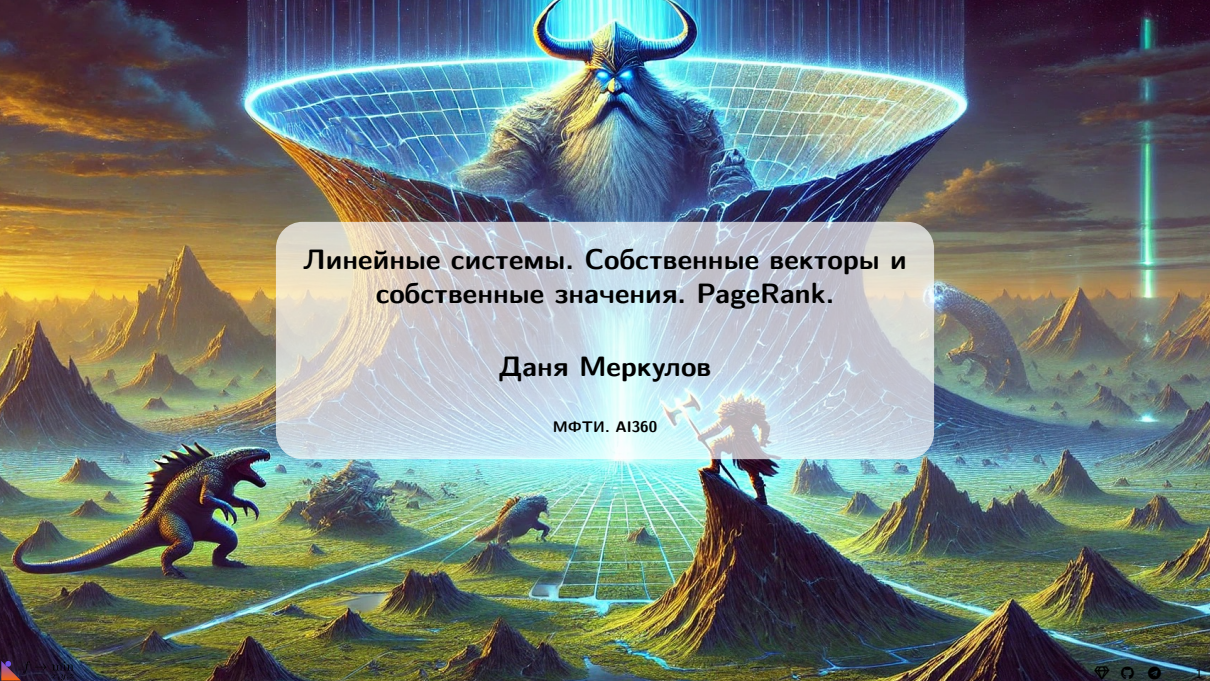


Линейные системы. Собственные векторы и собственные значения. PageRank.

Даня Меркулов

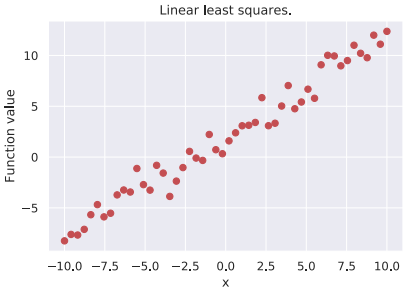
МФТИ. AI360

Линейные системы

Матричные разложения и линейные системы

В задаче наименьших квадратов (aka линейной регрессии) мы имеем измерения $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ и $y \in \mathbb{R}^m$ и ищем вектор $\theta \in \mathbb{R}^n$ такой, что $X\theta$ близок к y. Близость определяется как сумма квадратов разностей:

$$\sum_{i=1}^{m} (x_i^\top \theta - y_i)^2 \qquad \|X\theta - y\|_2^2 \to \min_{\theta \in \mathbb{R}^n} \qquad X\theta^* = y$$



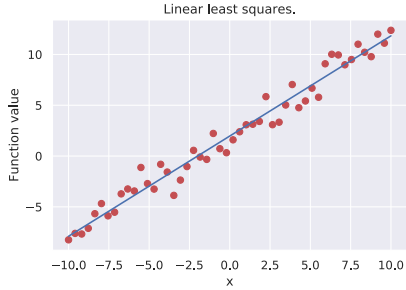


Рис. 1: Illustration of linear system aka least squares

Матричные разложения и линейные системы

Moore--Penrose inverse

Если матрица X относительно мала, мы можем записать и вычислить точное решение:

$$\theta^* = (X^\top X)^{-1} X^\top y = X^\dagger y,$$

Матричные разложения и линейные системы

Moore--Penrose inverse

Если матрица X относительно мала, мы можем записать и вычислить точное решение:

$$\theta^* = (X^\top X)^{-1} X^\top y = X^\dagger y,$$

где $X^\dagger$ называется псевдо-обратной матрицей. Однако, этот подход возводит в квадрат число обусловленности задачи, что может быть проблемой для больших и плохо обусловленных задач.

