37讲矩阵（上）：如何使用矩阵操作进行PageRank计算

你好，我是黄申。今天我来说说矩阵。

前面我说过，矩阵由多个长度相等的向量组成，其中的每列或者每行就是一个向量。从数据结构的角度来看，我们可以把向量看作一维数组，把矩阵看作二维数组。

具有了二维数组的特性，矩阵就可以表达二元关系了，例如图中结点的邻接关系，或者是用户对物品的评分关系。而通过矩阵上的各种运算操作，我们就可以挖掘这些二元关系，在不同的应用场景下达到不同的目的。今天我就从图的邻接矩阵出发，展示如何使用矩阵计算来实现PageRank算法。

回顾PageRank链接分析算法

在讲马尔科夫模型的时候，我已经介绍了PageRank链接分析算法。所以，在展示这个算法和矩阵操作的关系之前，我们快速回顾一下它的核心思想。

PageRank是基于马尔科夫链的。它假设了一个“随机冲浪者”模型，冲浪者从某张网页出发，根据Web图中的链接关系随机访问。在每个步骤中，冲浪者都会从当前网页的链出网页中，随机选取一张作为下一步访问的目标。此外，PageRank还引入了随机的跳转操作，这意味着冲浪者不是按Web图的拓扑结构走下去，只是随机挑选了一张网页进行跳转。

基于之前的假设，PageRank的公式定义如下：

$$PR(p_i)=\alpha\sum_{p_j\in M_i}\frac{PR(p_j)}{L(p_j)}+\frac{(1-\alpha)}{N}$$

其中，p_{i}表示第i张网页，M_{i}是p_{i}的入链接集合，p_{j}是M_{i}集合中的第j张网页。$PR_{(p_{j})}$表示网页p_{j}的PageRank得分，$L_{(p_{j})}$表示网页p_{j}的出链接数量，$\frac{1}{L_{(p_{j})}}$就表示从网页p_{j}跳转

到p_{i}的概率。$α$是用户不进行随机跳转的概率，N表示所有网页的数量。

PageRank的计算是采样迭代法实现的：一开始所有网页结点的初始PageRank值都可以设置为某个相同的数，例如1，然后我们通过上面这个公式，得到每个结点新的PageRank值。每当一张网页的PageRank发生了改变，它也会影响它的出链接所指向的网页，因此我们可以再次使用这个公式，循环地修正每个网页结点的值。由于这是一个马尔科夫过程，所以我们能从理论上证明，所有网页的PageRank最终会达到一个稳定的数值。整个证明过程很复杂，这里我们只需要知道这个迭代计算的过程就行了。

简化PageRank公式

那么，这个计算公式和矩阵操作又有什么联系呢？为了把问题简化，我们暂时不考虑随机跳转的情况，而只考虑用户按照网页间链接进行随机冲浪。那么PageRank的公式就简化为：

