A Corgi dog and a yellow rubber duck are positioned in front of a chalkboard. The chalkboard features a graph of a gradient function, a pink 'X' mark, and various mathematical notations including 'GRADIENT FUNCTION', 'Nabla', and 'f -> min'.

Вспоминаем линейную алгебру.

Даниил Меркулов

Методы оптимизации. МФТИ

Вспоминаем линейную алгебру

Векторы и матрицы

Мы будем считать, что все векторы являются столбцами по умолчанию. Пространство векторов длины n обозначается \mathbb{R}^n , а пространство матриц размера $m \times n$ с вещественными элементами обозначается $\mathbb{R}^{m \times n}$. То есть ¹:

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

¹Подробный вводный курс по прикладной линейной алгебре можно найти в книге Introduction to Applied Linear Algebra – Vectors, Matrices, and Least Squares - книга от Stephen Boyd & Lieven Vandenberghe, которая указана в источнике. Также полезен материал по линейной алгебре приведенный в приложении А книги Numerical Optimization by Jorge Nocedal Stephen J. Wright.

Векторы и матрицы

Мы будем считать, что все векторы являются столбцами по умолчанию. Пространство векторов длины n обозначается \mathbb{R}^n , а пространство матриц размера $m \times n$ с вещественными элементами обозначается $\mathbb{R}^{m \times n}$. То есть ¹:

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

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

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

Мы будем писать $x \geq 0$ и $x \neq 0$ для обозначения покомпонентных неравенств

¹Подробный вводный курс по прикладной линейной алгебре можно найти в книге Introduction to Applied Linear Algebra – Vectors, Matrices, and Least Squares - книга от Stephen Boyd & Lieven Vandenberghe, которая указана в источнике. Также полезен материал по линейной алгебре приведенный в приложении А книги Numerical Optimization by Jorge Nocedal Stephen J. Wright.

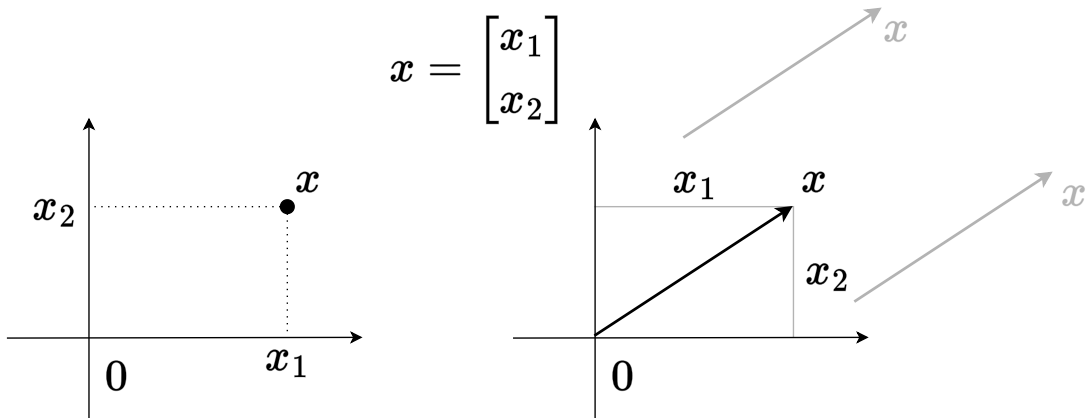


Рис. 1: Эквивалентные представления вектора

Матрица A называется симметричной, если $A = A^T$. Обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество квадратных симметричных матриц размерности n). Заметим, что только квадратная матрица может быть симметричной по определению.

Матрица A называется симметричной, если $A = A^T$. Обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество квадратных симметричных матриц размерности n). Заметим, что только квадратная матрица может быть симметричной по определению.

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

Матрица A называется симметричной, если $A = A^T$. Обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество квадратных симметричных матриц размерности n). Заметим, что только квадратная матрица может быть симметричной по определению.

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

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

Question

Верно ли, что положительно определенная матрица имеет все положительные элементы?

Матрица A называется симметричной, если $A = A^T$. Обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество квадратных симметричных матриц размерности n). Заметим, что только квадратная матрица может быть симметричной по определению.