Матричные разложения и линейные системы

Moore--Penrose inverse

Если матрица X относительно мала, мы можем записать и вычислить точное решение:

$$\theta^* = (X^\top X)^{-1} X^\top y = X^\dagger y,$$

где $X^\dagger$ называется псевдо-обратной матрицей. Однако, этот подход возводит в квадрат число обусловленности задачи, что может быть проблемой для больших и плохо обусловленных задач.

QR разложение

Для любой матрицы $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ существует QR разложение:

$$X = Q \cdot R,$$

Матричные разложения и линейные системы

Moore--Penrose inverse

Если матрица X относительно мала, мы можем записать и вычислить точное решение:

$$\theta^* = (X^\top X)^{-1} X^\top y = X^\dagger y,$$

где $X^\dagger$ называется псевдо-обратной матрицей. Однако, этот подход возводит в квадрат число обусловленности задачи, что может быть проблемой для больших и плохо обусловленных задач.

QR разложение

Для любой матрицы $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ существует QR разложение:

$$X = Q \cdot R,$$

где Q - ортогональная матрица (ее столбцы ортогональные единичные векторы) и R - верхняя треугольная матрица. Важно отметить, что поскольку $Q^{-1} = Q^\top$, мы имеем:

$$QR\theta = y \quad \longrightarrow \quad R\theta = Q^\top y$$

Теперь процесс нахождения θ состоит из двух шагов:

1. Найдите QR разложение X.

Матричные разложения и линейные системы

Moore--Penrose inverse

Если матрица X относительно мала, мы можем записать и вычислить точное решение:

$$\theta^* = (X^\top X)^{-1} X^\top y = X^\dagger y,$$

где $X^\dagger$ называется псевдо-обратной матрицей. Однако, этот подход возводит в квадрат число обусловленности задачи, что может быть проблемой для больших и плохо обусловленных задач.

QR разложение

Для любой матрицы $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ существует QR разложение:

$$X = Q \cdot R,$$

где Q - ортогональная матрица (ее столбцы ортогональные единичные векторы) и R - верхняя треугольная матрица. Важно отметить, что поскольку $Q^{-1} = Q^\top$, мы имеем:

$$QR\theta = y \quad \longrightarrow \quad R\theta = Q^\top y$$

Теперь процесс нахождения θ состоит из двух шагов:

1. Найдите QR разложение X.
2. Решите треугольную систему $R\theta = Q^\top y$, которая треугольная и, следовательно, легко решаемая.

Матричные разложения и линейные системы

Разложение Холецкого

Для любой положительно определенной матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ существует разложение Холецкого:

$$X^\top X = A = L^\top \cdot L,$$

где L - нижняя треугольная матрица. Мы имеем:

$$L^\top L\theta = y \quad \longrightarrow \quad L^\top z_\theta = y$$

Теперь процесс нахождения θ состоит из двух шагов:

1. Найдите разложение Холецкого $X^\top X$.

Обратите внимание, что в этом случае ошибка пропорциональна квадрату числа обусловленности.

Матричные разложения и линейные системы

Разложение Холецкого

Для любой положительно определенной матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ существует разложение Холецкого:

$$X^\top X = A = L^\top \cdot L,$$

где L - нижняя треугольная матрица. Мы имеем:

$$L^\top L\theta = y \quad \longrightarrow \quad L^\top z_\theta = y$$

Теперь процесс нахождения θ состоит из двух шагов:

1. Найдите разложение Холецкого $X^\top X$.
2. Найдите $z_\theta = L\theta$ путем решения треугольной системы $L^\top z_\theta = y$

Обратите внимание, что в этом случае ошибка пропорциональна квадрату числа обусловленности.

Матричные разложения и линейные системы

Разложение Холецкого

Для любой положительно определенной матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ существует разложение Холецкого:

$$X^\top X = A = L^\top \cdot L,$$

где L - нижняя треугольная матрица. Мы имеем:

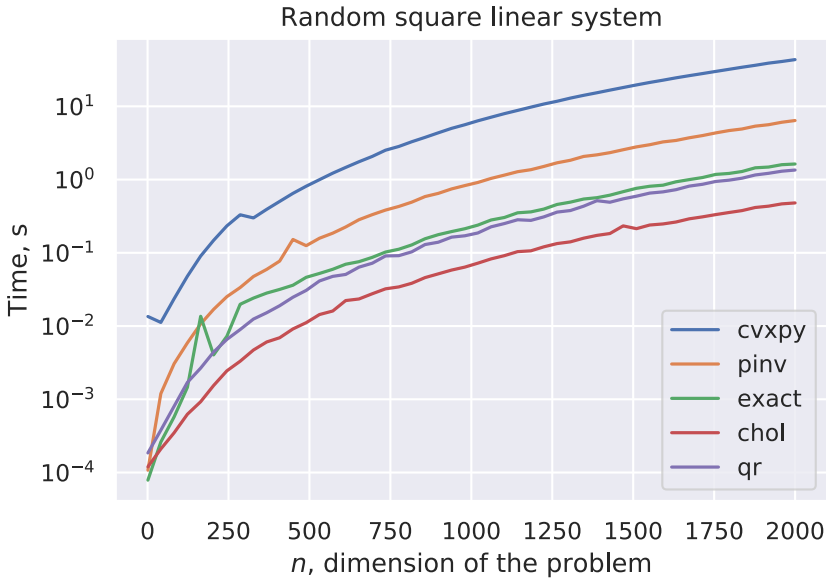
$$L^\top L\theta = y \quad \longrightarrow \quad L^\top z_\theta = y$$

