Google and the PageRank Algorithm

陳威傑，劉彥均，賴奕丞，蘇峻緯

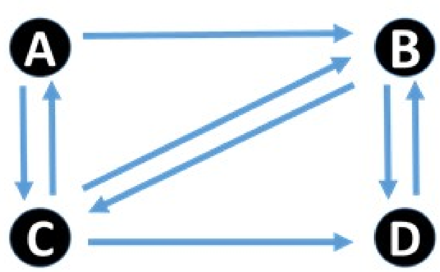
September 14, 2021

Abstract

PageRank，又稱網頁排名、Google 左側排名、PR，是Google 公司所使用的對其搜尋引擎搜尋結果中的網頁進行排名的一種演算法。將各網站的關係用一矩陣表示，此矩陣所對應到特徵值為1的特徵向量就是我們所要找的特徵向量。此向量的各個值照大小排列，就是各個網站的排名順序。

1 The Web and Markov Chain

PageRank 演算法的核心原理是：在網際網路中，如果一個網頁被很多其它重要的網頁所連結，說明該網頁非常的重要，那麼它的排名就高。將整個網際網路看成一張大的圖，每個網站是一個節點(nodes)，而每個網頁的連結是一個邊(edges)。那麼，網際網路就可以用一個圖來描述。(如下圖)



由C 網站開始瀏覽點擊一次、兩次可能的結果，且每次機率總合為一

$Pr(X_2 = A|X_1 = C) = \frac{1}{3}$

$Pr(X_2 = B|X_1 = C) = \frac{1}{3}$

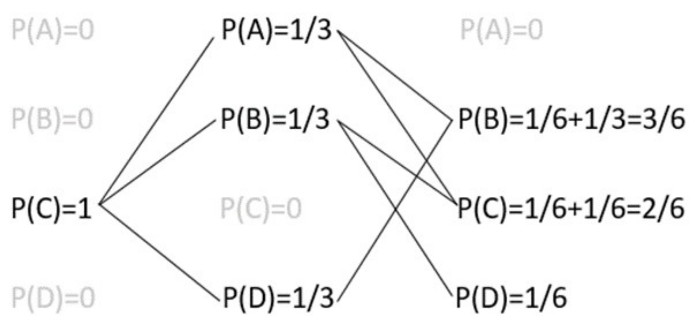
$Pr(X_2 = D|X_1 = C) = \frac{1}{3}$

$Pr(X_2 = B|X_1 = A) = \frac{1}{2}$

$Pr(X_2 = C|X_1 = A) = \frac{1}{2}$

$Pr(X_2 = D|X_1 = B) = 1$

$Pr(X_2 = B|X_1 = D) = 1$



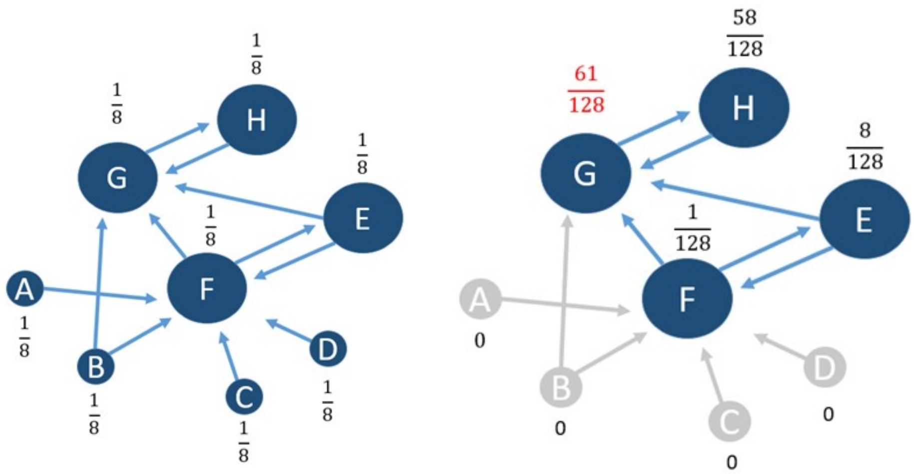
網站關係也可以用一個矩陣來描述

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{3} & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{3} & 1 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \frac{3}{6} \\ \frac{2}{6} \\ \frac{1}{6} \end{bmatrix}$$

網站被最多網站所連結，那麼他的排名就最高嗎?