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

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

Question

Верно ли, что положительно определенная матрица имеет все положительные элементы?

Question

Верно ли, что если матрица симметрична, то она должна быть положительно определенной?

Матрица A называется симметричной, если $A = A^T$. Обозначается как $A \in \mathbb{S}^n$ (множество квадратных симметричных матриц размерности n). Заметим, что только квадратная матрица может быть симметричной по определению.

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

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

Question

Верно ли, что положительно определенная матрица имеет все положительные элементы?

Question

Верно ли, что если матрица симметрична, то она должна быть положительно определенной?

Question

Верно ли, что если матрица положительно определена, то она должна быть симметричной?

Матричное умножение (matmul)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, а B - матрица размера $n \times p$, тогда их произведение AB равно:

$$C = AB$$

Тогда C - матрица размера $m \times p$, элемент (i, j) которой равен:

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

Эта операция в наивной форме требует $\mathcal{O}(n^3)$ арифметических операций, где n обычно считается наибольшей размерностью матриц.

Матричное умножение (matmul)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, а B - матрица размера $n \times p$, тогда их произведение AB равно:

$$C = AB$$

Тогда C - матрица размера $m \times p$, элемент (i, j) которой равен:

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

Эта операция в наивной форме требует $\mathcal{O}(n^3)$ арифметических операций, где n обычно считается наибольшей размерностью матриц.

Question

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

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, а x - вектор длины n , тогда i -й элемент произведения Ax равен:

$$z = Ax$$

равен:

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

Эта операция в наивной форме требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где n обычно считается наибольшей размерностью входов.

Отметим, что:

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

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, а x - вектор длины n , тогда i -й элемент произведения Ax равен:

$$z = Ax$$

равен:

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

Эта операция в наивной форме требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где n обычно считается наибольшей размерностью входов.

Отметим, что:

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

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, а x - вектор длины n , тогда i -й элемент произведения Ax равен:

$$z = Ax$$

равен:

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

Эта операция в наивной форме требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где n обычно считается наибольшей размерностью входов.

Отметим, 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 $m \times n$, а x - вектор длины n , тогда i -й элемент произведения Ax равен:

$$z = Ax$$

равен:

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

Эта операция в наивной форме требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где n обычно считается наибольшей размерностью входов.

Отметим, 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 коммутируют, то есть $AB = BA$, то $e^{A+B} = e^A e^B$)

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Пусть A - матрица размера $m \times n$, а x - вектор длины n , тогда i -й элемент произведения Ax равен:

$$z = Ax$$

равен:

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

Эта операция в наивной форме требует $\mathcal{O}(n^2)$ арифметических операций, где n обычно считается наибольшей размерностью входов.

Отметим, 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 коммутируют, то есть $AB = BA$, то $e^{A+B} = e^A e^B$)
- $\langle x, Ay \rangle = \langle A^T x, y \rangle$

Пример. Простая, но важная идея о матричных вычислениях.


Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ - случайные квадратные плотные матрицы, и $x \in \mathbb{R}^n$ - вектор. Вам нужно вычислить b .

Какой способ лучше всего использовать?

1. $A_1 A_2 A_3 x$ (слева направо)

Проверьте простой  код после вашего интуитивного ответа.

Пример. Простая, но важная идея о матричных вычислениях.

Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ - случайные квадратные плотные матрицы, и $x \in \mathbb{R}^n$ - вектор. Вам нужно вычислить b .

Какой способ лучше всего использовать?

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

Проверьте простой  код после вашего интуитивного ответа.

Пример. Простая, но важная идея о матричных вычислениях.


Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ - случайные квадратные плотные матрицы, и $x \in \mathbb{R}^n$ - вектор. Вам нужно вычислить b .

Какой способ лучше всего использовать?

1. $A_1 A_2 A_3 x$ (слева направо)
2. $(A_1 (A_2 (A_3 x)))$ (справа налево)
3. Не имеет значения

Проверьте простой  код после вашего интуитивного ответа.

Пример. Простая, но важная идея о матричных вычислениях.


Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ - случайные квадратные плотные матрицы, и $x \in \mathbb{R}^n$ - вектор. Вам нужно вычислить b .

