

Основы линейной алгебры. SVD, Skeleton.  
Градиент. 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: <sup>1</sup>

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

---

<sup>1</sup>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: <sup>1</sup>

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

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.

---

<sup>1</sup>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: Equivalent 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  $A \succ (<) 0$ . 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  $A \succ (<)0$ . 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  $x \neq 0 : x^T A x > (<) 0$ . Мы обозначаем это как  $A \succ (<) 0$ . 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?

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  $A \succ (<) 0$ . 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:

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

## 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:

- $C = AB \quad C^T = B^T A^T$
- $AB \neq BA$
- $e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k$
- $e^{A+B} \neq e^A e^B$  (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:

- $C = AB \quad C^T = B^T A^T$
- $AB \neq BA$
- $e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k$
- $e^{A+B} \neq e^A e^B$  (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.  $(A_1 (A_2 (A_3 x)))$  (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.  $(A_1 (A_2 (A_3 x)))$  (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  $x$ :

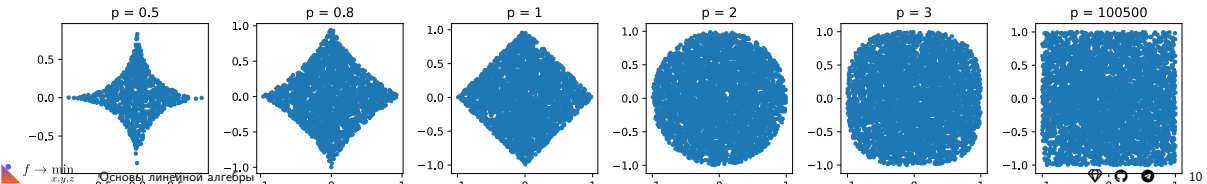
$$\|x\|_{\infty} = \max_i |x_i|$$

$L_1$  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.

Unit disk in the  $p$ -th norm



## 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 :

$$\langle x, Ay \rangle = \langle A^T x, y \rangle \text{ и } \langle x, yB \rangle = \langle xB^T, y \rangle$$

## 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  $\lambda$  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

## i Theorem

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

## i Proof

1.  $\rightarrow$  Предположим, что собственное число  $\lambda$  отрицательно и пусть  $x$  - соответствующий ему собственный вектор. Тогда

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

что противоречит условию  $A \succeq 0$ .

# Собственные числа и собственные вектора

## i Theorem

$A \succeq (>)0 \Leftrightarrow$  все собственные числа матрицы  $A \geq (>)0$

## i Proof

1.  $\rightarrow$  Предположим, что собственное число  $\lambda$  отрицательно и пусть  $x$  - соответствующий 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  $v_1, \dots, v_n$ , составляющих ортогональный базис в  $\mathbb{R}^n$ . Рассмотрим любой  $x \in \mathbb{R}^n$ .

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

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  $A$  вещественная симметричная матрица размера  $n \times n$ . Тогда  $A$  может быть разложена как

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

---

<sup>2</sup>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  $A$  вещественная 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  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ . (Вещественные) числа  $\lambda_i$  - 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.<sup>2</sup>

---

<sup>2</sup>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  $A$  вещественная 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  $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ . (Вещественные) числа  $\lambda_i$  - 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.<sup>2</sup>

Обычно собственные числа упорядочивают следующим образом:  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$ . 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  $\lambda_1(A) = \lambda_{\max}(A)$ , а наименьшее как  $\lambda_n(A) = \lambda_{\min}(A)$ .

---

<sup>2</sup>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

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

## Ещё о собственных значениях

Максимальное и минимальное собственное значение удовлетворяют соотношениям

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

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

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



## Ещё о собственных значениях

Максимальное и минимальное собственное значение удовлетворяют соотношениям

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

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

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

**Число обусловленности** невырожденной матрицы вводится следующим образом

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

## Ещё о собственных значениях

Максимальное и минимальное собственное значение удовлетворяют соотношениям

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

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

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

**Число обусловленности** невырожденной матрицы вводится следующим образом

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

Если мы используем спектральную норму, то можно получить:

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

Если, более того,  $A \in \mathbb{S}_{++}^n$ :  $\kappa(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$

## Сингулярное разложение

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

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

## Сингулярное разложение

Предположим,  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  и  $\text{rank } A = r$ . 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  $\Sigma$  - диагональная матрица  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$  такая, что

## Сингулярное разложение

Предположим,  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  и  $\text{rank } A = r$ . 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  $\Sigma$  - диагональная матрица  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$  такая, что

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

## Сингулярное разложение

Предположим,  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  и  $\text{rank } A = r$ . 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  $\Sigma$  - диагональная матрица  $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$  такая, что

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

Эта факторизация называется **сингулярным разложением (SVD)** матрицы  $A$ . Столбцы  $U$  называются левыми сингулярными векторами  $A$ , столбцы  $V$  - правыми сингулярными векторами, и  $\sigma_i$  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

## i Question

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

## i 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  $\text{rank } r$ , 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  $\text{rank } r$ , 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  $\text{rank } r$ , 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.

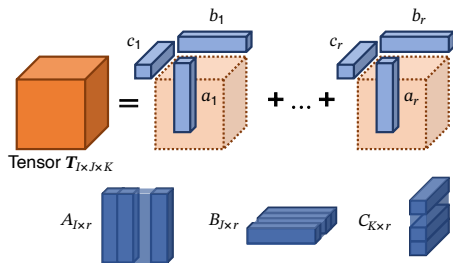


Рис. 4: Illustration of Canonical Polyadic decomposition

### **i** 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

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

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

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

## Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

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

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

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



## Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

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

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

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

## Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

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

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

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

## Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

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

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

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

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

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

## Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные числа матрицы

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

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

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

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

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

### 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  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  - 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  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  - 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  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  - 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  $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  - 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  $x_0$ .

Для простоты анализа некоторых подходов часто удобно заменить  $f(x)$  на  $f_{x_0}^I(x)$  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  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , 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  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ , 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  $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . Тогда вектор, содержащий все частные производные первого порядка:

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

# Градиент

Пусть  $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . 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.

## i Example

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

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

Этот вектор указывает направление наибольшего роста функции в точке.

## i Question

Как величина градиента связана с крутизной функции?

## Гессиан

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

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

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

### i 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.

### i Question

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

## Теорема Шварца

Пусть функция  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . 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  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ . 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:

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

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

### i 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 понятия градиента многомерной функции  $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  - 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.

## i Question

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

## i Example

Для функции

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

Якобиан равен:

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

## i Question

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

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

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

## i Theorem

Пусть  $x \in S$  - внутренняя точка множества  $S$ , и пусть  $D : U \rightarrow V$  - 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  $D : U \rightarrow V$  функция  $f$  не дифференцируема в точке  $x$  с производной  $D$ , то мы говорим, что  $f$  не дифференцируема в точке  $x$ .

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

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

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).

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

# Свойства дифференциалов

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

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

# Свойства дифференциалов

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

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



# Свойства дифференциалов

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

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

# Свойства дифференциалов

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

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

# Свойства дифференциалов

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

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

# 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:

$$\begin{aligned} df &= d(\ln \langle x, Ax \rangle) = \frac{d(\langle x, Ax \rangle)}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle dx, Ax \rangle + \langle x, d(Ax) \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \\ &= \frac{\langle Ax, dx \rangle + \langle x, Adx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle Ax, dx \rangle + \langle A^T x, dx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle (A + A^T)x, dx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} \end{aligned}$$

## Матричное дифференцирование. Пример 2

### i 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:

$$\begin{aligned} df &= d(\ln \langle x, Ax \rangle) = \frac{d(\langle x, Ax \rangle)}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle dx, Ax \rangle + \langle x, d(Ax) \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \\ &= \frac{\langle Ax, dx \rangle + \langle x, Adx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle Ax, dx \rangle + \langle A^T x, dx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} = \frac{\langle (A + A^T)x, dx \rangle}{\langle x, Ax \rangle} \end{aligned}$$

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:  $\nabla f(x) = \frac{2Ax}{\langle x, Ax \rangle}$

## Матричное дифференцирование. Пример 3

### Example

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