
# 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]:

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

[1] Подробный 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 A 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]:

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

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

[1] Подробный 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.

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

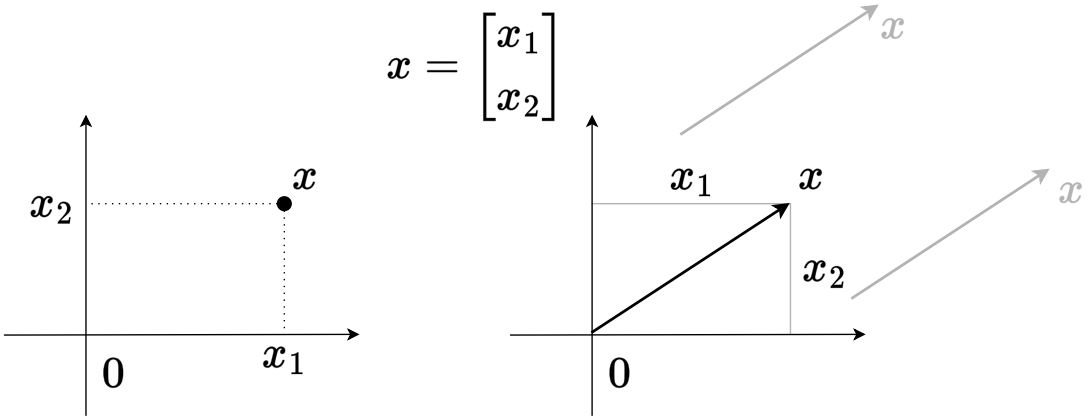



Рис. 1: Эквивалентные представления вектора

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 $x \neq 0 : x^T Ax > (<)0$. Обозначается как $A \succ (\prec)0$. 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 $x \neq 0 : x^T Ax > (<)0$. Обозначается как $A \succ (\prec)0$. Множество таких матриц обозначается как $\mathbb{S}^n_{++}(\mathbb{S}^n_{--})$

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

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

Матрица $A \in \mathbb{S}^n$ называется **положительно (отрицательно) полуопределенной**, если для всех $x : x^T Ax \geq (\leq) 0$. 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:

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

# 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:

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

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

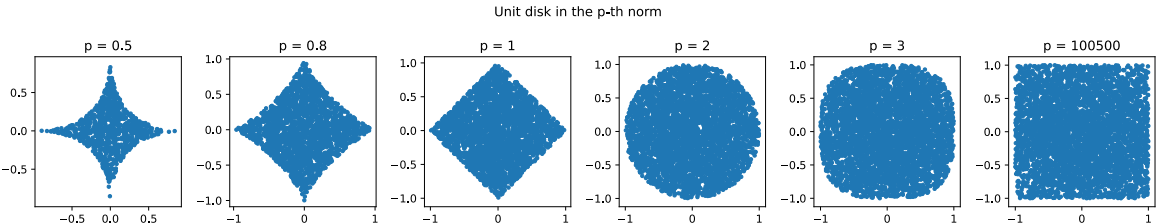
Существуют два очень важных частных случая. Бесконечность-норма, или норма Чебышева, определяется как максимальное абсолютное значение элемента вектора:

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

$l_1$ 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.



# 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: $\langle x, Ay \rangle = \langle A^T x, y \rangle$ 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 $\lambda$ 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

**Theorem**

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

**Proof**

1. $\rightarrow$ Предположим, что некоторое собственное значение $\lambda$ 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

**Theorem**

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

**Proof**

1. $\rightarrow$ Предположим, что некоторое собственное значение $\lambda$ 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 $v_1, \ldots, v_n$, которые образуют ортонормированный базис в $\mathbb{R}^n$. Возьмем любой вектор $x \in \mathbb{R}^n$.

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

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

# Спектральное разложение (eigendecomposition)

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

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

[2]Хорошая 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 $\lambda_i$ 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]

[2] Хорошая 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 $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, ..., \lambda_n)$. Вещественные числа $\lambda_i$ 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 $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ... \geq \lambda_n$. 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 $\lambda_1(A) = \lambda_{\text{max}}(A)$, и наименьшее или минимальное собственное значение как $\lambda_n(A) = \lambda_{\text{min}}(A)$.

