Introduction to Machine Learning - HW3 - Q3

Professors: Abolghasemi & Arabi

Student: Mohamad Mahdi Samadi

Student ID: 810101465

الف) برای هر ماتریس مربعی تجزیه ای به نام تجزیه ماتریس به مقادیر ویژه[۲] آن وجود دارد. با نوشتن روابط ریاضی برای ماتریس مربعی دلخواه تجزیه مقادیر ویژه ماتریس را محاسبه کنید.

ب) برخی از روش های نیوتن تصحیح شده از تجزیه مقادیر ویژه ماتریس هیسن برای تقریب زدن این ماتریس هیسن به یک ماتریس معین مثبت استفاده می کنند. به دلخواه یکی از این روش ها را توضیح دهید.

پ) تابع ذیل را در نظر بگیرید:

$$f(x_1, x_2) = 4x_1^3 + 3x_1x_2 + 5x_2^2 + 2x_1^2x_2$$

فرض کنید نقطه اولیه ما $(1, 0)$ است. یک پله الگوریتم با روش نیوتن (تصحیح شده) که در قسمت قبل توضیح دادید بردارید. طول پله را ۱ در نظر بگیرید.

الف: توضیحات زیر از ویدیو پیش‌نیاز جبر خطی در ماشین لرنینگ دکتر توسلی‌پور برداشته شده است.

Eigen decomposition:

اگر ماتریس A وارون‌پذیر باشد، مقادیر ویژه A^{-1} معکوس مقادیر ویژه A هستند اما بردارهای ویژه هر دو برابر هستند. مقادیر ویژه از رابطه زیر به دست می‌آیند:

$$\det(A - \lambda I) = 0$$

که برای ماتریس‌های مربعی $n \times n$، معادله بالا n جواب برای λ دارد. حال اگر هر کدام از λ_i ها را در معادله $A - \lambda_i I = 0$ بگذاریم، یک بردار ویژه حاصل می‌شود که آن را u_i می‌نامیم. اگر u_i نرمال نیست (اندازه 1 ندارد) آن را نرمال می‌کنیم. هر بردار ویژه $n \times 1$ است. اگر تمام بردارهای ویژه را کنار هم بگذاریم یک ماتریس $n \times n$ حاصل شده که آن را U می‌نامیم. می‌دانیم بردار ویژه‌های یک ماتریس دو به دو متعامد هستند. همچنین تضمین کردیم که تمام بردار های ویژه اندازه 1 داشته باشند. پس ماتریس U یک ماتریس Orthogonal است. از خاصیت مقدار و بردار ویژه یک ماتریس می‌دانیم که $Au_i = \lambda_i u_i$ است. حال از چپ A را در U ضرب می‌کنیم:

$$AU = A[u_1, \cdots, u_n] = [Au_1, \cdots, Au_n] = [\lambda_1 u_1, \cdots, \lambda_n u_n]$$

از آن‌جایی که λ_i ها اعداد ثابت هستند، حاصل بالا را می‌توان بدین صورت نوشت:

$$[\lambda_1 u_1, \cdots, \lambda_n u_n] = [u_1, \cdots, u_n] diagonal(\lambda_1, \cdots, \lambda_n) = U\, diagonal(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$$

ماتریس $diagonal(\lambda_1, \cdots, \lambda_n)$ را D می‌نامیم. بنابراین:

$$AU = UD \rightarrow A = UDU^{-1}$$

با دانستن این که ماتریس U یک ماتریس orthogonal است، به ساده‌سازی عبارت بالا می‌پردازیم.

$$UU^{-1} = I \text{ and } UU^T = I \rightarrow U^{-1} = U^T$$

$$A = UDU^T$$

که D ماتریس قطری شامل مقادیر ویژه A و U ماتریس متعامد با بردار ویژه های A در کنار هم هستند.