$$\sum_{p_j \in M_i} \frac{PR(p_j)}{L(p_j)}$$

这个公式只包含了原公式中的$Σ\frac{PR_{(p_{j})}}{L_{(p_{j})}}$部分。我们再来对比看看矩阵点乘的计算公式。

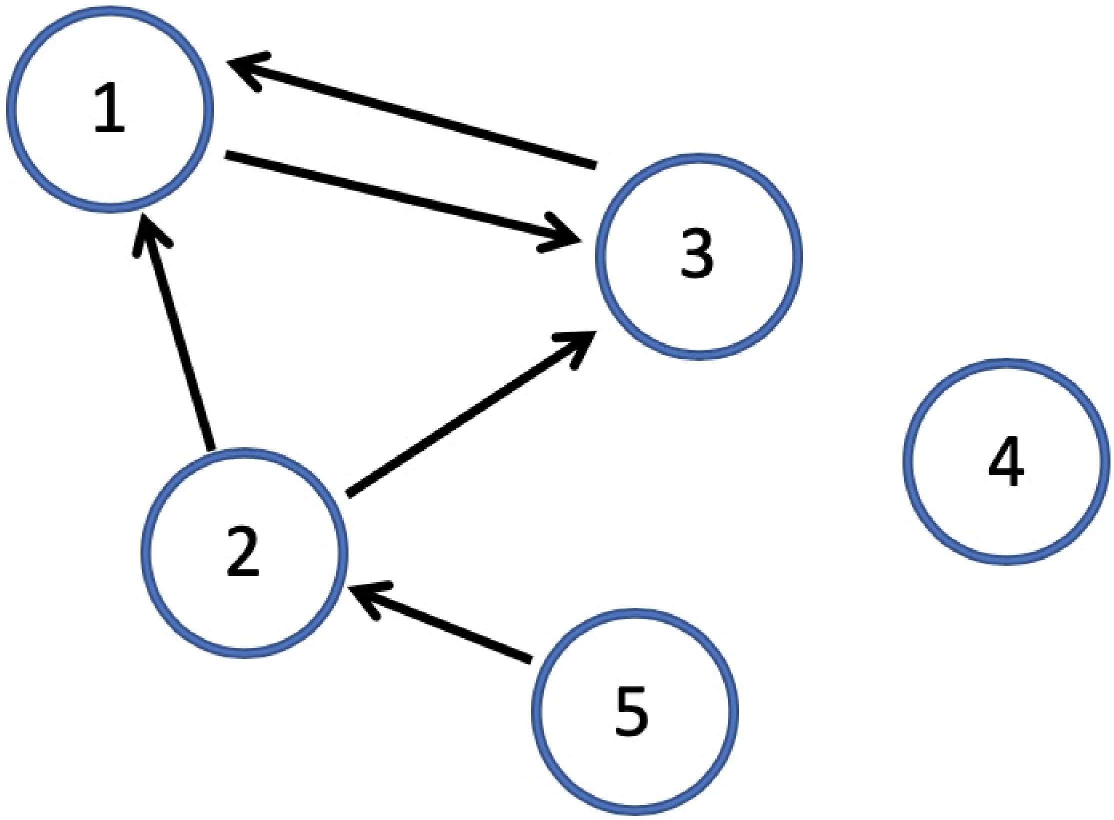
$$Z_{i,j} = \sum_k X_{i,k} Y_{k,j}$$

以上两个公式在形式上是基本一致的。因此，我们可以把$Σ\frac{PR_{(p_{j})}}{L_{(p_{j})}}$的计算，分解为两个矩阵的点乘。一个矩阵是当前每张网页的PageRank得分，另一个矩阵就是邻接矩阵。所谓邻接矩阵，其实就是表示图结点相邻关系的矩阵。

假设$x_{i,j}$是矩阵中第i行、第j列的元素，那么我们就可以使用$x_{i,j}$表示从结点i到结点j的连接，放到PageRank的应用场景，$x_{i,j}$就表示网页p_{i}到网页p_{j}的链接。最原始的邻接矩阵所包含的元素是0或1，0表示没有链接，而1表示有链接。

考虑到PageRank里乘积是$\frac{1}{L_{(p_{j})}}$，我们可以对邻接矩阵的每一行进行归一化，用原始的值（0或1）除以$L_{(p_{j})}$，而$L_{(p_{j})}$表示有某张网页p_{j}的出链接，正好是矩阵中p_{j}这一行的和。所以，我们可以对原始的邻接矩阵，进行基于行的归一化，这样就能得到每个元素为$\frac{1}{L_{(p_{j})}}$的矩阵，其中j表示矩阵的第j行。注意，这里的归一化是指让所有元素加起来的和为1。