假設每個網站的起始值是$\frac{1}{8}$(a圖)，點擊四次後，發現F雖被最多網站連結，但該網站的值不是最大(b圖)



(a) (b)

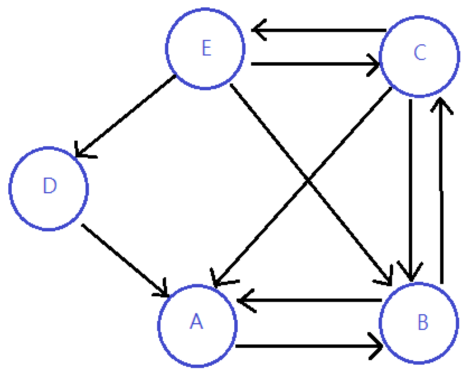
馬爾可夫鏈

設$\{X_n, n = 0, 1, 2, 3, \ldots\}$是一個是隨機變數的集合，它的值來自集合$T = \{A, B, C, \ldots\}$。如果$Pr(X_n = x_n), x_n \in T$，僅取決於他前一項$X_{n-1}$的值而且和$X_{n-2}, X_{n-3}, \ldots, X_1$無關，則$X_n$是一個馬爾可夫鏈。

$Pr(X_n = x_n | X_{n-1} = x_{n-1}, X_{n-2} = x_{n-2}, \ldots, X_1 = x_1)$=$Pr(X_n = x_n | X_{n-1} = x_{n-1})$

2 Stationary Regime of Markov Chain

在第一個章節我們認識到能將網站彼此的關係寫成一個轉移矩陣P，且可以透過矩陣的計算得知前往各個網頁的機率為何，這個章節要探討的就是在經過無數次的點擊網站(矩陣運算)後前往各個網站的機率是否會趨於穩定。首先我們先來觀察一個例子:



寫出此圖的轉移矩陣

$$\begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

我們假設初始在C網站，使得

$$p^0 = \begin{bmatrix} Pr(X = A) \\ Pr(X = B) \\ Pr(X = C) \\ Pr(X = D) \\ Pr(X = E) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

進行第一次點擊後

$$p^1 = Pp^0 = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix}$$

第二次點擊後

$$p^2 = Pp^1 = P(Pp^0) = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 0 & \frac{1}{3} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{3} \\ \frac{1}{3} \\ 0 \\ 0 \\ \frac{1}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{4}{9} \\ \frac{8}{15} \\ \frac{1}{9} \\ 0 \end{bmatrix}$$

從上式我們能觀察出下列式子:
$p^n = Pp^{n-1} = ... = PP...PPp^0 = P^n p^0$
我們改計算P^n

$$P^4 = \begin{bmatrix} 0.333 & 0.296 & 0.204 & 0.167 & 0.42 \\ 0.222 & 0.463 & 0.531 & 0.667 & 0.16 \\ 0.389 & 0.111 & 0.16 & 0 & 0.37 \\ 0.056 & 0 & 0.031 & 0 & 0.019 \\ 0 & 0.13 & 0.074 & 0.167 & 0.031 \end{bmatrix} \quad P^8 = \begin{bmatrix} 0.265 & 0.313 & 0.294 & 0.323 & 0.279 \\ 0.420 & 0.360 & 0.409 & 0.372 & 0.381 \\ 0.217 & 0.233 & 0.191 & 0.201 & 0.252 \\ 0.031 & 0.022 & 0.018 & 0.012 & 0.035 \\ 0.067 & 0.072 & 0.088 & 0.092 & 0.052 \end{bmatrix}$$

$$P^{16} = \begin{bmatrix} 0.294 & 0.291 & 0.293 & 0.291 & 0.294 \\ 0.388 & 0.392 & 0.389 & 0.391 & 0.391 \\ 0.220 & 0.219 & 0.221 & 0.221 & 0.218 \\ 0.024 & 0.025 & 0.025 & 0.025 & 0.024 \\ 0.074 & 0.073 & 0.072 & 0.072 & 0.074 \end{bmatrix} \quad P^{32} = \begin{bmatrix} 0.293 & 0.293 & 0.293 & 0.293 & 0.293 \\ 0.390 & 0.390 & 0.390 & 0.390 & 0.390 \\ 0.220 & 0.220 & 0.220 & 0.220 & 0.220 \\ 0.024 & 0.024 & 0.024 & 0.024 & 0.024 \\ 0.073 & 0.073 & 0.073 & 0.073 & 0.073 \end{bmatrix}$$

