Машинное обучение, ВМК МГУ, осень 2024

Домашнее задание. Матричные вычисления и матричное дифференцирование.

Мягкий дедлайн: 29 октября, 23:59 (за каждый день просрочки снимается 1 балл)

Жёсткий дедлайн: 5 ноября, 23:59

Формат сдачи: pdf-файл, подготовленный с помощью ТеХ или скан рукописных записей (скан должен быть собран в один pdf-файл с порядком страниц, соответствующим задачам в задании).

Обозначения:

- $\langle x, y \rangle$ Евклидово скалярное произведение;
- $||x|| = \langle x, x \rangle^{1/2} = (x^T x)^{1/2}$ Евклидова норма вектора;
- $||A||_F = \langle A, A \rangle^{1/2} = \operatorname{tr}(A^T A)^{1/2}$ матричная норма Фробениуса;
- I_n единичная матрица размера $n \times n$;
- $\mathbb{R}^n_+ = \{ x \in \mathbb{R}^n \mid x_i \ge 0 \ \forall i \}, \ \mathbb{R}^n_{++} = \{ x \in \mathbb{R}^n \mid x_i > 0 \ \forall i \};$
- $\mathbb{S}^n = \{ A \in \mathbb{R}^{n \times n} \mid A = A^T \};$
- $\mathbb{S}^n_+ = \{ A \in \mathbb{S}^n \mid A$ неотр. определённая $\}$, $\mathbb{S}^n_{++} = \{ A \in \mathbb{S}^n \mid A$ полож. определённая $\}$.

Все задачи (каждый подпункт) оцениваются одинаково из общей суммы в 10 баллов.

1. Докажите тождество Вудбери:

$$(A + UCV)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}U(C^{-1} + VA^{-1}U)^{-1}VA^{-1},$$

где $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $C \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $U \in \mathbb{R}^{n \times m}$ и $V \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\det(A) \neq 0$, $\det(C) \neq 0$.

- 2. Упростите каждое из следующих выражений:
 - (a) $||uv^T A||_F^2 ||A||_F^2$, где $u \in \mathbb{R}^m$, $v \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$.
 - (b) $\operatorname{tr}((2I_n + aa^T)^{-1}(uv^T + vu^T))$, где $a, u, v \in \mathbb{R}^n$. Подсказка: воспользуйтесь тождеством Вудбери.
 - (c) $\sum_{i=1}^n \langle S^{-1}a_i, a_i \rangle$, где $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^d$, $S = \sum_{i=1}^n a_i a_i^T$, $\det(S) \neq 0$.
- 3. Для каждой из следующих функций найдите первую и вторую производную:
 - (a) $f: E \to \mathbb{R}$, $f(t) = \det(A tI_n)$, $\text{где } A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $E = \{t \in \mathbb{R} : \det(A tI_n) \neq 0\}$.
 - (b) $f: \mathbb{R}_{++} \to \mathbb{R}, f(t) = \|(A + tI_n)^{-1}b\|, \text{ где } A \in \mathbb{S}_+^n, b \in \mathbb{R}^n.$
- 4. Для каждой из следующих функций найти градиент ∇f и гессиан $\nabla^2 f$:
 - (a) $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, f(x) = \frac{1}{2} ||xx^T A||_F^2$, где $A \in \mathbb{S}^n$.
 - (b) $f: \mathbb{R} \setminus \{0\} \to \mathbb{R}, f(x) = \langle x, x \rangle^{\langle x, x \rangle}.$
 - (c) $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, f(x) = \|Ax b\|^p$, где $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m, p \ge 2$.
- 5. Для каждой из следующих функций f покажите, что второй дифференциал является знакоопределённым (т.е. $d^2f(x)[dx,dx]$ имеет постоянный знак) и установите этот знак:
 - (a) $f: \mathbb{S}_{++}^n \to \mathbb{R}, f(X) = \text{tr}(X^{-1}).$
 - (b) $f: \mathbb{S}_{++}^n \to \mathbb{R}, f(X) = (\det(X))^{1/n}$.

Подсказка: использовать неравенство Коши-Буняковского.

- 6. Для каждой из следующих функций найти все точки стационарности и указать значения параметров, при которых они существуют:
 - (a) $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $f(x) = \langle c, x \rangle + \frac{\sigma}{3} ||x||^3$, где $c \in \mathbb{R}^n$, $c \neq 0$, $\sigma > 0$.
 - (b) $f: E \to \mathbb{R}, f(x) = \langle a, x \rangle \ln(1 \langle b, x \rangle),$ где $a, b \in \mathbb{R}^n, a, b \neq 0, E = \{x \in \mathbb{R}^n \mid \langle b, x \rangle < 1\}.$
 - (c) $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $f(x) = \langle c, x \rangle \exp(-\langle Ax, x \rangle)$, где $c \in \mathbb{R}^n$, $c \neq 0$, $A \in \mathbb{S}^n_{++}$.
- 7. Пусть $X \in \mathbb{S}^n_{++}$. Вычислите значение следующего выражения:

$$\lim_{k \to +\infty} \operatorname{tr}(X^{-k} - (X^k + X^{2k})^{-1}).$$

8. Рассмотрим метод главных компонент. Пусть имеется выборка $\{x_i\}_{i=1}^N, x_i \in \mathbb{R}^D$, которую мы хотим перевести в выборку меньшей размерности d с помощью проектирования на линейное пространство, задаваемое матрицей $P \in \mathbb{R}^{D \times d}$. Ортогональная проекция вектора x на это пространство может быть вычислена как $P(P^TP)^{-1}P^Tx$. Тогда для поиска наилучшей матрицы P рассмотрим следующую задачу оптимизации:

$$F(P) = \sum_{i=1}^{N} ||x_i - P(P^T P)^{-1} P^T x_i||^2 = N \operatorname{tr}((I - P(P^T P)^{-1} P^T)^2 S) \to \min_{P}.$$

Здесь $S = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i x_i^T$ — выборочная матрица ковариации для нормированной выборки.

- (а) Найти градиент $\nabla_P F(P)$, вычисленный для произвольной матрицы с ортогональными столбцами, т.е. $P: P^T P = I$ (При вычислении дифференциала dF(P) нужно сначала действовать так, как если бы матрица P была произвольной, а потом в полученном выражении пользоваться свойством ортогональности столбцов P).
- (b) Рассмотрим собственное разложение матрицы S: $S = Q\Lambda Q^T$, где Λ диагональная матрица с собственными значениями на диагонали, $Q = [q_1|q_2|\dots|q_D] \in \mathbb{R}^{D\times D}$ ортогональная матрица, состоящая из собственных векторов q_i по столбцам. Требуется доказать, что градиент $\nabla_P F(P)$ равен нулю для матрицы P, состоящей из любых d различных собственных векторов q_i по столбцам. Требуется также доказать, что значение минимума F(P) достигается для матрицы P, состоящей из собственных векторов q_i , отвечающих наибольшим собственным значениям матрицы S.