Какой способ лучше всего использовать?

1. $A_1 A_2 A_3 x$ (слева направо)
2. $(A_1 (A_2 (A_3 x)))$ (справа налево)
3. Не имеет значения
4. Результаты первых двух вариантов не будут одинаковыми.

Проверьте простой  код после вашего интуитивного ответа.

Нормы

Норма - это **количественная мера малости вектора** и обычно обозначается как $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять определенным свойствам:

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

Нормы

Норма - это **количественная мера малости вектора** и обычно обозначается как $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять определенным свойствам:

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

Нормы

Норма - это **количественная мера малости вектора** и обычно обозначается как $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять определенным 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 **количественная мера малости вектора** и обычно обозначается как $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять определенным 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 **количественная мера малости вектора** и обычно обозначается как $\|x\|$.

Норма должна удовлетворять определенным свойствам:

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

Расстояние между двумя векторами определяется как

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

Наиболее широко используемой нормой является **Евклидова норма**:

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

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

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

p -норма вектора

Существуют два очень важных частных случая. Бесконечность-норма, или норма Чебышева, определяется как максимальное абсолютное значение элемента вектора:

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

p -норма вектора

Существуют два очень важных частных случая. Бесконечность-норма, или норма Чебышева, определяется как максимальное абсолютное значение элемента вектора:

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

l_1 норма (или **манхэттенское расстояние**) определяется как сумма модулей элементов вектора x :

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

p -норма вектора

Существуют два очень важных частных случая. Бесконечность-норма, или норма Чебышева, определяется как максимальное абсолютное значение элемента вектора:

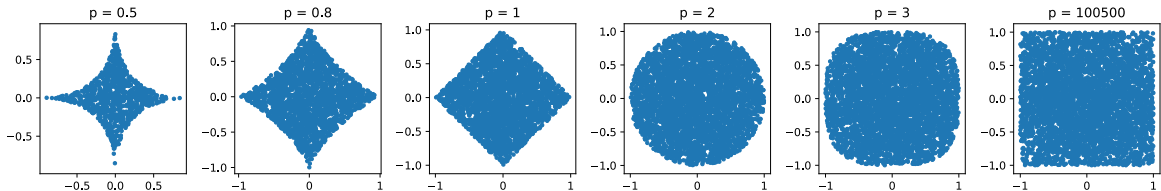
$$\|x\|_{\infty} = \max_i |x_i|$$

l_1 норма (или **манхэттенское расстояние**) определяется как сумма модулей элементов вектора x :

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

l_1 норма играет очень важную роль: она все связана с методами **compressed sensing**, которые появились в середине 00-х как одна из популярных тем исследований. Код для изображения ниже доступен [здесь](#):. Также посмотрите это видео.

Unit disk in the p -th norm



Матричные нормы

В некотором смысле между матрицами и векторами нет большой разницы (вы можете векторизовать матрицу), и здесь появляется самая простая матричная норма **Фробениуса**:

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

Матричные нормы

В некотором смысле между матрицами и векторами нет большой разницы (вы можете векторизовать матрицу), и здесь появляется самая простая матричная норма **Фробениуса**:

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

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

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

Она не может быть вычислена непосредственно из элементов с помощью простой формулы, как в случае нормы Фробениуса, однако, существуют эффективные алгоритмы для ее вычисления. Она напрямую связана с **сингулярным разложением** (SVD) матрицы. Для неё справедливо:

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

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

Скалярное произведение

Стандартное **скалярное произведение** между векторами x и y из \mathbb{R}^n равно:

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

Здесь x_i и y_i - i -ые компоненты соответствующих векторов.

Example

Докажите, что вы можете переставить матрицу внутри скалярного произведения с транспонированием:

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

Скалярное произведение матриц

Стандартное **скалярное произведение** между матрицами X и Y из $\mathbb{R}^{m \times n}$ равно:

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

Question

Существует ли связь между нормой Фробениуса $\|\cdot\|_F$ и скалярным произведением между матрицами $\langle \cdot, \cdot \rangle$?