مثال عددی:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \rightarrow A - \lambda I = \begin{bmatrix} 1-\lambda & 2 \\ 2 & 1-\lambda \end{bmatrix}$$

$$\det(A - \lambda I) = (1 - \lambda)^2 - 4 = 0 \rightarrow 1 - \lambda = \pm 2 \rightarrow \lambda_1 = -1,\ \lambda_2 = 3$$

$$D = diagonal(\lambda_1, \lambda_2) = diagonal(-1, 3) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}$$

$$(A - \lambda_1 I)u_1 = \begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}[a_1\ \ b_1]^T = [0\ \ 0]^T \rightarrow a_1 + b_1 = 0 \rightarrow u_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}[-1,\ 1]^T$$

$$(A - \lambda_2 I)u_2 = \begin{bmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix}[a_2\ \ b_2]^T = [0\ \ 0]^T \rightarrow a_2 - b_2 = 0 \rightarrow u_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}[1,\ 1]^T$$

$$U = [u_1\ \ u_2] = \begin{bmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

$$A = UDU^T = \begin{bmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$$

ب: توضیحات این بخش از این [مقاله] برگرفته شده‌اند.

Wenjun Wang , Jubo Zhu , Xiaojun Duan National University of Defense Technology Department of Mathematics and System Science College, Changsha, 410073, China

Modified Newton’s method based on eigenvalue decomposition

در این روش وارون ماتریس هسین (H^{-1}) را با روش eigenvalue decomposition تقریب زده و اطمینان حاصل می‌کنیم. این کار برای این انجام می‌شود که اگر ماتریس positive definite نباشد، آن را positive definite کنیم. در این صورت محاسبات عددی پایدارتر شده و الگوریتم سریع‌تر همگرا می‌شود.

$$[\nabla^2 f(\theta)]^{-1} = [Hf(\theta)]^{-1} = UDU^T$$

طبق توضیحات بخش الف، D ماتریس قطری شامل مقادیر ویژه H^{-1} و U ماتریس متعامد با بردار ویژه های A در کنار هم هستند. از آن‌جایی که H^{-1} ماتریس PD نیست، پس باید تعدادی مقادیر ویژه غیر مثبت به روی ماتریس D باشند. در این روش آن‌ها را با مقدار مطلق‌شان جایگزین می‌کنیم. پس جهت جستجوی جدید بدین صورت می‌باشد:

$$v_i = -U|D|U^T \nabla f(\theta)$$

در ابتدا چک می‌کنیم جهت حرکت جدید آیا یک جهت کاهشی است یا خیر. باید ضرب داخلی این جهت را در جهت منفی گرادیان حساب کنیم.

$$v_i . \{-\nabla f(\theta)\}_{\theta=\theta_i} = < -\nabla f(\theta), -U|D|U^T \nabla f(\theta) > = < \nabla f(\theta), U|D|U^T \nabla f(\theta) >$$

که حاصل ضرب داخلی بالا quadratic form دارد پس مثبت است. اگر زاویه میان دو بردار را $\angle\beta$ بنامیم:

$$|\nabla f(\theta)| \times |U|D|U^T \nabla f(\theta)| \times \cos(\angle\beta) > 0 \rightarrow \cos(\angle\beta) > 0 \rightarrow 0 < \angle\beta < 90^{\circ}$$

نشان دادیم جهت جدید زاویه حاده با جهت گرادیان دارد. پس جهت کاهشی است.

اثبات همگرایی این الگوریتم در لینک بالا آورده شده است و از توضیح مجدد آن اجتناب می‌کنم.

پ: با روش گفته شده در بخش ب یک iteration از الگوریتم را به روی تابع زیر و با شروع از نقطه $[1\ \ 0]^T$ اجرا می‌کنیم.

$$f(x_1, x_2) = 4x_1^3 + 3x_1x_2 + 5x_2^2 + 2x_1^2x_2$$

در ابتدا مشتقات جزئی مرتبه اول تابع را حساب می‌کنیم.

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1} = 12x_1^2 + 3x_2 + 4x_1x_2$$

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2} = 2x_1^2 + 3x_1 + 10x_2$$

حال مشتقات جزئی مرتبه دوم را حساب می‌کنیم.

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1 \partial x_1} = 24x_1 + 4x_2$$

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_1 \partial x_2} = 3 + 4x_1$$

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2 \partial x_1} = 4x_1 + 3$$

$$\frac{\partial f(x_1,x_2)}{\partial x_2 \partial x_2} = 10$$

حال می‌توانیم ماتریس‌های گرادیان و هسین را تشکیل دهیم.

$$\nabla f(x_1, x_2) = [12x_1^2 + 3x_2 + 4x_1x_2,\ 2x_1^2 + 3x_1 + 10x_2]^T \rightarrow \nabla f(1, 0) = [12,\ 5]^T$$

$$H = \begin{bmatrix} 24x_1+4x_2 & 4x_1+3 \\ 4x_1+3 & 10 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 24 & 7 \\ 7 & 10 \end{bmatrix}$$