Теперь процесс нахождения θ состоит из двух шагов:

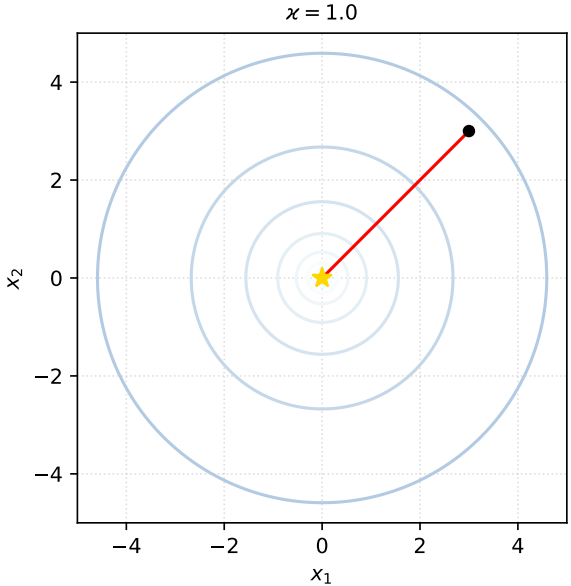
1. Найдите разложение Холецкого $X^\top X$.
2. Найдите $z_\theta = L\theta$ путем решения треугольной системы $L^\top z_\theta = y$
3. Найдите θ путем решения треугольной системы $L\theta = z_\theta$

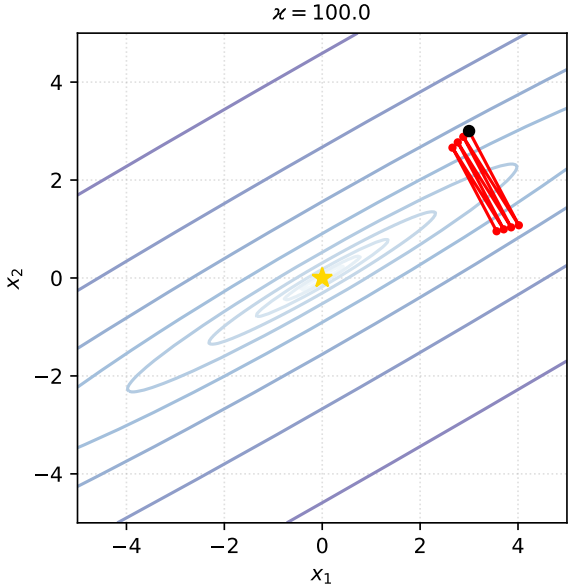
Обратите внимание, что в этом случае ошибка пропорциональна квадрату числа обусловленности.

Матричные разложения и линейные системы

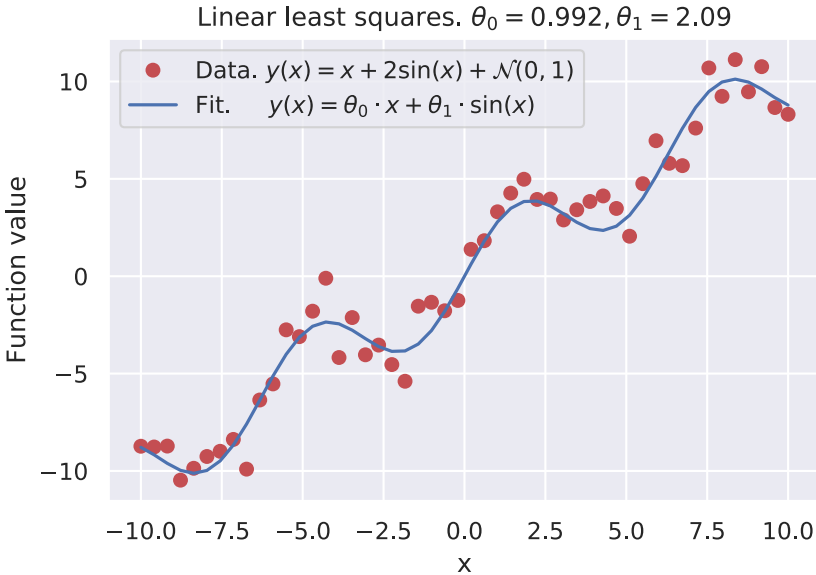


Число обусловленности $\varkappa$





Матричные разложения и линейные системы



Собственные векторы и собственные значения

Что такое собственный вектор?

