Линейная алгебра

Матрицы и векторы. Первичное знакомство, основные операции.

Глеб Карпов

МНаД ФКН ВШЭ

Матрица

i Definition

Матрица — упорядоченный массив чисел в виде n строк и m столбцов.

$$A_{n\times m} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix}$$

Матрица

i Definition

Матрица — упорядоченный массив чисел в виде n строк и m столбцов.

$$A_{n\times m} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix}$$

ullet Обычно обозначаем как $A_{n imes m}$ или, чтобы подчеркнуть природу чисел в матрице, пишем $A\in\mathbb{R}^{n imes m}.$

Матрица

i Definition

Матрица — упорядоченный массив чисел в виде n строк и m столбцов.

$$A_{n\times m} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix}$$

- ullet Обычно обозначаем как $A_{n imes m}$ или, чтобы подчеркнуть природу чисел в матрице, пишем $A\in\mathbb{R}^{n imes m}.$
- Если n=m, то матрицу называют *квадратной*, если $n \neq m$ *прямоугольной*

Основные операции: транспонирование

i Definition

Транспонирование матрицы — это операция, при которой строки и столбцы меняются местами. Если $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$, то $B = A^T \in \mathbb{R}^{m \times n}$, где $b_{ij} = a_{ji}$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix} \xrightarrow{A^T} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} \end{bmatrix}$$

$$A_{2\times 3}$$

$$B_{3\times 2} = A^T$$

Основные операции: сложение матриц

i Definition

Сложение матриц возможно только для матриц одинакового размера. Результат получается сложением соответствующих элементов. Если $A,B\in\mathbb{R}^{n\times m}$, то C=A+B, где $c_{ij}=a_{ij}+b_{ij}$

Пример:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1+5 & 2+6 \\ 3+7 & 4+8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 8 \\ 10 & 12 \end{bmatrix}$$

Основные операции: умножение на скаляр

i Definition

Умножение на скаляр — каждый элемент матрицы умножается на заданное число. Если $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ и $\alpha \in \mathbb{R}$, то $C = \alpha A$, где $c_{ij} = \alpha \cdot a_{ij}$

Пример:

$$3 \cdot \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \cdot 1 & 3 \cdot 2 \\ 3 \cdot 3 & 3 \cdot 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 6 \\ 9 & 12 \end{bmatrix}$$

Комбинация операций:

$$2\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}+3\begin{bmatrix}1&1\\1&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2&0\\0&2\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}3&3\\3&3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}5&3\\3&5\end{bmatrix}$$

В самом простом представлении будем трактовать вектор как частный случай матрицы:

Вектор-столбец

$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$

Вектор-строка

$$\mathbf{y}^T = \begin{bmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1 \times m}$$

Размерность: $1 \times m$ (матрица с одной строкой)

Размерность: $n \times 1$ (матрица с одним столбцом)

Обозначения

 $f \cdot$ Векторы: обычно обозначаются строчными буквами x,v или ${f u}$

В самом простом представлении будем трактовать вектор как частный случай матрицы:

Вектор-столбец

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$$

Вектор-строка

$$\mathbf{y}^T = \begin{bmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1 \times m}$$

Размерность: $1 \times m$ (матрица с одной строкой)

Размерность: $n \times 1$ (матрица с одним столбцом)

Обозначения

- $f \cdot$ Векторы: обычно обозначаются строчными буквами x,v или ${f u}$
- Матрицы: обычно обозначаются заглавными буквами A,B,C

В самом простом представлении будем трактовать вектор как частный случай матрицы:

Вектор-столбец

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$$

Вектор-строка

$$\mathbf{y}^T = \begin{bmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1 \times m}$$

Размерность: $1 \times m$ (матрица с одной строкой)

Размерность: $n \times 1$ (матрица с одним столбцом)

Обозначения

- ullet Векторы: обычно обозначаются строчными буквами x,v или ${f u}$
- Матрицы: обычно обозначаются заглавными буквами A,B,C
- По умолчанию: вектор считается вектором-столбцом

В самом простом представлении будем трактовать вектор как частный случай матрицы:

Вектор-столбец

$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$

Вектор-строка

$$\mathbf{y}^T = \begin{bmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{1 \times m}$$

Размерность: $1 \times m$ (матрица с одной строкой)

Размерность: $n \times 1$ (матрица с одним столбцом)

Обозначения

- ullet Векторы: обычно обозначаются строчными буквами x,v или ${f u}$
- Матрицы: обычно обозначаются заглавными буквами A,B,C
- По умолчанию: вектор считается вектором-столбцом
- Транспонирование: \mathbf{x}^{\top} превращает столбец в строку

Обычный подход

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,m-1} & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,m-1} & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,m-1} & a_{nm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{m-1} \\ x_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

$$y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1,m-1}x_{m-1} + a_{1m}x_m$$

$$y_j = \sum_{k=1}^m a_{jk} x_k$$

Вычислительная сложность и немного о параллельных вычислениях

Вспомним общую формулу:

$$y_j = \sum_{k=1}^m a_{jk} x_k, \quad j = 1, 2, \dots, n$$

Анализ операций:

- Для вычисления одного элемента y_j : m умножений (каждое $a_{jk} \cdot x_k$), m-1 сложений (суммирование m произведений)
- Для всего вектора у (п элементов): $n \cdot (2m-1)$ операций всего.