به منظور اجرای eigenvalue decomposition به روی ماتریس H ابتدا مقادیر ویژه‌اش را حساب می‌کنیم.

$$\det(H - \lambda I) = \det(\begin{bmatrix} 24-\lambda & 7 \\ 7 & 10-\lambda \end{bmatrix}) = (24 - \lambda)(10 - \lambda) - 7^2 = 0 \rightarrow (24 - \lambda)(10 - \lambda) = 49$$

$$\lambda^2 - 34\lambda + 191 = 0 \rightarrow \lambda = \frac{34\pm\sqrt{392}}{2} = 17 \pm \sqrt{98} = 17 \pm 7\sqrt{2} \rightarrow \lambda_1 = 17 + 7\sqrt{2} \ \ and \ \ \lambda_2 = 17 - 7\sqrt{2}$$

هر دو مقدار ویژه مثبت شدند پس نیازی به تغییر آنان نیست و فقط باید ماتریس وارون را تخمین بزنیم. البته می‌دانیم وقتی تمامی مقادیر ویژه مثبت باشند، تخمین eigenvalue decomposition با خود ماتریس دقیقا برابر است. اما به هر حال این تخمین را انجام می‌دهیم. در ادامه باید بردارهای ویژه را پیدا کنیم.

$$(H - \lambda_1 I)u_1 = \begin{bmatrix} 7-7\sqrt{2} & 7 \\ 7 & -7-7\sqrt{2} \end{bmatrix}[u_{11}, u_{12}]^T = 7\begin{bmatrix} 1-\sqrt{2} & 1 \\ 1 & -1-\sqrt{2} \end{bmatrix}[u_{11}, u_{12}]^T = 0$$

$$u_{11} - \sqrt{2}u_{11} + u_{12} = u_{11} - u_{12} - \sqrt{2}u_{12} = 0 \rightarrow \sqrt{2}u_{12} + u_{12} = u_{11} \rightarrow u_1 = \sqrt{\frac{1}{4+2\sqrt{2}}}[1 + \sqrt{2}, \ 1]^T$$

$$(H - \lambda_2 I)u_2 = \begin{bmatrix} 7+7\sqrt{2} & 7 \\ 7 & -7+7\sqrt{2} \end{bmatrix}[u_{21}, u_{22}]^T = 7\begin{bmatrix} 1+\sqrt{2} & 1 \\ 1 & -1+\sqrt{2} \end{bmatrix}[u_{21}, u_{22}]^T = 0$$

$$u_{21} + \sqrt{2}u_{21} + u_{22} = u_{21} - u_{22} + \sqrt{2}u_{22} = 0 \rightarrow (1 - \sqrt{2})u_{22} = u_{21} \rightarrow u_2 = \sqrt{\frac{1}{4-2\sqrt{2}}}[1 - \sqrt{2}, \ 1]^T$$

در نهایت داریم:

$$H = UDU^T \ \ where \ \ D = \begin{bmatrix} 17+7\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 17-7\sqrt{2} \end{bmatrix} \ \ and \ \ U = \begin{bmatrix} \sqrt{\frac{1+\sqrt{2}}{2}} & -\sqrt{\frac{\sqrt{2}-1}{2}} \\ \sqrt{\frac{1}{4+2\sqrt{2}}} & \sqrt{\frac{1}{4-2\sqrt{2}}} \end{bmatrix}$$

اگر از رابطه بالا H را حساب کنیم به ماتریس زیر می‌رسیم:

$$\begin{bmatrix} 24 & 7 \\ 7 & 10 \end{bmatrix}$$

که مطابق انتظار با ماتریس اولیه برابر است.

$$H^{-1} = \frac{1}{\det(H)}\begin{bmatrix} 10 & -7 \\ -7 & 24 \end{bmatrix} = \frac{1}{191}\begin{bmatrix} 10 & -7 \\ -7 & 24 \end{bmatrix}$$

$$\theta_2 = \theta_1 - H^{-1}\nabla f = [1, \ 0]^T - \frac{1}{191}\begin{bmatrix} 10 & -7 \\ -7 & 24 \end{bmatrix}[12, \ 5]^T = [1, \ 0]^T - \frac{1}{191}[85, \ 36]^T = [\frac{106}{191}, \ \frac{-36}{191}]^T$$