- **Определение.** Вектор $x \neq 0$ называется **собственным вектором** квадратной матрицы A, если существует число λ такое, что

$$Ax = \lambda x.$$

Что такое собственный вектор?

- **Определение.** Вектор $x \neq 0$ называется **собственным вектором** квадратной матрицы A, если существует число λ такое, что

$$Ax = \lambda x.$$

- Число λ называется **собственным значением**. Иногда используется термин **собственная пара**.

Что такое собственный вектор?

- **Определение.** Вектор $x \neq 0$ называется **собственным вектором** квадратной матрицы A, если существует число λ такое, что

$$Ax = \lambda x.$$

- Число λ называется **собственным значением**. Иногда используется термин **собственная пара**.
- Поскольку $A - \lambda I$ должна иметь нетривиальное ядро, собственные значения являются корнями характеристического полинома

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

Спектральное разложение

Если матрица A размера $n \times n$ имеет n собственных векторов s_i, $i = 1, \dots, n$:

$$As_i = \lambda_i s_i,$$

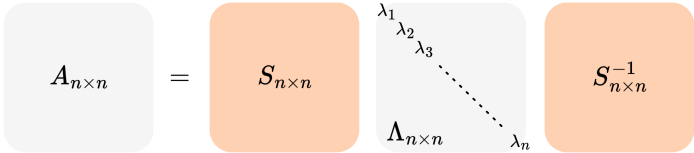
то это можно записать как

$$AS = S\Lambda, \quad \text{где} \quad S = (s_1, \dots, s_n), \quad \Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n),$$

или эквивалентно

$$A = S\Lambda S^{-1}.$$

Это называется **спектральным разложением** матрицы. Матрицы, которые могут быть представлены в виде спектрального разложения, называются **диагонализируемыми**.



Вычисление собственных значений и собственных векторов

Как вычислить собственные значения и собственные векторы?

Существуют два типа задач на собственные значения:

- вычисление всех собственных значений и собственных векторов или полного спектра (требуются все собственные значения и собственные векторы)

Вычисление собственных значений и собственных векторов

Как вычислить собственные значения и собственные векторы?

Существуют два типа задач на собственные значения:

- вычисление всех собственных значений и собственных векторов или полного спектра (требуются все собственные значения и собственные векторы)
- вычисление части спектра (минимальные/максимальные собственные значения, собственные значения в заданной области)

Вычисление собственных значений через характеристическое уравнение

Задача на собственные значения имеет вид

$$Ax = \lambda x,$$

или

$$(A - \lambda I)x = 0,$$

следовательно, матрица $A - \lambda I$ имеет нетривиальное ядро и должна быть сингулярной.

Это означает, что определитель

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

- Уравнение называется **характеристическим уравнением**, а левая часть является полиномом степени n.

Вычисление собственных значений через характеристическое уравнение

Задача на собственные значения имеет вид

$$Ax = \lambda x,$$

или

$$(A - \lambda I)x = 0,$$

следовательно, матрица $A - \lambda I$ имеет нетривиальное ядро и должна быть сингулярной.

Это означает, что определитель

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

- Уравнение называется **характеристическим уравнением**, а левая часть является полиномом степени n.
- Полином n-й степени имеет n комплексных корней!

Собственные значения и характеристическое уравнение

- Теперь мы вернемся к собственным значениям.

Собственные значения и характеристическое уравнение

- Теперь мы вернемся к собственным значениям.
- Характеристическое уравнение можно использовать для вычисления собственных значений, что приводит к **наивному** алгоритму:

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

Собственные значения и характеристическое уравнение

- Теперь мы вернемся к собственным значениям.
- Характеристическое уравнение можно использовать для вычисления собственных значений, что приводит к **наивному** алгоритму:

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

1. Вычислите коэффициенты полинома

Собственные значения и характеристическое уравнение

- Теперь мы вернемся к собственным значениям.
- Характеристическое уравнение можно использовать для вычисления собственных значений, что приводит к **наивному** алгоритму:

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

1. Вычислите коэффициенты полинома
2. Вычислите корни

Собственные значения и характеристическое уравнение

- Теперь мы вернемся к собственным значениям.
- Характеристическое уравнение можно использовать для вычисления собственных значений, что приводит к **наивному** алгоритму:

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

1. Вычислите коэффициенты полинома
2. Вычислите корни

Собственные значения и характеристическое уравнение

- Теперь мы вернемся к собственным значениям.
- Характеристическое уравнение можно использовать для вычисления собственных значений, что приводит к **наивному** алгоритму:

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

1. Вычислите коэффициенты полинома
2. Вычислите корни

Это хорошая идея?