我們能發現到當n越大時，會越趨於穩定的狀態，也就是說也會趨於一個穩定的狀態。接著我們要透過認識一些轉移矩陣的特質，來解釋上述這個例子得出的結果。

Proposition 2.1. *轉移矩陣有至少一個特徵值為1*

Proof. 首先我們需要知道矩陣的特徵值等於矩陣轉置後的特徵值，設λ為矩陣P的特徵值，計算P^T特徵多項式

$\Delta P^T(\lambda) = det(P^T - \lambda I) = det(P - \lambda I)^T = det(P - \lambda I) = \Delta P(\lambda)$

此式推得轉置矩陣之特徵值與原矩陣相等

接著，設$u^T = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$ 及P為轉移矩陣

$(P^T u)_i = \sum_{j=1}^n [P^T]_{ij} u_j = \sum_{j=1}^n P_{ji} * 1 = 1$

$\Longrightarrow P^T u = u$

$\Longrightarrow$Pu=u

由此可知轉移矩陣P有一特徵值為1

□

Proposition 2.2. 如果λ為一$n*n$之轉移矩陣P，則$|\lambda| <= 1$，且存在一個與特徵值$\lambda = 1$對應的特徵向量其元素皆$>= 0$

Proof. Frobenius Theorem: 設矩陣$P > 0$，λ_0為矩陣P之最大特徵值則

(i)λ_0為P的特徵值，則可以找到一個與λ_0對應的特徵向量x^0，使得$x^0 > 0$

(ii)若λ為P的另外一個特徵值，則$|\lambda| <= \lambda_0$

透過這個定理及2.1可以證明此特質。

□

在談特質(3)前我們需要做幾個假設:

Assumption .1. 假設只會有一個特徵值λ滿足$|\lambda| = 1$ ，然後藉由*2.1*，此特徵值$\lambda = 1$

Assumption .2. 假設特徵子空間維度為*1*

Assumption .3. 我們將轉移矩陣可對角化視為理所當然，換句話說，此矩陣的特徵向量可以構成一組基底

Proposition 2.3. *(1)*若轉移矩陣P滿足以上三個假設，則存在一個獨特的向量π，使得π中的元素$\pi_i = Pr(X_n = i) \quad i \in T \quad (T = \{A, B, C, ...\})$滿足

$\pi_i >= 0 \quad , \quad \pi_i = \sum_{j \in T} p_{ij}\pi_j \quad , \quad \sum_{i \in T} \pi_i = 1$

*(2)*除了原點p^0的各個點的機率分布$p_i^0 = Pr(X_0 = i)$外，其他的機率分布$Pr(X_n = i)$會收斂至穩定態π，當$n \longrightarrow \infty$

Proof. (1)藉由2.2，我們知道轉移矩陣存在一個特徵向量v對應特徵值1，且向量v中所有元素皆$>= 0$,也就是說$Pv = v$，然後我們將v標準化($v/\sum_{i=1} v_i = \pi$，將v除以v內的元素總和)，使得$P\pi = \pi$及$\sum_{i=1} \pi_i = 1$，且2.2也保證$\pi_i >= 0$

$P\pi = \pi \Longleftrightarrow \sum_j P_{ij}\pi_j = \pi_i$，從以上的證明及假設2，我們可以得知$\pi$是獨特的。

(2)藉由假設3，我們可以將起始點p^0重寫成由N*N矩陣P之特徵向量構成的基底的形式，讓特徵值依小排到大，$1 = \lambda_1 > |\lambda_2| >= |\lambda_3| >= ... >= |\lambda_N|$(藉由假設1，有唯一個特徵值$\lambda_1 = 1$，假設3保證矩陣P之特徵向量構成的基底畫出的空間維度為N)

讓特徵向量v_i對應到特徵值λ_i，假設v_1已經標準化，使得$v_1 = \pi$，我們將起始點p^0寫成$p^0 = \sum_1^N a_i v_i \quad a_i$:基底的係數

第一步，我們要先證明$a_1 = 1$

讓u= $\begin{bmatrix}1 & \dots & 1\end{bmatrix}$，因特徵向量$v_i$對應到特徵值$\lambda_i$，所以我們有$Pv_i = \lambda_i v_i$，然後$uPv_i$可以被簡化成兩種形式:

$uPv_i = (uP)v_i = uv_i \quad , \quad uPv_i = u(Pv_i) = u\lambda_i v_i$

$\Longrightarrow uv_i = \lambda_i uv_i$

$\Longrightarrow (1-\lambda_i)uv_i = 0$

對於$i >= 2$，此等式只在$uv_i = 0$時成立

$uv_i = \sum_{j=1}^{N}(v_i)_j = 0 \quad \text{for} \quad i >= 2$

若我們將p^0內所有元素相加會得到1，我們寫出

$1 = \sum_{j=1}^{N} p_j^0 = \sum_{j=1}^{N}\sum_{i=1}^{N} a_i(v_i)_j = \sum_{i=1}^{N}(a_i \sum_{j=1}^{N}(v_i)_j) = a_1 \sum_{j=1}^{N}(v_1)_j = a_1 \sum_{j=1}^{N} \pi_j = a_1$

第二步，我們考慮p^0點擊m次後

$p^m = P^m p^0 = \sum_{j=1}^{N} a_j P^m v_j = \sum_{j=1}^{N} a_j \lambda_j^m v_j = a_1 v_1 + \sum_{j=2}^{N} \lambda_j^m a_j v_j = \pi + \sum_{j=2}^{N} \lambda_j^m a_j v_j$

$\Longrightarrow P^m p^0 - \pi = \sum_{j=2}^{N} \lambda_j^m a_j v_j$

$\Longrightarrow \|P^m p^0 - \pi\|^2 = \|\sum_{j=2}^{N} \lambda_j^m a_j v_j\|^2 <= (\sum_{j=2}^{N} \|\lambda_j^m a_j v_j\|)^2$

因為$1 > |\lambda_2| >= |\lambda_3| >= ... >= |\lambda_N|$

所以$\lambda_j^m \longrightarrow 0 \quad as \quad m \longrightarrow \infty$

$\Longrightarrow (\sum_{j=2}^{N} \|\lambda_j^m (a_j v_j)\|)^2 \longrightarrow 0 \quad as \quad m \longrightarrow \infty$

$\Longrightarrow p^m = P^m p^0 \longrightarrow \pi \quad \text{as} \quad m \longrightarrow \infty$

□

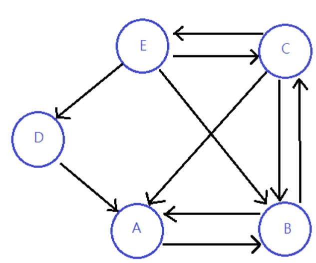
Score of page rank

Definition:

(1)Score為網頁i在穩定態π中，所對應到的π_i

(2)我們依各個網頁的score為依據，進行分類，最大的放在第一個

舉例:



$$P=\begin{bmatrix}0&\frac{1}{2}&\frac{1}{3}&1&0\\1&0&\frac{1}{3}&0&\frac{1}{3}\\0&\frac{1}{2}&0&0&\frac{1}{3}\\0&0&0&0&\frac{1}{3}\\0&0&\frac{1}{3}&0&0\end{bmatrix}$$

算出P的穩定態π

找出對應特徵值1對應到的特徵向量v= $\begin{bmatrix}12\\16\\9\\1\\3\end{bmatrix}$ ，接著標準化v

$$v=1/(12+16+9+1+3)*\begin{bmatrix}12\\16\\9\\1\\3\end{bmatrix}=1/41*\begin{bmatrix}12\\16\\9\\1\\3\end{bmatrix}=\pi$$

$score(A)=P_{AB}*\pi_B+P_{AC}*\pi_C+P_{AD}*\pi_D+P_{AE}*\pi_E=\frac{1}{2}*\frac{16}{41}+\frac{1}{3}*\frac{9}{41}+1*\frac{1}{41}+0*\frac{3}{41}=\frac{12}{41}=\pi_A$

$score(B)=P_{BA}*\pi_A+P_{BC}*\pi_C+P_{BD}*\pi_D+P_{BE}*\pi_E=0*\frac{12}{41}+\frac{1}{3}*\frac{9}{41}+0*\frac{1}{41}+\frac{1}{3}*\frac{3}{41}=\frac{16}{41}=\pi_B$

