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X + Y) = dX + dY$
- $d(X^T) = (dX)^T$
- $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$
- $d\langle X, Y\rangle = \langle dX, Y\rangle + \langle X, dY\rangle$
- $d\left(\dfrac{X}{\phi}\right) = \dfrac{\phi dX - (d\phi)X}{\phi^2}$
- $d\left(\det X\right) = \det X\langle X^{-T}, dX\rangle$
- $d\left(\text{tr } X\right) = \langle I, dX\rangle$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X + Y) = dX + dY$
- $d(X^T) = (dX)^T$
- $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$
- $d\langle X, Y\rangle = \langle dX, Y\rangle + \langle X, dY\rangle$
- $d\left(\dfrac{X}{\phi}\right) = \dfrac{\phi dX - (d\phi)X}{\phi^2}$
- $d(\det X) = \det X\langle X^{-T}, dX\rangle$
- $d(\text{tr } X) = \langle I, dX\rangle$
- $df(g(x)) = \dfrac{df}{dg} \cdot dg(x)$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X+Y) = dX + dY$
- $d(X^T) = (dX)^T$
- $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$
- $d\langle X, Y\rangle = \langle dX, Y\rangle + \langle X, dY\rangle$
- $d\left(\dfrac{X}{\phi}\right) = \dfrac{\phi dX - (d\phi)X}{\phi^2}$
- $d\left(\det X\right) = \det X \langle X^{-T}, dX\rangle$
- $d\left(\text{tr } X\right) = \langle I, dX\rangle$
- $df(g(x)) = \dfrac{df}{dg} \cdot dg(x)$
- $H = (J(\nabla f))^T$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, в то время как X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$
- $d(\alpha X) = \alpha(dX)$
- $d(AXB) = A(dX)B$
- $d(X + Y) = dX + dY$
- $d(X^T) = (dX)^T$
- $d(XY) = (dX)Y + X(dY)$
- $d\langle X, Y\rangle = \langle dX, Y\rangle + \langle X, dY\rangle$
- $d\left(\dfrac{X}{\phi}\right) = \dfrac{\phi dX - (d\phi)X}{\phi^2}$
- $d\left(\det X\right) = \det X \langle X^{-T}, dX\rangle$
- $d\left(\text{tr } X\right) = \langle I, dX\rangle$
- $df(g(x)) = \dfrac{df}{dg} \cdot dg(x)$
- $H = (J(\nabla f))^T$
- $d(X^{-1}) = -X^{-1}(dX)X^{-1}$

Матричное дифференцирование. Пример 1

Example

Найдите $df, \nabla f(x)$, if $f(x) = \langle x, Ax \rangle - b^T x + c$.

Матричное дифференцирование. Пример 2

Example

Найдите $df, \nabla f(x)$, if $f(x) = \ln\langle x, Ax\rangle$.

1. Необходимо, чтобы A была положительно определенной, потому что она стоит в показателе логарифма. Значит, $A \in \mathbb{S}^n_{++}$ Найдем дифференциал:

$$
df = d\left(\ln\langle x, Ax\rangle\right) = \frac{d\left(\langle x, Ax\rangle\right)}{\langle x, Ax\rangle} = \frac{\langle dx, Ax\rangle + \langle x, d(Ax)\rangle}{\langle x, Ax\rangle} =
$$

$$
= \frac{\langle Ax, dx\rangle + \langle x, Adx\rangle}{\langle x, Ax\rangle} = \frac{\langle Ax, dx\rangle + \langle A^T x, dx\rangle}{\langle x, Ax\rangle} = \frac{\langle (A + A^T)x, dx\rangle}{\langle x, Ax\rangle}
$$

Матричное дифференцирование. Пример 2

Example

Найдите $df, \nabla f(x)$, if $f(x) = \ln \langle x, Ax\rangle$.

1. Необходимо, чтобы A была положительно определенной, потому что она стоит в показателе логарифма. Значит, $A \in \mathbb{S}^n_{++}$ Найдем дифференциал:

$$
df = d\left(\ln \langle x, Ax\rangle\right) = \frac{d\left(\langle x, Ax\rangle\right)}{\langle x, Ax\rangle} = \frac{\langle dx, Ax\rangle + \langle x, d(Ax)\rangle}{\langle x, Ax\rangle} =
$$

$$
= \frac{\langle Ax, dx\rangle + \langle x, Adx\rangle}{\langle x, Ax\rangle} = \frac{\langle Ax, dx\rangle + \langle A^T x, dx\rangle}{\langle x, Ax\rangle} = \frac{\langle (A + A^T)x, dx\rangle}{\langle x, Ax\rangle}
$$

2. Заметим, что наша главная цель - получить формулу вида $df = \langle \cdot, dx\rangle$

$$
df = \left\langle \frac{2Ax}{\langle x, Ax\rangle}, dx\right\rangle
$$

Следовательно, градиент равен: $\nabla f(x) = \dfrac{2Ax}{\langle x, Ax\rangle}$

Матричное дифференцирование. Пример 3

Example

Найдите $df, \nabla f(X)$, если $f(X) = \langle S, X\rangle - \log\det X$.