Степенной метод

- Мы часто интересуемся вычислением части спектра, например, наибольших или наименьших собственных значений.

Степенной метод

- Мы часто интересуемся вычислением части спектра, например, наибольших или наименьших собственных значений.
- Также интересно отметить, что для эрмитовых матриц $(A = A^*)$ собственные значения всегда действительные (докажите это!).

Степенной метод

- Мы часто интересуемся вычислением части спектра, например, наибольших или наименьших собственных значений.
- Также интересно отметить, что для эрмитовых матриц $(A = A^*)$ собственные значения всегда действительные (докажите это!).
- Степенной метод является самым простым методом для вычисления **наибольшего по модулю собственного значения**.

Степенной метод

- Мы часто интересуемся вычислением части спектра, например, наибольших или наименьших собственных значений.
- Также интересно отметить, что для эрмитовых матриц $(A = A^*)$ собственные значения всегда действительные (докажите это!).
- Степенной метод является самым простым методом для вычисления **наибольшего по модулю собственного значения**.
- Он также является нашим первым примером **итерационного метода** и **метода Крылова**.

Упражнение

Докажите, что для эрмитовых матриц $(A = A^*)$ собственные значения всегда действительные.

Упражнение

Докажите, что для эрмитовых матриц $(A = A^*)$ собственные значения всегда действительные.

Решение.

1. Пусть λ - собственное значение матрицы A, а $x \neq 0$ - собственный вектор, тогда:

$$Ax = \lambda x$$
$$x^*Ax = \lambda x^*x$$

Упражнение

Докажите, что для эрмитовых матриц $(A = A^*)$ собственные значения всегда действительные.

Решение.

1. Пусть λ - собственное значение матрицы A, а $x \neq 0$ - собственный вектор, тогда:

$$Ax = \lambda x$$
$$x^*Ax = \lambda x^*x$$

2. Так как $A = A^*$, выражение слева - эрмитово (вещественное) число, значит:

$$(x^*Ax)^* = x^*A^*x = x^*Ax$$
$$(\lambda x^*x)^* = \lambda^* x^*x = (x^*Ax)^* = \lambda x^*x$$

Упражнение

Докажите, что для эрмитовых матриц $(A = A^*)$ собственные значения всегда действительные.

Решение.

1. Пусть λ - собственное значение матрицы A, а $x \neq 0$ - собственный вектор, тогда:

$$Ax = \lambda x$$
$$x^*Ax = \lambda x^*x$$

2. Так как $A = A^*$, выражение слева - эрмитово (вещественное) число, значит:

$$(x^*Ax)^* = x^*A^*x = x^*Ax$$
$$(\lambda x^*x)^* = \lambda^* x^*x = (x^*Ax)^* = \lambda x^*x$$

3. Поскольку $x^*x > 0$, отсюда следует:

$$\lambda = \lambda^* \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$$

Степенной метод

1. Задача на собственные значения

$$Ax = \lambda x, \quad \|x\|_2 = 1 \text{ для стабильности.}$$

может быть переписана как **итерационный метод**.

Степенной метод

1. Задача на собственные значения

$$Ax = \lambda x, \quad \|x\|_2 = 1 \text{ для стабильности.}$$

   может быть переписана как **итерационный метод**.
2. Этот метод называется **степенным методом** и находит наибольшее по модулю собственное значение матрицы A.

Степенной метод

1. Задача на собственные значения

$$Ax = \lambda x, \quad \|x\|_2 = 1 \text{ для стабильности.}$$

   может быть переписана как **итерационный метод**.
2. Этот метод называется **степенным методом** и находит наибольшее по модулю собственное значение матрицы A.
3. Степенной метод имеет вид

$$x_{k+1} = Ax_k, \quad x_{k+1} := \frac{x_{k+1}}{\|x_{k+1}\|_2}$$

   и

$$x_{k+1} \to v_1,$$

   где $Av_1 = \lambda_1 v_1$ и λ_1 является наибольшим собственным значением и v_1 является соответствующим собственным вектором.

Степенной метод

1. Задача на собственные значения

$$Ax = \lambda x, \quad \|x\|_2 = 1 \text{ для стабильности.}$$

может быть переписана как **итерационный метод**.
2. Этот метод называется **степенным методом** и находит наибольшее по модулю собственное значение матрицы A.
3. Степенной метод имеет вид

$$x_{k+1} = Ax_k, \quad x_{k+1} := \frac{x_{k+1}}{\|x_{k+1}\|_2}$$

и

$$x_{k+1} \to v_1,$$

где $Av_1 = \lambda_1 v_1$ и λ_1 является наибольшим собственным значением и v_1 является соответствующим собственным вектором.