$score(C)=\frac{9}{41}=\pi_C$

$score(D)=\frac{1}{41}=\pi_D$

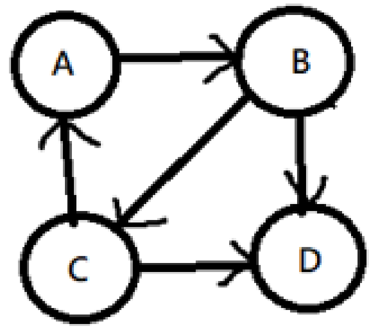
$score(E)=\frac{3}{41}=\pi_E$

$$\begin{bmatrix}score(A)\\score(B)\\score(C)\\score(D)\\score(E)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\pi_A\\\pi_B\\\pi_C\\\pi_D\\\pi_E\end{bmatrix}=\pi$$

3 Improved pagerank

兩種困難：

(一)某個網頁只進不出



(圖1)

Ex. 使用者瀏覽時若走到D，就會被困在D

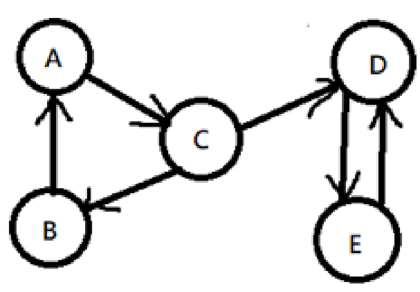
Solution：把這些網頁和導向他們的連結忽略或移除，則就能得到穩定態，網頁就可被排名。

以上圖而言，將D和導向D的連結移除，可得穩定態$\begin{bmatrix}\frac{1}{3}\\\frac{1}{3}\\\frac{1}{3}\end{bmatrix}$

而D的score(分數)為$\sum_{i=1}^{n}\frac{r_i}{l_i}=\sum_{i=1}^{2}\frac{r_i}{l_i}=\frac{r_1}{2}+\frac{r_2}{2}=\frac{1}{2}*\frac{1}{3}+\frac{1}{2}*\frac{1}{3}=\frac{1}{3}$

(l_i代表第i個page向外的連結數，且第i個網頁導向只進不出的網頁，r_i代表第i個網頁的分數)

(二)



(圖2)

當走到D時，會陷入D→E→D→E→.......循環

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

那麼，A,B,C的分數都為0嗎? 顯然不是，因此有以下解決方法

Solution: $A = \beta P + (1-\beta)Q$, β 在0,1之間，且$Q = \frac{1}{n}\begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$

代表使用者使用網路有兩種模式：

(1)順著連結規則移動(P的機率為β)

(2)不順著連結，想隨機跳到任一個網頁(Q的機率為$1-\beta$)

也就是說，有β的機率順著連結到下個網頁，有$1-\beta$的機率隨機跳到任一個網頁

我們通常將β設定為0.85

Proposition 3.1. *$A = \beta P + (1-\beta)Q$, A為轉移矩陣且每一列總和也為1*

Proof. Let $P=\begin{bmatrix} x_{11} & \cdots & x_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & \cdots & x_{nn} \end{bmatrix}$, $Q = \frac{1}{n}\begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$

$x_{11} + ... + x_{n1} = 1 \rightarrow \beta(x_{11} + ... + x_{n1}) = \beta$ ——(1)

$\frac{1}{n} + ... + \frac{1}{n} = 1 \rightarrow (1-\beta)(\frac{1}{n} + ... + \frac{1}{n}) = 1-\beta$ ——(2)

$(1) + (2) \rightarrow \beta + (1-\beta) = 1$

其他列以此類推即可得證

□

Ex. By 圖2 , $A = \beta P + (1-\beta)Q$

$$A = 0.85\begin{bmatrix}0&1&0&0&0\\0&0&0.5&0&0\\1&0&0&0&0\\0&0&0.5&0&1\\0&0&0&1&0\end{bmatrix} + 0.15\begin{bmatrix}0.2&\cdots&0.2\\\vdots&\ddots&\vdots\\0.2&\cdots&0.2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}0.03&0.88&0.03&0.03&0.03\\0.03&0.03&0.455&0.03&0.03\\0.88&0.03&0.03&0.03&0.03\\0.03&0.03&0.455&0.03&0.88\\0.03&0.03&0.03&0.88&0.03\end{bmatrix}$$

尋找穩定態 $\begin{bmatrix}0.03&0.88&0.03&0.03&0.03\\0.03&0.03&0.455&0.03&0.03\\0.88&0.03&0.03&0.03&0.03\\0.03&0.03&0.455&0.03&0.88\\0.03&0.03&0.03&0.88&0.03\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\b\\c\\d\\e\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}a\\b\\c\\d\\e\end{bmatrix}$

(不太好直接計算，因此我們使用Power Method)

◆Power Method

找一個x^*, 使得Ax^*=x^*

從x_0 開始，x_0=$\begin{bmatrix}\mathrm{a}_1\\\mathrm{a}_2\\\mathrm{a}_3\\\vdots\\\mathrm{a}_n\end{bmatrix}$

and $a_1 + a_2 + ... + a_n = 1$, and $a_i \geq 0\ \forall\ i = 1, 2, \ldots, n$

let $x_1 = Ax_0$

$x_2 = Ax_1 = A(Ax_0) = A^2x_0$

$x_3 = Ax_2 = A(A^2x_0) = A^3x_0$

.