Временная сложность:

- ullet Для квадратной матрицы n imes n: $\mathcal{O}(2n^2-n)=\mathcal{O}(n^2)$
- Для прямоугольной матрицы $n \times m$: $\mathcal{O}(nm)$
- 🥊 Естественный параллелизм

Вычисление каждого элемента y_i **независимо** от других элементов!

Построчная параллелизация: отдельный процессор может вычислять свой y_i

Просветленный подход :)

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

 \mathbf{x}

Просветленный подход:)

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

$$y_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4$$

Просветленный подход:)

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ x_4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{split} y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 \\ y_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 \end{split}$$

Просветленный подход:)

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_3 \\ x_4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{split} y_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 \\ y_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 \\ y_3 &= a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 \end{split}$$

Просветленный подход :)

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

$$A$$

$$\mathbf{y} = \begin{array}{c} \mathbf{x}_1 \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{bmatrix} + \mathbf{x}_2 \begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \end{bmatrix} + \mathbf{x}_3 \begin{bmatrix} a_{13} \\ a_{23} \\ a_{33} \end{bmatrix} + \begin{array}{c} \mathbf{x}_4 \begin{bmatrix} a_{14} \\ a_{24} \\ a_{34} \end{bmatrix}$$

Произведение матрицы на вектор

Визуальное сравнение

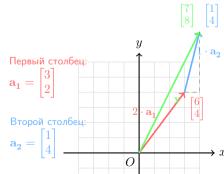
$$\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 8 \\ y \end{bmatrix}$$

Строка на столбец

Вычисления:

- $y_1 = 3 \cdot 2 + 1 \cdot 1 = 7$
- $y_2 = 2 \cdot 2 + 4 \cdot 1 = 8$

Комбинация столбцов



Обычный подход

j-й столбец

$$\begin{array}{c} \begin{bmatrix} a_{11} \ a_{12} \ \cdots \ a_{1k} \\ \vdots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ a_{i1} \ a_{i2} \ \cdots \ a_{ik} \\ \vdots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ a_{n1} \ a_{n2} \ \cdots \ a_{nk} \\ \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} b_{11} \ \cdots \ b_{1j} \ \cdots \ b_{1m} \\ b_{21} \ \cdots \ b_{2j} \ \cdots \ b_{2m} \\ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ b_{k1} \ \cdots \ b_{kj} \ \cdots \ b_{km} \\ \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} c_{11} \ \cdots \ c_{1j} \ \cdots \ c_{1m} \\ \vdots \ \ddots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ c_{i1} \ \cdots \ c_{ij} \ \cdots \ c_{im} \\ \vdots \ \ddots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ c_{n1} \ \cdots \ c_{nj} \ \cdots \ c_{nm} \\ \end{bmatrix} \\ = & \begin{bmatrix} c_{11} \ \cdots \ c_{1j} \ \cdots \ c_{1m} \\ \vdots \ \ddots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ c_{n1} \ \cdots \ c_{ij} \ \cdots \ c_{im} \\ \vdots \ \ddots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ c_{n1} \ \cdots \ c_{nj} \ \cdots \ c_{nm} \\ \end{bmatrix} \\ \end{array}$$

$$c_{ij} = a_{i1} \cdot b_{1j} + a_{i2} \cdot b_{2j} + \dots + a_{ik} \cdot b_{kj}$$

$$c_{ij} = \sum_{l=1}^{k} a_{il} b_{lj}$$

Столбцовый подход

$$\begin{bmatrix} a_{11} \ a_{12} \ \cdots \ a_{1k} \\ \vdots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ a_{i1} \ a_{i2} \ \cdots \ a_{ik} \\ \vdots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ a_{n1} \ a_{n2} \ \cdots \ a_{nk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} \ b_{12} \ b_{13} \ \cdots \ b_{1m} \\ b_{21} \ b_{22} \ b_{23} \ \cdots \ b_{2m} \\ \vdots \ \vdots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ b_{k1} \ b_{k2} \ b_{k3} \ \cdots \ b_{km} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} \ c_{12} \ c_{13} \ \cdots \ c_{1m} \\ \vdots \ \vdots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ c_{i1} \ c_{i2} \ c_{i3} \ \cdots \ c_{im} \\ \vdots \ \vdots \ \vdots \ \ddots \ \vdots \\ c_{n1} \ c_{n2} \ c_{n3} \ \cdots \ c_{nm} \end{bmatrix}$$