4. На $(k+1)$-й итерации приближение к λ_1 может быть найдено как

$$\lambda^{(k+1)} = (Ax_{k+1}, x_{k+1}),$$

Степенной метод

1. Задача на собственные значения

$$Ax = \lambda x, \quad \|x\|_2 = 1 \text{ для стабильности.}$$

может быть переписана как **итерационный метод**.
2. Этот метод называется **степенным методом** и находит наибольшее по модулю собственное значение матрицы A.
3. Степенной метод имеет вид

$$x_{k+1} = Ax_k, \quad x_{k+1} := \frac{x_{k+1}}{\|x_{k+1}\|_2}$$

и

$$x_{k+1} \to v_1,$$

где $Av_1 = \lambda_1 v_1$ и λ_1 является наибольшим собственным значением и v_1 является соответствующим собственным вектором.

4. На $(k+1)$-й итерации приближение к λ_1 может быть найдено как

$$\lambda^{(k+1)} = (Ax_{k+1}, x_{k+1}),$$

5. Заметим, что $\lambda^{(k+1)}$ не требуется для $(k+2)$-й итерации, но может быть полезно для измерения ошибки на каждой итерации: $\|Ax_{k+1} - \lambda^{(k+1)} x_{k+1}\|$.

Степенной метод

1. Задача на собственные значения

$$Ax = \lambda x, \quad \|x\|_2 = 1 \text{ для стабильности.}$$

может быть переписана как **итерационный метод**.
2. Этот метод называется **степенным методом** и находит наибольшее по модулю собственное значение матрицы A.
3. Степенной метод имеет вид

$$x_{k+1} = Ax_k, \quad x_{k+1} := \frac{x_{k+1}}{\|x_{k+1}\|_2}$$

и

$$x_{k+1} \to v_1,$$

где $Av_1 = \lambda_1 v_1$ и λ_1 является наибольшим собственным значением и v_1 является соответствующим собственным вектором.

4. На $(k+1)$-й итерации приближение к λ_1 может быть найдено как

$$\lambda^{(k+1)} = (Ax_{k+1}, x_{k+1}),$$

5. Заметим, что $\lambda^{(k+1)}$ не требуется для $(k+2)$-й итерации, но может быть полезно для измерения ошибки на каждой итерации: $\|Ax_{k+1} - \lambda^{(k+1)} x_{k+1}\|$.
6. Скорость алгоритма геометрическая (линейная), но показатель сходимости равен q^k, где $q = \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right| < 1$, для $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ и k - число итераций.

Степенной метод

1. Задача на собственные значения

$$Ax = \lambda x, \quad \|x\|_2 = 1 \text{ для стабильности.}$$

может быть переписана как **итерационный метод**.
2. Этот метод называется **степенным методом** и находит наибольшее по модулю собственное значение матрицы A.
3. Степенной метод имеет вид

$$x_{k+1} = Ax_k, \quad x_{k+1} := \frac{x_{k+1}}{\|x_{k+1}\|_2}$$

и

$$x_{k+1} \to v_1,$$

где $Av_1 = \lambda_1 v_1$ и λ_1 является наибольшим собственным значением и v_1 является соответствующим собственным вектором.

4. На $(k+1)$-й итерации приближение к λ_1 может быть найдено как

$$\lambda^{(k+1)} = (Ax_{k+1}, x_{k+1}),$$

5. Заметим, что $\lambda^{(k+1)}$ не требуется для $(k+2)$-й итерации, но может быть полезно для измерения ошибки на каждой итерации: $\|Ax_{k+1} - \lambda^{(k+1)} x_{k+1}\|$.
6. Скорость алгоритма геометрическая (линейная), но показатель сходимости равен q^k, где $q = \left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right| < 1$, для $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n$ и k - число итераций.
7. Это означает, что сходимость может быть произвольно малой. Чтобы доказать это, достаточно рассмотреть 2×2 диагональную матрицу.

Вещи, которые стоит запомнить о степенном методе

- Степенной метод дает оценку наибольшего по модулю собственного значения или спектрального радиуса данной матрицы

Вещи, которые стоит запомнить о степенном методе

- Степенной метод дает оценку наибольшего по модулю собственного значения или спектрального радиуса данной матрицы
- Один шаг требует одного матрично-векторного произведения. Если матрица позволяет $\mathcal{O}(n)$ matvec (например, она разрежена), то степенной метод можно использовать для больших n.

Вещи, которые стоит запомнить о степенном методе

- Степенной метод дает оценку наибольшего по модулю собственного значения или спектрального радиуса данной матрицы
- Один шаг требует одного матрично-векторного произведения. Если матрица позволяет $\mathcal{O}(n)$ matvec (например, она разрежена), то степенной метод можно использовать для больших n.
- Сходимость может быть медленной