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

# Собственные значения

Наибольшее и наименьшее вещественныесобственные значения удовлетворяют

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

# Собственные значения

Наибольшее и наименьшее вещественныесобственные значения удовлетворяют

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

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 вещественныесобственные значения удовлетворяют

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

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 вещественныесобственные значения удовлетворяют

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

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

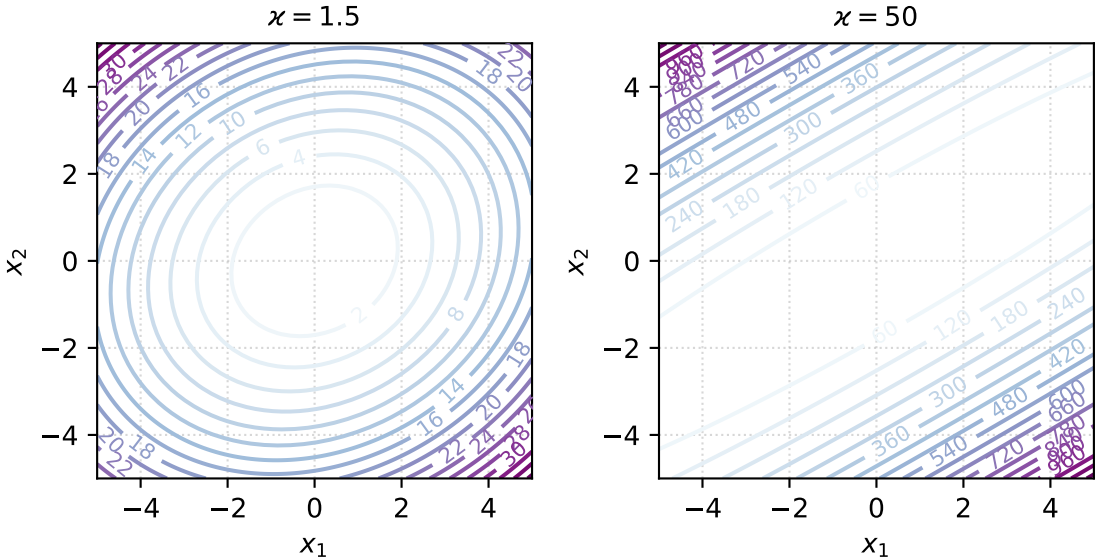
$$\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$$

Если мы используем спектральную матричную норму, мы можем получить:

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

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

# Число обусловленности



# 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 $\Sigma$ является диагональной матрицей с $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_r)$, 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 $\Sigma$ является диагональной матрицей с $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_r)$, такой что

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

# 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 $\Sigma$ является диагональной матрицей с $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, ..., \sigma_r)$, такой что

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

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

**Question**

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

# Сингулярное разложение

**Question**

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

**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 $\sigma_1(A) \geq ... \geq \sigma_q(A) \geq 0$ - 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.

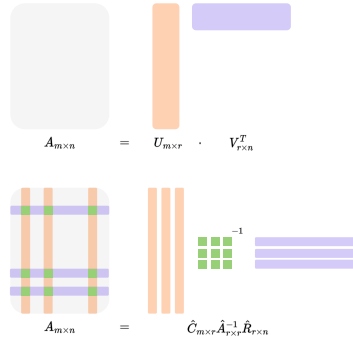



Рис. 3: Иллюстрация рангового разложения

# 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

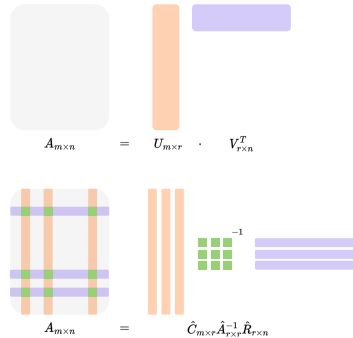



Рис. 3: Иллюстрация рангового разложения

# 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.

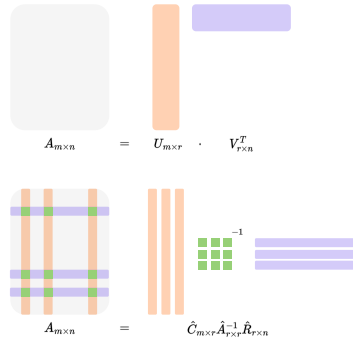



Рис. 3: Иллюстрация рангового разложения

# 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.

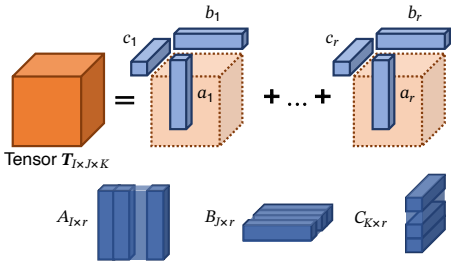



Рис. 4: Иллюстрация канонического тензорного разложения

**Example**

Заметьте, что существует множество тензорных разложений: каноническое, Таккера, тензорный поезд (TT), тензорное кольцо (TR) 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

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

Определитель имеет несколько интересныхсвойств. 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

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

Определитель имеет несколько интересныхсвойств. 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

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

Определитель имеет несколько интересныхсвойств. 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

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

Определитель имеет несколько интересныхсвойств. 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

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

Определитель имеет несколько интересныхсвойств. 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

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

Определитель имеет несколько интересныхсвойств. 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):

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

**Question**

Как определитель матрицы связан с её обратимостью?

