## Машинное обучение, ВМК МГУ, осень 2021

## Домашнее задание. Матричные вычисления и матричное дифференцирование.

Мягкий дедлайн: 5 ноября, 23:59 (за каждый день просрочки снимается 1 балл)

Жёсткий дедлайн: 12 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)  $f: E \to \mathbb{R}$ ,  $f(t) = \det(A tI_n)$ , rge  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ,  $E = \{t \in \mathbb{R} : \det(A tI_n) \neq 0\}$ .
  - (b)  $f: \mathbb{R}_{++} \to \mathbb{R}, f(t) = ||(A + tI_n)^{-1}b||,$ где  $A \in \mathbb{S}_+^n, b \in \mathbb{R}^n.$
- 4. Для каждой из следующих функций найти градиент  $\nabla f$  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  $\Lambda$  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.