Каждый столбец
$$C=A imes$$
 соответствующий столбец B

$$C_j = AB_j, \quad j = 1, 2, \dots, m$$

Свойства матричного умножения

1. Ассоциативность:

$$(AB)C=A(BC)$$

Свойства матричного умножения

1. Ассоциативность:

$$(AB)C = A(BC)$$

2. Дистрибутивность:

$$A(B+C) = AB + AC$$
$$(A+B)C = AC + BC$$

Свойства матричного умножения

1. Ассоциативность:

$$(AB)C = A(BC)$$

2. Дистрибутивность:

$$A(B+C) = AB + AC$$

$$(A+B)C = AC + BC$$

3. Умножение на скаляр:

$$\alpha(AB) = (\alpha A)B = A(\alpha B)$$

Умножение матрицы на матрицу (matmul, GEMM)

Важные ограничения

4. Некоммутативность:

$$AB \neq BA$$
 (в общем случае)

Пример: Для матриц 2×2 :

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

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

Умножение матрицы на матрицу (matmul, GEMM)

Важные ограничения

4. Некоммутативность:

$$AB \neq BA$$
 (в общем случае)

Пример: Для матриц 2×2 :

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

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

5. Транспонирование произведения:

$$(AB)^T = B^T A^T$$

і Уведомление

Обратите внимание на обратный порядок матриц при транспонировании!

Вычислительная сложность и параллелизация

Вспомним общую формулу:

$$c_{ij} = \sum_{l=1}^{k} a_{il} b_{lj}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m$$

Анализ операций для матриц $A_{n \times k}$ и $B_{k \times m}$:

- ullet Для вычисления одного элемента c_{ij} : k умножений, k-1 сложений
- ullet Общее количество операций: n imes m imes (2k-1)

- Для квадратных матриц $n \times n$: $\mathcal{O}(2n^3-n^2) = \mathcal{O}(n^3)$
- Для прямоугольных матриц: $\mathcal{O}(nmk)$
- 🥊 Естественный параллелизм
 - По элементам: каждый c_{ij} вычисляется независимо

Вычислительная сложность и параллелизация

Вспомним общую формулу:

$$c_{ij} = \sum_{l=1}^{k} a_{il} b_{lj}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m$$

Анализ операций для матриц $A_{n \times k}$ и $B_{k \times m}$:

- ullet Для вычисления одного элемента c_{ij} : k умножений, k-1 сложений
- ullet Общее количество операций: n imes m imes (2k-1)

- Для квадратных матриц $n \times n$: $\mathcal{O}(2n^3-n^2) = \mathcal{O}(n^3)$
- Для прямоугольных матриц: $\mathcal{O}(nmk)$
- 🥊 Естественный параллелизм
 - По элементам: каждый c_{ij} вычисляется независимо
 - ullet По строкам: каждый процессор обрабатывает свои строки матрицы A

Вычислительная сложность и параллелизация

Вспомним общую формулу:

$$c_{ij} = \sum_{l=1}^{k} a_{il} b_{lj}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m$$

Анализ операций для матриц $A_{n \times k}$ и $B_{k \times m}$:

- ullet Для вычисления одного элемента c_{ij} : k умножений, k-1 сложений
- ullet Общее количество операций: n imes m imes (2k-1)

- Для квадратных матриц $n \times n$: $\mathcal{O}(2n^3-n^2) = \mathcal{O}(n^3)$
- Для прямоугольных матриц: $\mathcal{O}(nmk)$
- Естественный параллелизм
 - По элементам: каждый c_{ij} вычисляется независимо
 - ullet По строкам: каждый процессор обрабатывает свои строки матрицы A
 - ullet По столбцам: каждый процессор обрабатывает свои столбцы матрицы B

Вычислительная сложность и параллелизация

Вспомним общую формулу:

$$c_{ij} = \sum_{l=1}^{k} a_{il} b_{lj}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m$$

Анализ операций для матриц $A_{n \times k}$ и $B_{k \times m}$:

- Для вычисления одного элемента c_{ii} : k умножений, k-1 сложений
- ullet Общее количество операций: n imes m imes (2k-1)

- Для квадратных матриц $n \times n$: $\mathcal{O}(2n^3-n^2) = \mathcal{O}(n^3)$
- Для прямоугольных матриц: $\mathcal{O}(nmk)$
- Естественный параллелизм
 - По элементам: каждый c_{ij} вычисляется независимо
 - По строкам: каждый процессор обрабатывает свои строки матрицы A
 - По столбцам: каждый процессор обрабатывает свои столбцы матрицы B
 - Блочный подход: разделение матриц на блоки для эффективного использования кэша

Пример. Простая, но важная идея о матричных вычислениях.

Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где $A_1,A_2,A_3\in\mathbb{R}^{3 imes 3}$ - случайные квадратные плотные (полностью заполненные числами) матрицы, и $x\in\mathbb{R}^3$ - вектор. Вам нужно вычислить b.

Какой способ лучше всего использовать?

- 1. $A_1 A_2 A_3 x$ (слева направо)
- 2. $(A_1(A_2(A_3x)))$ (справа налево)
- 3. Не имеет значения
- 4. Результаты первых двух вариантов не будут одинаковыми.

Посмотрите прикрепленный .ipynb файл в репозитории.