为了方便你理解，我用下面这个拓扑图作为例子给你详细解释。



基于上面这个图，原始矩阵为：

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

其中第i行、第j列的元素值表示从结点i到j是不是存在链接。如果是，那么这个值为1；否则就为0。

按照每一行的和，分别对每一行进行归一化之后的矩阵就变为：

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

有了上述这个邻接矩阵，我们就可以开始最简单的PageRank计算。PageRank的计算是采样迭代法实现的。这里我把初始值都设为1，并把第一次计算的结果列在这里。

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.5 & 1 & 1.5 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

好了，我们已经成功迈出了第一步，但是还需要考虑随机跳转的可能性。

考虑随机跳转

经过上面的步骤，我们已经求得$\Sigma\frac{PR_{(p_{j})}}{L_{(p_{j})}}$部分。不过，PageRank引入了随机跳转的机制。这一部分其实也是可以通过矩阵的点乘来实现的。我们把$\Sigma\frac{PR_{(p_{j})}}{L_{(p_{j})}}$部分用$A$表示，那么完整的PageRank公式就可以表示为：

$$PR_{(P_{i})}=\alpha A+\frac{1-\alpha}{N}$$

于是，我们可以把上述公式分解为如下两个矩阵的点乘：

$$\left[A, \frac{1}{N}\right]\begin{bmatrix} \alpha \\ 1-\alpha \end{bmatrix}$$

我们仍然使用前面的例子，来看看经过随机跳转之后，PageRank值变成了多少。这里$α$取0.9。

$$\begin{bmatrix} 1.5 & 1/5 \\ 1 & 1/5 \\ 1.5 & 1/5 \\ 0 & 1/5 \\ 0 & 1/5 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0.9 \\ 1-0.9 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1.37 & 0.92 & 1.37 & 0.02 & 0.02 \end{bmatrix}$$

我们前面提到，PageRank算法需要迭代式计算。为了避免计算后的数值越来越大甚至溢出，我们可以进行归一化处理，保证所有结点的数值之和为1。经过这个处理之后，我们得到第一轮的PageRank数值，也就是下面这个行向量：

[0.37027027 0.24864865 0.37027027 0.00540541 0.00540541]

接下来，我们只需要再重复之前的步骤，直到每个结点的值趋于稳定就可以了。

使用Python进行实现

说到这里，我已经把如何把整个PageRank的计算，转换成多个矩阵的点乘这个过程讲完了。这样一来，我们就可以利用Python等科学计算语言提供的库，来完成基于PageRank的链接分析。为了展示具体的代码，我以之前的拓扑图为例，给你详细讲述每一步。

首先，我们要进行一些初始化工作，包括设置结点数量、确定随机跳转概率的$α$、代表拓扑图的邻接矩阵以及存放所有结点PageRank值的数组。下面是一段示例代码，在代码中我提供了注释供你参考。

```
import numpy as np

# 设置确定随机跳转概率的alpha、网页结点数
alpha = 0.9
N = 5

# 初始化随机跳转概率的矩阵
jump = np.full([2,1], [[alpha], [1-alpha]], dtype=float)

# 邻接矩阵的构建
adj = np.full([N,N], [[0,0,1,0,0],[1,0,1,0,0],[1,0,0,0,0],[0,0,0,0,0],[0,1,0,0,0]], dtype=float)

# 对邻接矩阵进行归一化
row_sums = adj.sum(axis=1)      # 对每一行求和
row_sums[row_sums == 0] = 0.1   # 防止由于分母出现0而导致的Nan
adj = adj / row_sums[:, np.newaxis] # 除以每行之和的归一化

# 初始的PageRank值，通常是设置所有值为1.0
pr = np.full([1,N], 1, dtype=float)
```