Собственные вектора и собственные значения

Число λ является собственным значением квадратной 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 ни одно из её собственных значений не равно нулю. Собственные значения симметричных матриц являются вещественными числами, в то время как несимметричные матрицы могут иметь комплексные собственные значения. Если матрица положительно определена и симметрична, то все её собственные значения являются положительными вещественными числами.

Собственные вектора и собственные значения

i Theorem

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

Proof

1. \rightarrow Предположим, что некоторое собственное значение λ отрицательно, и пусть x обозначает соответствующий собственный вектор. Тогда

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

что противоречит условию $A \succeq 0$.

Собственные вектора и собственные значения

i Theorem

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

Proof

1. \rightarrow Предположим, что некоторое собственное значение λ отрицательно, и пусть x обозначает соответствующий 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 набор собственных векторов v_1, \dots, v_n , которые образуют ортонормированный базис в \mathbb{R}^n . Возьмем любой вектор $x \in \mathbb{R}^n$.

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

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

Спектральное разложение (eigendecomposition)

Пусть $A \in S_n$, т.е. A - вещественная симметричная матрица размера $n \times n$. Тогда A может быть разложена как

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

²Хорошая шпаргалка с разложением матриц доступна на сайте курса по линейной алгебре [website](#).

Спектральное разложение (eigendecomposition)

Пусть $A \in S_n$, т.е. 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, т.е. удовлетворяет $Q^T Q = I$, и $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$. Вещественные числа λ_i являются собственными значениями A и являются корнями характеристического полинома $\det(A - \lambda I)$. Столбцы Q образуют ортонормированный набор собственных векторов A . Такое разложение называется спектральным.²

²Хорошая шпаргалка с разложением матриц доступна на сайте курса по линейной алгебре [website](#).

Спектральное разложение (eigendecomposition)

Пусть $A \in S_n$, т.е. 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, т.е. удовлетворяет $Q^T Q = I$, и $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$. Вещественные числа λ_i являются собственными значениями A и являются корнями характеристического полинома $\det(A - \lambda I)$. Столбцы Q образуют ортонормированный набор собственных векторов A . Такое разложение называется спектральным.²

Мы обычно упорядочиваем вещественные собственные значения как $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$. Мы используем обозначение $\lambda_i(A)$ для обозначения i -го наибольшего собственного значения $A \in S$. Мы обычно пишем наибольшее или максимальное собственное значение как $\lambda_1(A) = \lambda_{\max}(A)$, и наименьшее или минимальное собственное значение как $\lambda_n(A) = \lambda_{\min}(A)$.

²Хорошая шпаргалка с разложением матриц доступна на сайте курса по линейной алгебре website.

Собственные значения

Наибольшее и наименьшее вещественные собственные значения удовлетворяют

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

Собственные значения

Наибольшее и наименьшее вещественные собственные значения удовлетворяют

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

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

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

Собственные значения

Наибольшее и наименьшее вещественные собственные значения удовлетворяют

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

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

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

Число обусловленности невырожденной матрицы определяется как

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

Собственные значения

Наибольшее и наименьшее вещественные собственные значения удовлетворяют

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

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

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

Число обусловленности невырожденной матрицы определяется как

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

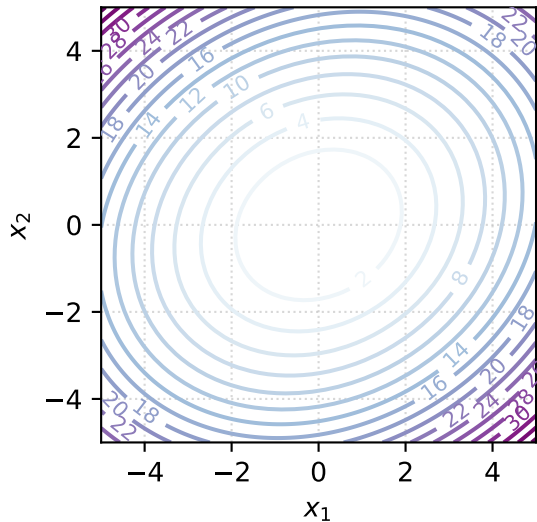
Если мы используем спектральную матричную норму, мы можем получить:

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

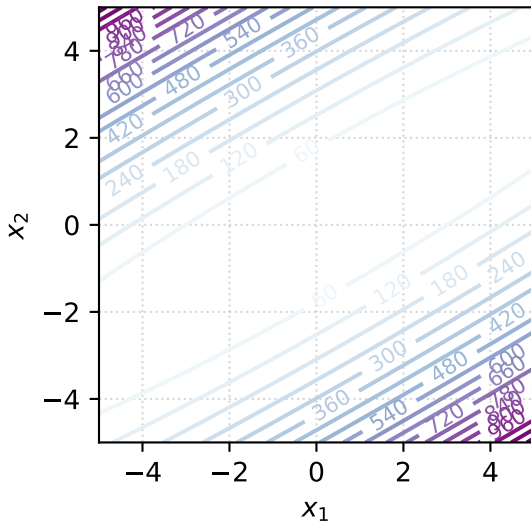
Если, кроме того, $A \in \mathbb{S}_{++}^n$: $\kappa(A) = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$

Число обусловленности

$\kappa = 1.5$



$\kappa = 50$



Сингулярное разложение (SVD)

Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ с рангом $A = r$. Тогда A может быть разложена как

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

Сингулярное разложение (SVD)

Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ с рангом $A = r$. Тогда A может быть разложена 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 является диагональной матрицей с $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$, такой что

Сингулярное разложение (SVD)

Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ с рангом $A = r$. Тогда A может быть разложена 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 является диагональной матрицей с $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$, такой что

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

Сингулярное разложение (SVD)

Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ с рангом $A = r$. Тогда A может быть разложена 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 является диагональной матрицей с $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$, такой что

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

Это разложение называется **сингулярным разложением (SVD)** матрицы A . Столбцы U называются левыми сингулярными векторами A , столбцы V называются правыми сингулярными векторами, и числа σ_i являются сингулярными значениями. Сингулярное разложение может быть записано как

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

где $u_i \in \mathbb{R}^m$ являются левыми сингулярными векторами, и $v_i \in \mathbb{R}^n$ являются правыми сингулярными векторами.

Сингулярное разложение

i Question

Пусть $A \in \mathbb{S}_{++}^n$. Что мы можем сказать о связи между его собственными значениями и сингулярными значениями?

Сингулярное разложение

i Question

Пусть $A \in \mathbb{S}_{++}^n$. Что мы можем сказать о связи между его собственными значениями и сингулярными значениями?

i Question

Как сингулярные значения матрицы связаны с её собственными значениями, особенно для симметричной матрицы?

Пример. Связь между Фробениусовой нормой и сингулярными значениями.

Пусть $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, и пусть $q := \min\{m, n\}$. Докажите, что

$$\|A\|_F^2 = \sum_{i=1}^q \sigma_i^2(A),$$

где $\sigma_1(A) \geq \dots \geq \sigma_q(A) \geq 0$ - сингулярные значения матрицы A . Подсказка: используйте связь между Фробениусовой нормой и скалярным произведением и SVD.

Ранговое разложение (Skeleton decomposition)

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

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

Ранговое разложение (Skeleton decomposition)

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

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

Последнее выражение относится к забавному факту: вы можете случайным образом выбрать r линейно независимых столбцов матрицы и любые r линейно независимых строк матрицы и хранить только их с возможностью точно (!) восстановить всю матрицу.

Ранговое разложение (Skeleton decomposition)

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

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

Последнее выражение относится к забавному факту: вы можете случайным образом выбрать r линейно независимых столбцов матрицы и любые r линейно независимых строк матрицы и хранить только их с возможностью точно (!) восстановить всю матрицу.

Применения для рангового разложения:

- Сжатие модели, сжатие данных и ускорение вычислений в численном анализе: для матрицы ранга r с $r \ll n, m$ необходимо хранить $\mathcal{O}((n+m)r) \ll nm$ элементов.

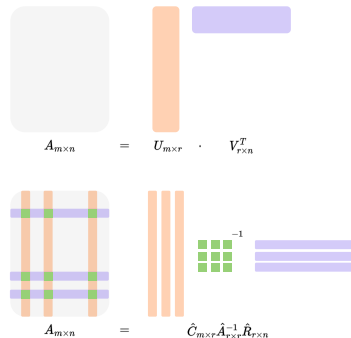


Рис. 3: Иллюстрация рангового разложения

Ранговое разложение (Skeleton decomposition)

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

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

Последнее выражение относится к забавному факту: вы можете случайным образом выбрать r линейно независимых столбцов матрицы и любые r линейно независимых строк матрицы и хранить только их с возможностью точно (!) восстановить всю матрицу.