.

.

$x_k = Ax_{k-1} = A(A^{k-1}x_0) = A^kx_0 \Rightarrow x_k = x^*$

Ex. Look at 圖2

$$\begin{bmatrix}0.03&0.88&0.03&0.03&0.03\\0.03&0.03&0.455&0.03&0.03\\0.88&0.03&0.03&0.03&0.03\\0.03&0.03&0.455&0.03&0.88\\0.03&0.03&0.03&0.88&0.03\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a\\b\\c\\d\\e\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}a\\b\\c\\d\\e\end{bmatrix}$$

By Power Method, let $x_0 = \begin{bmatrix} \mathrm{a}_1 \\ \mathrm{a}_2 \\ \mathrm{a}_3 \\ \vdots \\ \mathrm{a}_5 \end{bmatrix}$

and $a_1 + a_2 + ... + a_5 = 1$, and $a_i \geq 0 \ \forall \ i = 1, 2, ..., n$

$\Rightarrow$ by Python, do 100 times

$\Rightarrow$ We obtain $x_{100} = x^* = \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.09573374 \\ 0.07733381 \\ 0.011137368 \\ 0.3705723 \\ 0.34498646 \end{bmatrix}$

4 The Frobenius Theorem

Frobenius Theorem 在說明一各項皆為正數之矩陣，其各個特徵值的特性與關係。為了證明Frobenius Theorem 我們須先給一些符號定義。

P 是一個$n \times n$ 的矩陣，則定義以下三種符號的意義。

1. $P \geq 0$ 各項皆為非負實數。
2. $P > 0$ 各項皆為非負實數，且至少有一項要非零。
3. $P \gg 0$ 各項皆為正實數。

此種符號對於向量x也有相同的定義。現在討論一$n \times n$的矩陣P與n維向量x, y 的關係

Lemma 4.1. 若$P \geq 0$且$x \geq y$ ，則$Px \geq Py$。

Proof. 已知$x \geq y$可推得$x - y \geq 0$，探討$P(x - y)$的各項係數，因為$P \geq 0$且$x - y \geq 0$，一非負矩陣乘以一非負向量後各項必皆為非負實數，所以可推得$P(x - y) \geq 0$ ，再將其展開得$Px \geq Py$。 □

Lemma 4.2. 若$P \gg 0$且$x > y$ ，則$Px \gg Py$。

Proof. 已知$x > y$可推得$x - y > 0$，探討$P(x - y)$的各項係數，因為$P \gg 0$且$x - y > 0$，一個像皆為正數的矩陣與一至少有一項為非零的向量相乘，則各項必接正數，所以可推得$P(x - y) \gg 0$ ，再將其展開得$Px \gg Py$。 □

介紹一個集合$simplex$ ，他是收集n維的向量，其中此向量的各項皆非負，且各項種和為1，而這個集合是一個緊緻集，也就是說此集合是閉的且有界。

現在定義一個實數集合Λ。當$P > 0$的時候Λ是收集所有滿足以下條件的λ

存在一向量 $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$，使得$\sum_{j=1}^{n} x_j = 1$,$x > 0$ 且$Px \geq \lambda x$。討論集合Λ 是否非空。

Proof. 取任意一個符合條件的向量x，$x > 0$ 則$x \geq 0$，又已知$P \geq 0$ by Lemma 4.1 ，我們得知$Px \geq 0 = 0x$，則0必定在Λ內，故Λ非空。 □

Proposition 4.3. 設$\lambda_0 = \sup_{\lambda \in \Lambda} \lambda$，則$\lambda_0 < \infty$。

Proof. 設矩陣P中最大的那項為$M = \max_{i,j} p_{i,j}$，向量x符合條件$\sum_{j=1}^{n} x_j = 1$且$x > 0$，則我們會有