Вещи, которые стоит запомнить о степенном методе

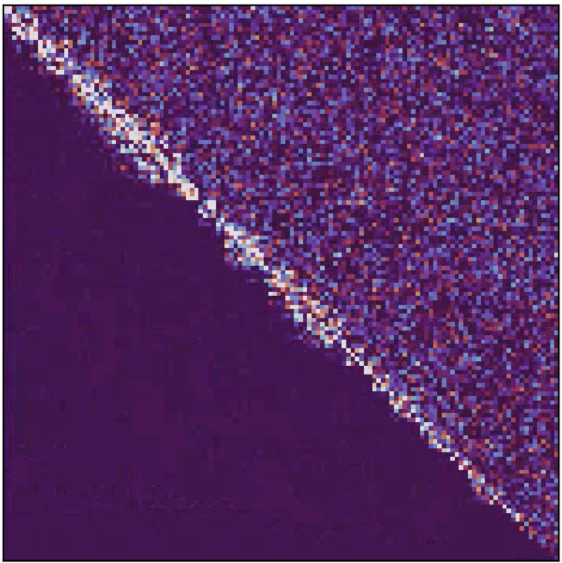
- Степенной метод дает оценку наибольшего по модулю собственного значения или спектрального радиуса данной матрицы
- Один шаг требует одного матрично-векторного произведения. Если матрица позволяет $\mathcal{O}(n)$ matvec (например, она разрежена), то степенной метод можно использовать для больших n.
- Сходимость может быть медленной
- Если нужна только грубая оценка, достаточно нескольких итераций

Вещи, которые стоит запомнить о степенном методе

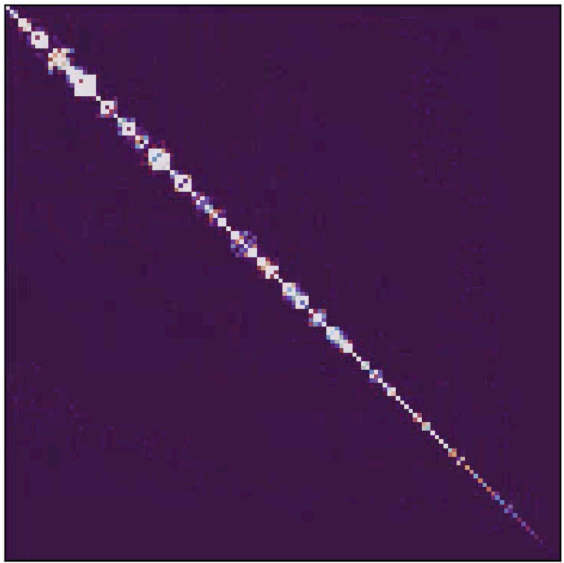
- Степенной метод дает оценку наибольшего по модулю собственного значения или спектрального радиуса данной матрицы
- Один шаг требует одного матрично-векторного произведения. Если матрица позволяет $\mathcal{O}(n)$ matvec (например, она разрежена), то степенной метод можно использовать для больших n.
- Сходимость может быть медленной
- Если нужна только грубая оценка, достаточно нескольких итераций
- Решение вектор находится в **подпространстве Крылова** $\{x_0, Ax_0, \dots, A^k x_0\}$ и имеет вид $\mu A^k x_0$, где μ является нормирующим коэффициентом.