Применения для рангового разложения:

- Сжатие модели, сжатие данных и ускорение вычислений в численном анализе: для матрицы ранга r с $r \ll n, m$ необходимо хранить $\mathcal{O}((n+m)r) \ll nm$ элементов.
- Извлечение признаков в машинном обучении

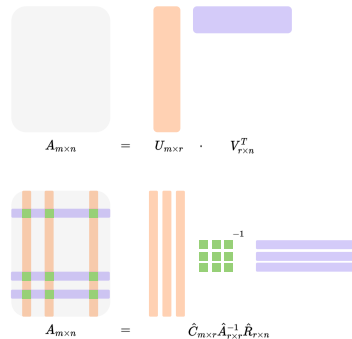


Рис. 3: Иллюстрация рангового разложения

Ранговое разложение (Skeleton decomposition)

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

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

Последнее выражение относится к забавному факту: вы можете случайным образом выбрать r линейно независимых столбцов матрицы и любые r линейно независимых строк матрицы и хранить только их с возможностью точно (!) восстановить всю матрицу.

Применения для рангового разложения:

- Сжатие модели, сжатие данных и ускорение вычислений в численном анализе: для матрицы ранга r с $r \ll n, m$ необходимо хранить $\mathcal{O}((n+m)r) \ll nm$ элементов.
- Извлечение признаков в машинном обучении
- Все приложения, где применяется SVD, так как ранговое разложение может быть преобразовано в форму усеченного SVD.

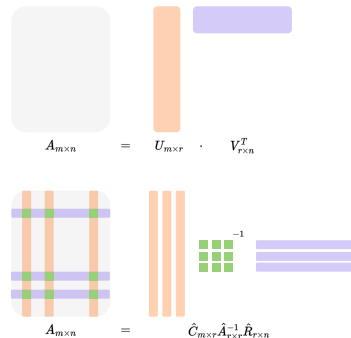


Рис. 3: Иллюстрация рангового разложения

Каноническое тензорное разложение

Можно рассмотреть обобщение рангового разложения на структуры данных более высокого порядка, такие как тензоры, что означает представление тензора в виде суммы r простых тензоров.

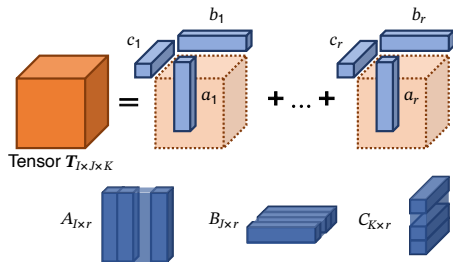


Рис. 4: Иллюстрация канонического тензорного разложения

Example

Заметьте, что существует множество тензорных разложений: каноническое, Таккера, тензорный поезд (ТТ), тензорное кольцо (ТР) и другие. В случае тензоров мы не имеем прямого определения ранга для всех типов разложений. Например, для разложения Тензорного поезда ранг является не скаляром, а вектором.

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные значения

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

Определитель имеет несколько интересных свойств. Например,

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

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные значения

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

Определитель имеет несколько интересных свойств. Например,

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

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные значения

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

Определитель имеет несколько интересных свойств. Например,

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

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные значения

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

Определитель имеет несколько интересных свойств. Например,

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

Определитель и след матрицы

Определитель и след матрицы могут быть выражены через собственные значения

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

Определитель имеет несколько интересных свойств. Например,

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

Не забывайте о циклическом свойстве следа для произвольных матриц A, B, C, D (предполагая, 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 значения

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

Определитель имеет несколько интересных свойств. Например,

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

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

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

Question

Как определитель матрицы связан с её обратимостью?

Задача. Найдите свое скалярное произведение.