之后，我们就能采用迭代法来计算PageRank值。一般我们通过比较每个结点最近两次计算的值是否足够接近，来确定数值是不是已经稳定，以及是不是需要结束迭代。这里为简便起见，我使用了固定次数的循环来实现。如果你的拓扑图比较复杂，需要更多次迭代，我把示例代码和注释列在这里。

```
# PageRank算法本身是采样迭代方式进行的，当最终的取值趋于稳定后结束。
for i in range(0, 20):

    # 进行点乘，计算Σ(PR(pj)/L(pj))
    pr = np.dot(pr, adj)

    # 转置保存Σ(PR(pj)/L(pj))结果的矩阵，并增加长度为N的列向量，其中每个元素的值为1/N，便于下一步的点乘。
    pr_jump = np.full([N, 2], [[0, 1/N]])
    pr_jump[:,:-1] = pr.transpose()

    # 进行点乘，计算α(Σ(PR(pj)/L(pj))) + (1-α)/N)
    pr = np.dot(pr_jump, jump)

    # 归一化PageRank得分
    pr = pr.transpose()
    pr = pr / pr.sum()

    print("round", i + 1, pr)
```

如果成功运行了上述两段代码，你就能看到每个结点最终获得的PageRank分数是多少。

Python中还有一些很不错的库，提供了直接构建拓扑图和计算PageRank的功能，例如networkx（https://networkx.github.io/）。你可以尝试使用这种库，构建样例拓扑图并计算每个结点的PageRank得分，最后和上述代码所计算的PageRank得分进行比较，验证一下上述代码的结果是不是合理。

总结

我们可以把向量看作一维数组，把矩阵看作二维数组。矩阵的点乘，是由若干个向量的点乘组成的，所以我们可以通过矩阵的点乘操作，挖掘多组向量两两之间的关系。

今天我们讲了矩阵的点乘操作在PageRank算法中的应用。通过表示网页的邻接二元关系，我们可以使用矩阵来计算PageRank的得分。在这个应用场景下，矩阵点乘体现了多个马尔科夫过程中的状态转移。

矩阵点乘和其他运算操作，还可以运用在很多其他的领域。例如，我在上一节介绍K均值聚类算法时，就提到了需要计算某个数据点向量、其他数据点向量之间的距离或者相似度，以及使用多个数据点向量的平均值来获得质心点的向量，这些都可以通过矩阵操作来完成。

另外，在协同过滤的推荐中，我们可以使用矩阵点乘，来实现多个用户或者物品之间的相似程度，以及聚集后的相似程度所导致的最终推荐结果。下一节，我会使用矩阵来表示用户和物品的二元关系，并通过矩阵来计算协同过滤的结果。

思考题

在介绍PageRank算法时，我提到了它的计算是一个迭代的过程。这一节我使用了固定次数的循环来实现这一点。请尝试使用计算前后两次PageRank数值的差，来判断是否需要结束迭代。（提示：你可以使用矩阵元素对应的减法，以及在第3讲和加餐2中提到的相对误差。）

欢迎留言和我分享，也欢迎你在留言区写下今天的学习笔记。你可以点击“请朋友读”，把今天的内容分享给你的好友，和他一起精进。

精选留言

晨曦后浪

使用networkx中的pagerank函数,计算出来的数值和直接基于矩阵计算出来的数值有一点点差别,但相对大小还是一样的

```
import networkx as nx
import matplotlib.pyplot as plt

# 创建有向图
G = nx.DiGraph()
# 添加带权重有向边
G.add_weighted_edges_from([(1, 3, 1), (2, 1, 1), (2, 3, 1), (3, 1, 1), (5, 2, 1)])
# 添加孤立节点
G.add_node(4)
# 计算pagerank值
pagerank_list = nx.pagerank(G, alpha=0.85)
print("pagerank 值是： ", pagerank_list)

nx.draw(G, with_labels=True, font_weight='bold')
plt.show()
```

pagerank 值是： {1: 0.43042160902192195, 3: 0.43042160902192195, 2: 0.06686758646711714, 5: 0.03614459774451953, 4: 0.03614459774451953}

2019-03-11 15:58

作者回复

赞一下实践精神，确实我也发现了这点，估计是具体实现上有所区别。

2019-03-12 00:32

拉欧

一直想搞明白pagerank的计算流程，这节课真值
2019-03-11 09:30