В следующих сериях: QR-алгоритм

Случайная матрица



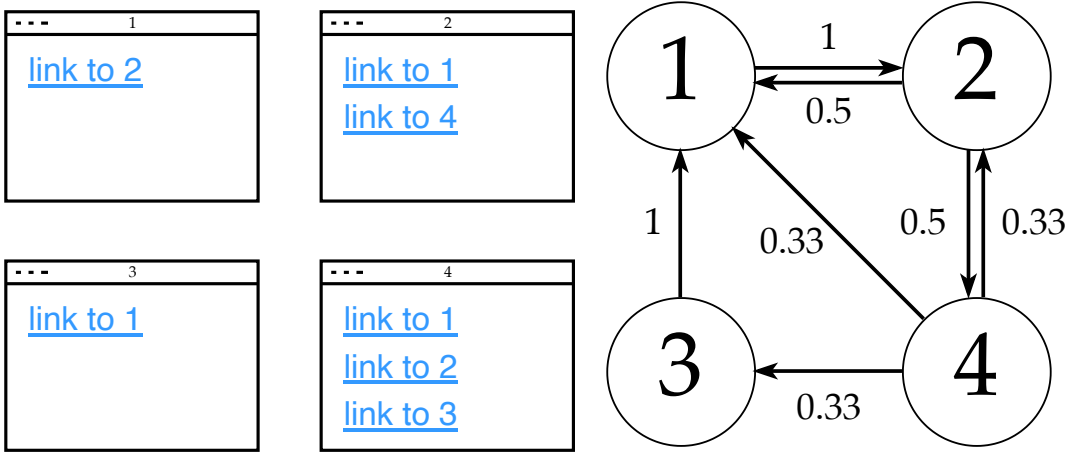
Симметричная матрица @fminxyz



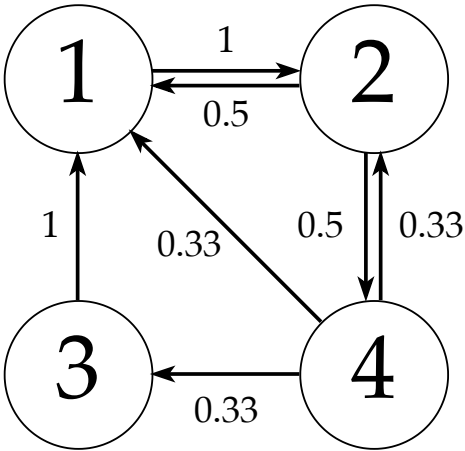
PageRank

PageRank

Рассмотрим простой пример. Предположим, что у нас есть 4 веб-сайта с некоторыми ссылками. Наша цель --- понять, насколько важен каждый из этих сайтов. Очевидно, что мы можем переформулировать эту проблему в терминах ориентированных графов. Здесь каждый узел представляет веб-сайт, а каждое ребро описывает ссылку с одного сайта на другой.



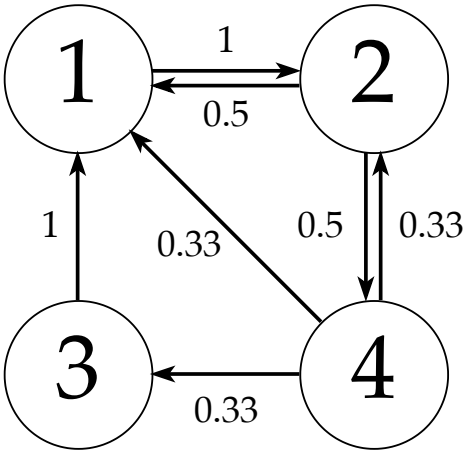
PageRank



Таким образом, мы можем ввести матрицу переходов A:

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

PageRank



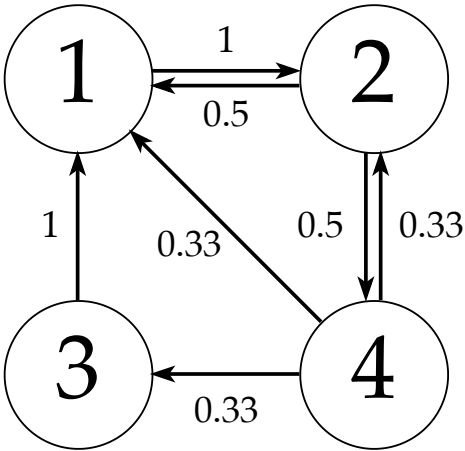
Таким образом, мы можем ввести матрицу переходов A:

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

Давайте введём вектор PageRank $\mathbf{x}$, который описывает важность каждого веб-сайта.

$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^\mathsf{T}$, где x_i - важность i-го веб-сайта

PageRank



Таким образом, мы можем ввести матрицу переходов A:

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

Давайте введём вектор PageRank $\mathbf{x}$, который описывает важность каждого веб-сайта.

$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, x_4)^\mathsf{T}$, где x_i - важность i-го веб-сайта

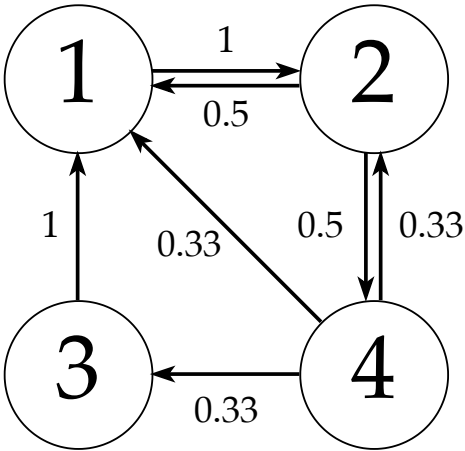
Предположим, что начальная важность равномерно распределена между всеми узлами. Тогда:

$$\mathbf{x}^0 = (0.25, 0.25, 0.25, 0.25)^\mathsf{T}$$

Каждая входящая ссылка увеличивает важность узла. Таким образом, этот обновление может быть записано как умножение матрицы на вектор:

$$\mathbf{x}^1 = A \cdot \mathbf{x}^0 = (0.46, 0.33, 0.08, 0.125)^\mathsf{T}$$

PageRank



Повторяя те же операции, мы можем легко увидеть сходимость:

$$\mathbf{x}^2 = A \cdot \mathbf{x}^1 = (0.29, 0.50, 0.04, 0.17)^\mathsf{T}$$

$$\mathbf{x}^3 = A \cdot \mathbf{x}^2 = (0.35, 0.35, 0.06, 0.25)^\mathsf{T}$$

...

$$\mathbf{x}^{14} = A \cdot \mathbf{x}^{13} = (0.33, 0.40, 0.07, 0.20)^\mathsf{T}$$

$$\mathbf{x}^{15} = A \cdot \mathbf{x}^{14} = (0.33, 0.40, 0.07, 0.20)^\mathsf{T}$$

Выполните упражнение PageRank.