Упростите следующее выражение:

$$\sum_{i=1}^n \langle S^{-1} a_i, a_i \rangle,$$

где $S = \sum_{i=1}^n a_i a_i^T$, $a_i \in \mathbb{R}^n$, $\det(S) \neq 0$

Пример. LoRA: Low-Rank Adaptation of Large Language Models (arXiv:2106.09685)

Поскольку современные LLM слишком большие, чтобы влезть в память среднего пользователя, мы используем некоторые трюки, чтобы сделать их потребление памяти меньше. Одним из наиболее популярных трюков является LoRA (Low-Rank Adaptation of Large Language Models).

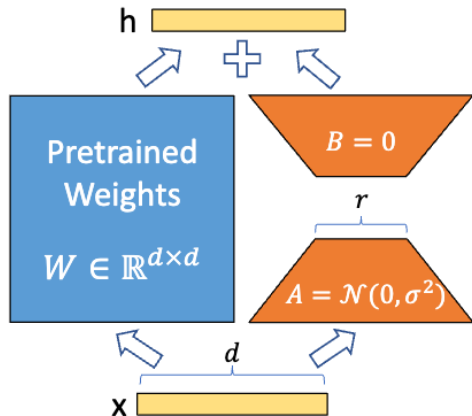
Предположим, у нас есть матрица $W \in \mathbb{R}^{d \times k}$ и мы хотим выполнить следующее обновление:

$$W = W_0 + \Delta W.$$

Основная идея LoRA состоит в том, чтобы разложить обновление ΔW на две низкоранговые матрицы:

$$W = W_0 + \Delta W = W_0 + BA, \quad B \in \mathbb{R}^{d \times r}, A \in \mathbb{R}^{r \times k}, \\ \text{rank}(A) = \text{rank}(B) = r \ll \min\{d, k\}.$$

Проверьте 📁 ноутбук для примера реализации LoRA.



Матрично-векторное дифференцирование

Градиент

Пусть $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, тогда вектор, который содержит все первые частные производные:

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

Градиент

Пусть $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, тогда вектор, который содержит все первые частные производные:

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

называется градиентом функции $f(x)$. Этот вектор указывает направление наискорейшего возрастания. Таким образом, вектор $-\nabla f(x)$ указывает направление наискорейшего убывания функции в точке. Кроме того, вектор градиента всегда ортогонален линии уровня в точке.

i Example

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

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

Он указывает направление наискорейшего возрастания функции.

i Question

Как связана норма градиента с крутизной функции?

Гессиан

Пусть $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, тогда матрица, содержащая все вторые частные производные:

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

Гессиан

Пусть $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, тогда матрица, содержащая все вторые частные производные:

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

Гессиан может быть тензором: $(f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m)$ Таким образом, это просто трехмерный тензор, каждый срез которого 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 равен:

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

Эта матрица содержит информацию о кривизне функции в разных направлениях.

i Question

Как можно использовать гессиан для определения выпуклости или вогнутости функции?

Теорема Шварца

Пусть $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ - функция. 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 . То есть,

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

Теорема Шварца

Пусть $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ - функция. 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 . То есть,

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

Согласно данной теореме, если смешанные частные производные непрерывны на открытом множестве, то гессиан симметричен. То есть,

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

Эта симметричность упрощает вычисления и анализ, связанные с гессианом в различных приложениях, особенно в оптимизации.

i Контрпример Шварца

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



Можно проверить, 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 каждой другой точке симметричность выполняется.

Якобиан

Обобщением понятия градиента на случай многомерной функции $f(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ является следующая матрица:

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

Она содержит информацию о скорости изменения функции по отношению к ее входу.

i Question

Можно ли связать эти три определения выше (градиент, якобиан, и гессиан) с помощью одного утверждения?