$(Px)_i = \sum_{1 \leq j \leq n} P_{i,j} x_j \leq \sum_{1 \leq j \leq n} M x_j = M \sum_{1 \leq j \leq n} x_j = M \times 1 = M, \forall i$

因為x向量各項總和為1，且各項皆非負，所以必有其中一項$x_i \geq \frac{1}{n}$，再結合條件$Px \geq \lambda x$與上式，可得

$M \geq (Px)_i \geq \lambda x_i \geq \lambda \frac{1}{n} \ \forall \lambda \in \Lambda$

$\Rightarrow \lambda_0 \leq Mn$

□

Proposition 4.4. 設$\lambda_0 = \sup_{\lambda \in \Lambda} \lambda$，當$P \gg 0$的時候，則$\lambda_0 > 0$。

Proof. 設矩陣P中最小的那項為$m = \min_{i,j} p_{i,j}$，取向量$X = (\frac{1}{n}, \frac{1}{n}, \ldots, \frac{1}{n})$，則我們有

$(Px)_i = \sum_{1 \leq j \leq n} P_{i,j} x_j = \sum_{1 \leq j \leq n} P_{i,j} \frac{1}{n} = \frac{1}{n} \sum_{1 \leq j \leq n} P_{i,j} \geq \frac{1}{n}(mn) = (mn) x_i$

$\Rightarrow Px \geq (mn)x \Rightarrow mn \in \Lambda \Rightarrow \lambda \geq mn > 0$

□

Frobenius 定理是在說一個項皆為非負數且至少有一項非零的矩陣，其特徵值們的特性與關係，一共說了兩件事情

Theorem 4.5. 讓$P > 0$ 且$\lambda_0 = \sup_{\lambda \in \Lambda} \lambda$

(a)λ_0是P其中的一個特徵值，可以選一個λ_0對應到的特徵向量x_0使得$x_0 > 0$

*(b)*若λ是P的其他特徵值，則$|\lambda| \leq \lambda_0$

Proof. (a)將(a)敘述分成兩個部分(a1)(a2)證明

(a1)先證當$P \gg 0$時存在$x^0 \gg 0$，使得$Px^0 = \lambda_0 x^0$

考慮一從Λ 中的元素組成的數列$\{\lambda_i < \lambda_0, i \in \mathbb{N}\}$，其數列會收斂到$\lambda_0$。將數列中$\lambda_i$所對應到的向量設為$x^i$。且其符合條件

$\sum_{1 \le j \le n} x^i_j = 1$,$x^i > 0$和$Px^i \ge \lambda_i x^i$

由上方條件可知$x^i \in simplex$，其會包含極限點，現在選一個子數列$\{x^{ni}\}$，其中$n_1 < n_2 < \ldots$收斂到某個點，而數列會收斂到x^0，且$x^0 \in simplex$。因為$\lambda_{ni} \in \Lambda$，所以$Px^{ni} \ge \lambda_{ni} x^{ni}$，將不等式兩邊取極限，得出$Px^0 \ge \lambda_0 x^0$。假設$Px^0 > \lambda_0 x^0$，左右同乘$P(P \gg 0)$，by lemma4.2，可推得$P(Px^0) \gg \lambda_0(Px^0)$，令$y^0 = Px^0$，則有$Py^0 \gg \lambda_0 y^0$ ，也就是說存在一個很小的數$\epsilon > 0$使得$Py^0 \gg (\lambda_0 + \epsilon)y^0$ ，將y^0標準化後使$\sum_{1 \le j \le n} y^0_j = 1$，就會有$\lambda_0 + \epsilon \in \Lambda$，而$\lambda_0$為$\Lambda$中最大的所以有$\lambda_0 > \lambda_0 + \epsilon \Rightarrow \epsilon < 0$，矛盾原假設錯誤，得出$Px^0 = \lambda_0 x^0$

(a2)要證明當$P > 0$時，存在$x^>0$使得$Px^0 = \lambda_0 x^0$ 考慮一$n \times n$各項皆為1的矩陣$E = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$ ，當有一向量$x > 0$，會有

$(Ex)_i = \sum_{1 \le j \le n} x_j \ge x_i$，推得$Ex \ge x$。對於一個$P > 0$的矩陣一定存在一個矩陣$P + \delta E \gg 0, \forall \delta > 0$ ，此矩陣在(a1)中證明過。

讓$\delta_2 > \delta_1 > 0$,$x \in \mathbb{R}^n$其中$x > 0$且$\sum_{1 \le j \le n} x_j = 1$，