# Задача. Знайте 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 вместиться 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 $\Delta W$ на две низкоранговые матрицы:

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

Проверьте 🐍 ноутбук для примера реализации LoRA.

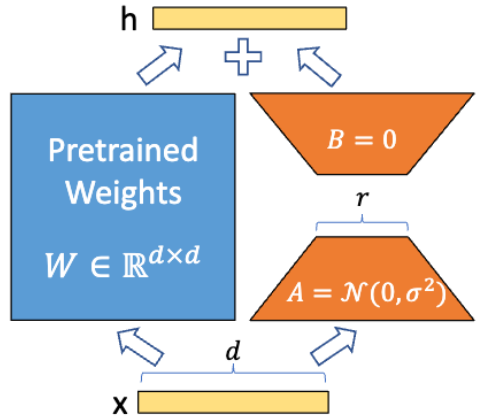



Рис. 5: Иллюстрация LoRA

# Матрично-векторное дифференцирование

# Градиент

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

**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.

**Question**

Как связана норма градиента с крутизной функции?

# Гессиан

Пусть $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 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 $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 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 может быть тензором: $(f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m)$ Таким образом, это просто трехмерный тензор, каждый срез которого это гессиан соответствующей скалярной функции $(\nabla^2 f_1(x), \dots, \nabla^2 f_m(x))$.

**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.

**Question**

Как можно использовать гессиан для определения выпуклости или вогнутости функции?

# Теорема Шварца

Пусть $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - 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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - 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,

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

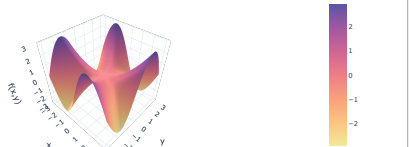
Согласно данной теореме, если смешанные частные производные непрерывны на открытом множестве, то гессиан симметричен. То есть,

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

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

## 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 $f(x) : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ 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.

**Question**

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

**Example**

Для функции

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

Якобиан равен:

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

**Question**

Как матрица Якоби связана с градиентом для скалярных функций?

# Итог

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

| X | Y | G | Name |
|---|---|---|---|
| $\mathbb{R}$ | $\mathbb{R}$ | $\mathbb{R}$ | $f'(x)$ (производная) |
| $\mathbb{R}^n$ | $\mathbb{R}$ | $\mathbb{R}^n$ | $\frac{\partial f}{\partial x_i}$ (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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ - дифференцируемая функция, то ее аппроксимация первого порядка задается следующим образом:

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

где:

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

# Аппроксимация Тейлора первого порядка

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

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

где:

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

# Аппроксимация Тейлора первого порядка

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

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

где:

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

# Аппроксимация Тейлора первого порядка

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

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

где:

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

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

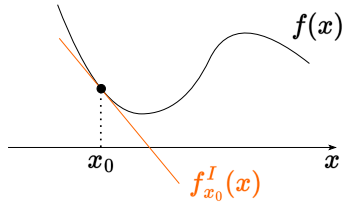



Рис. 6: Аппроксимация Тейлора первого порядка в окрестности точки $x_0$

# Аппроксимация Тейлора второго порядка

Аппроксимация Тейлора второго порядка, также известная как квадратичное приближение, использует информацию о кривизне функции. Для дважды дифференцируемой функции $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 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 $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, 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.

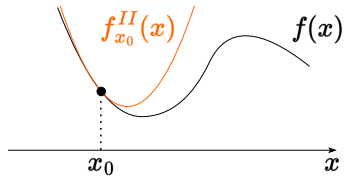



Рис. 7: Аппроксимация Тейлора второго порядка в окрестности точки $x_0$

# Дифференциалы

**Theorem**

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

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

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

# Дифференциалы

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

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

# Дифференциалы

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 $d(df) = d^2 f(x)$

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

# Свойства дифференциалов

Пусть $A$ и $B$ - постоянные матрицы, 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).

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

# Свойства дифференциалов

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

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

# Свойства дифференциалов

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

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

# Свойства дифференциалов

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

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

# Свойства дифференциалов

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

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

# Матричное дифференцирование. Пример 1

**Example**

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

# Матричное дифференцирование. Пример 2

**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:

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

# Матричное дифференцирование. Пример 2

**Example**

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:

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

2. 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 $\nabla f(x) = \dfrac{2Ax}{\langle x, Ax\rangle}$

# Матричное дифференцирование. Пример 3

**Example**

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