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 скалярных 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}	$\mathbb{R}^{m \times n}$	$\frac{\partial f}{\partial x_{ij}}$

Аппроксимация Тейлора первого порядка

Аппроксимация Тейлора первого порядка, также известная как линейное приближение, строится вблизи некоторой точки x_0 . Если $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация первого порядка задается следующим образом:

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

где:

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

Аппроксимация Тейлора первого порядка

Аппроксимация Тейлора первого порядка, также известная как линейное приближение, строится вблизи некоторой точки x_0 . Если $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация первого порядка задается следующим образом:

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

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 линейное приближение, строится вблизи некоторой точки x_0 . Если $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация первого порядка задается следующим образом:

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

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 линейное приближение, строится вблизи некоторой точки x_0 . Если $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация первого порядка задается следующим образом:

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

где:

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

Часто для упрощения теоретического анализа в некоторых методах заменяют функцию вблизи некоторой точки на её аппроксимацию

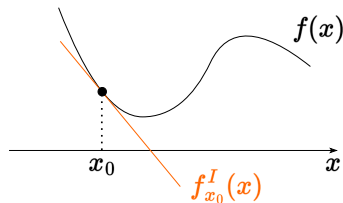


Рис. 6: Аппроксимация Тейлора первого порядка в окрестности точки x_0

Аппроксимация Тейлора второго порядка

Аппроксимация Тейлора второго порядка, также известная как квадратичное приближение, использует информацию о кривизне функции. Для дважды дифференцируемой функции $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, ее аппроксимация второго порядка, строящаяся вблизи некоторой точки x_0 , задается следующим образом:

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

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

Аппроксимация Тейлора второго порядка

Аппроксимация Тейлора второго порядка, также известная как квадратичное приближение, использует информацию о кривизне функции. Для дважды дифференцируемой функции $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, ее аппроксимация второго порядка, строящаяся вблизи некоторой точки x_0 , задается следующим образом:

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

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

Когда линейного приближения функции не достаточно, можно рассмотреть замену $f(x)$ на $f_{x_0}^{II}(x)$ в окрестности точки x_0 . В общем, приближения Тейлора дают нам способ локально аппроксимировать функции.

Аппроксимация первого порядка определяется градиентом функции в точке, т.е. нормалью к касательной гиперплоскости. А аппроксимация второго порядка представляет из себя параболу. Эти приближения особенно полезны в оптимизации и численных методах, потому что они предоставляют простой способ работы со сложными функциями.

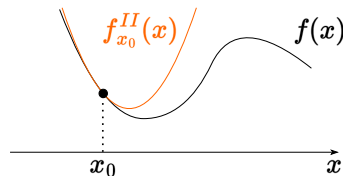


Рис. 7: Аппроксимация Тейлора второго порядка в окрестности точки x_0

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 $h \in U$ выполняется 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 .

После получения дифференциальной записи df мы можем получить градиент, используя следующую формулу:

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

После получения дифференциальной записи df мы можем получить градиент, используя следующую формулу:

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

Далее, если у нас есть дифференциал в такой форме и мы хотим вычислить вторую производную матричной/векторной функции, мы рассматриваем “старый” dx как константу dx_1 , затем вычисляем $d(df) = d^2f(x)$

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

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, а X и Y - переменные (или матричные функции).

- $dA = 0$

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, а X и Y - переменные (или матричные функции).

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

Свойства дифференциалов

Пусть A и B - постоянные матрицы, а 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, а 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, а 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, а 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, а 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, а 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, а 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, а 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, а 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, а 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, а 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

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

Матричное дифференцирование. Пример 2

i Example

Найти $df, \nabla f(x)$, если $f(x) = \ln \langle x, Ax \rangle$.

Матричное дифференцирование. Пример 2

Example

Найти $df, \nabla f(x)$, если $f(x) = \ln \langle x, Ax \rangle$.

1. Заметим, что A должна быть положительно определенной, потому что $\langle x, Ax \rangle$ аргумент логарифма и для любого x формула должна быть положительной. Таким образом, $A \in \mathbb{S}_{++}^n$. Давайте сначала 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

Найти $df, \nabla f(x)$, если $f(x) = \ln \langle x, Ax \rangle$.

1. Заметим, что A должна быть положительно определенной, потому что $\langle x, Ax \rangle$ аргумент логарифма и для любого x формула должна быть положительной. Таким образом, $A \in \mathbb{S}_{++}^n$. Давайте сначала 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. Наша основная цель - получить форму $df = \langle \cdot, dx \rangle$

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

Таким образом, градиент равен $\nabla f(x) = \frac{2Ax}{\langle x, Ax \rangle}$

Матричное дифференцирование. Пример 3

Example

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