如果$(P + \delta_1 E)x \ge \lambda x$，則有

$(P + \delta_2 E)x = (P + \delta_1 E)x + (\delta_2 - \delta_1)Ex \ge \lambda x + (\delta_2 - \delta_1)x = (\lambda + \delta_2 - \delta_1)x$

由此不等式可以看出當δ越大λ也越大。現在定義一個函數$\lambda_0(\delta)$，其值就是$P + \delta E$所對應到的λ，此函數為一遞增函數，且$\lambda_0(0) = \lambda_0$。造一個遞減到零的數列$\{\delta_i, i \in \mathbb{N}\}$，by(a1)我們知道存在$x(\delta_i)$ 使得$(P + \delta_i E)x(\delta_i) = \lambda_0(\delta_i)x(\delta_i)$，其中$x(\delta_i) \in simplex$，所以存在一子數列$\{\delta_{ni}\}$，使得$x(\delta_{ni})$收斂到$x_0 \in simplex$。令$\lambda_0(\delta_{ni})$ 收斂到λ'，因為$\{\delta_i\}$為一遞減數列，又因$\lambda_0(\delta)$為遞增函數，所以$\lambda' \ge \lambda_0(0) = \lambda_0$。將等式$(P + \delta_{ni} E)x(\delta_{ni}) = \lambda_0(\delta_{ni})x(\delta_{ni})$左右取極限得，$Px^0 = \lambda' x^0$，根據$\lambda_0$的定義，$\lambda' \le \lambda_0$

$\begin{cases} \lambda' \le \lambda_0 \\ \lambda' \ge \lambda_0 \end{cases} \Rightarrow \lambda' = \lambda_0$ ，帶回等式得到$Px^0 = \lambda_0 x^0$

(b)令$\lambda \ne \lambda_0$為一個P的特徵值，z為λ的特徵向量，所以$Pz = \lambda z$ 也就是說$(Pz)i = \sum_{1 \le j \le n} p_{ij} z_j = \lambda z_i$ 將等式取絕對值後得到$|\lambda| |z_i| = \left|\sum_{1 \le j \le n} p_{ij} z_j\right| = |p_{i1}z_1 + p_{i2}z_2 + \cdots + p_{in}z_n| \le |p_{i1}z_1| + |p_{i2}z_2| + \cdots + |p_{i3}z_3| = p_{i1}|z_1| + p_{i2}|z_2| + \cdots + p_{i3}|z_3| = \sum_{1 \le j \le n} p_{ij}|z_j|$ 應為對於每項都對，所以可直接寫在一

起。$\Rightarrow P\,|z| \geq |\lambda|\,|z|$

其中$|z| = (|z_1|,|z_2|,\ldots,|z_n|)$，由上式可知$|\lambda| \in \Lambda \Rightarrow |\lambda| \leq \lambda_0$

□

Corollary 4.6. 如果P是馬可夫矩陣，則$\lambda_0 = 1$

Proof. 考慮一P的轉至矩陣Q，$Q = P^t$，因為P是馬可夫矩陣，$\sum_{1\leq i\leq n} p_{i,j} = 1$，所以$\sum_{1\leq j\leq n} q_{i,j} = 1$。因為$P > 0$，所以$Q > 0$。By Theorem4.5 存在$\lambda_0$和$x^0$，其中($x^0 > 0$且$\sum_{1\leq j\leq n} x_j^0 = 1$)，使得$Qx^0 = \lambda_0 x_0$。令$x$中最大項為$x_k^0$，因為$x^0 > 0$，所以$x_k^0 > 0$，也會保證下式

$\lambda_0 x_k^0 = (Qx^0)_k = \sum_{1\leq j\leq n} q_{kj} x_j^0 \leq \sum_{1\leq j\leq n} q_{kj} x_k^0 = 1 \times x_k^0 = x_k^0 \Rightarrow \lambda_0 \leq 1$
且已經知道1是P的特徵值也是Q的特徵值$\Rightarrow \lambda_0 \geq 1$結合兩式可知$\Rightarrow \lambda_0 = 1$

□

References

[1] Christiane Rousseau, Yvan Saint-Aubin. Mathematics and Technology. *Springer Undergraduate Texts in Mathematics and Technology.*265:284,2008.

[2] https://zh.wikipedia.org/wiki/PageRank.

[3] https://en.wikipedia.org/wiki/Markov_chain