

Линейная алгебра

Матрицы и векторы. Первичное знакомство, основные операции.

Глеб Карпов

МНаД ФКН ВШЭ

Матрица

- 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

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

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

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

Матрица

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

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

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

Основные операции: транспонирование

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 $b_{ij} = a_{ji}$

$$\begin{array}{c} \left[\begin{array}{ccc} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{array} \right] \xrightarrow{A^T} \left[\begin{array}{cc} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} \end{array} \right] \\ A_{2 \times 3} \qquad \qquad \qquad B_{3 \times 2} = A^T \end{array}$$

Основные операции: сложение матриц

- **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

- **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:

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

Вектор

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

$$\mathbf{y}^T = [y_1 \quad y_2 \quad \cdots \quad y_m] \in \mathbb{R}^{1 \times m}$$

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

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

Обозначения

- **Векторы:** обычно обозначаются строчными буквами x, v или \mathbf{u}

Вектор

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

$$\mathbf{y}^T = [y_1 \quad y_2 \quad \cdots \quad y_m] \in \mathbb{R}^{1 \times m}$$

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

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

Обозначения

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

Вектор

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

$$\mathbf{y}^T = [y_1 \quad y_2 \quad \cdots \quad y_m] \in \mathbb{R}^{1 \times m}$$

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

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

Обозначения

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

Вектор

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

$$\mathbf{y}^T = [y_1 \quad y_2 \quad \cdots \quad y_m] \in \mathbb{R}^{1 \times m}$$

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

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

Обозначения

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

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Обычный подход

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

A \mathbf{x} \mathbf{y}

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

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

Умножение матрицы на вектор (matvec)

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 y (n элементов): $n \cdot (2m - 1)$ операций всего.

Временная сложность:

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

 Естественный параллелизм

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

- **Построчная параллелизация:** отдельный процессор может вычислять свой y_j

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Просветленный подход :)

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

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Просветленный подход :)

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

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

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Просветленный подход :)

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

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

$$y_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4$$

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Просветленный подход :)

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

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

$$y_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4$$

$$y_3 = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4$$

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Просветленный подход :)

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

$$\mathbf{y} = x_1 \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \end{bmatrix} + x_3 \begin{bmatrix} a_{13} \\ a_{23} \\ a_{33} \end{bmatrix} + x_4 \begin{bmatrix} a_{14} \\ a_{24} \\ a_{34} \end{bmatrix}$$

Произведение матрицы на вектор

Визуальное сравнение

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

A x y

Строка на столбец

Вычисления:

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

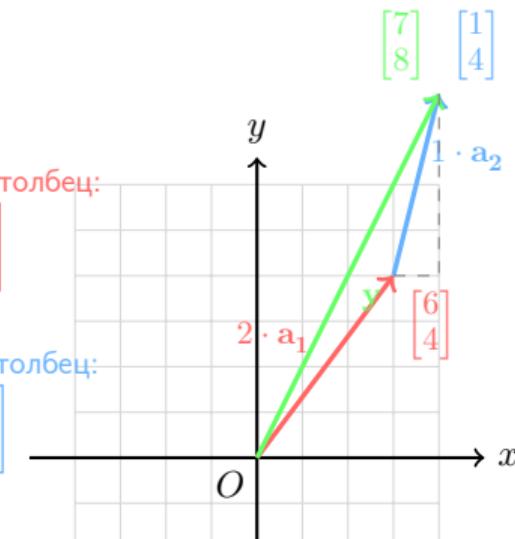
Комбинация столбцов

Первый столбец:

$$a_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Второй столбец:

$$a_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 4 \end{bmatrix}$$



Умножение матриц (matmul, GEneral Matrix Multiplication - GEMM)

Обычный подход

j-й столбец

$$\begin{array}{c} i\text{-я строка} \rightarrow \\ \left[\begin{array}{cccc} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ik} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nk} \end{array} \right] \end{array} \begin{array}{c} \\ \\ \\ B \\ \end{array} = \begin{array}{c} \left[\begin{array}{cccc} b_{11} & \cdots & b_{1j} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & \cdots & b_{2j} & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{k1} & \cdots & b_{kj} & \cdots & b_{km} \end{array} \right] \\ \\ \\ C \\ \end{array}$$

A

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

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

Умножение матриц (matmul, GEneral Matrix Multiplication - GEMM)

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 $C = A \times$ соответствующий столбец B

$$\mathbf{C}_j = A\mathbf{B}_j, \quad j = 1, 2, \dots, m$$

Умножение матриц (matmul, GEneral Matrix Multiplication - GEMM)

Свойства матричного умножения

1. Ассоциативность:

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

Умножение матриц (matmul, GEneral Matrix Multiplication - GEMM)

Свойства матричного умножения

1. Ассоциативность:

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

2. Дистрибутивность:

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

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

Умножение матриц (matmul, GEneral Matrix Multiplication - GEMM)

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:

$$AB \neq BA \quad (\text{в общем случае})$$

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:

$$AB \neq BA \quad (\text{в общем случае})$$

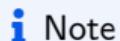
Пример: Для матриц 2×2 :

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

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

5. Транспонирование произведения:

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



Note

Обратите внимание на **обратный порядок** матриц при транспонировании!

Умножение матриц (matmul, GEneral Matrix Multiplication - GEMM)

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_{ij} : k умножений, $k - 1$ сложений
- Общее количество операций: $n \times m \times (2k - 1)$

Временная сложность:

- 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

Умножение матриц (matmul, GEneral Matrix Multiplication - GEMM)

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_{ij} : k умножений, $k - 1$ сложений
- Общее количество операций: $n \times m \times (2k - 1)$

Временная сложность:

- 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

Умножение матриц (matmul, GEneral Matrix Multiplication - GEMM)

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_{ij} : k умножений, $k - 1$ сложений
- Общее количество операций: $n \times m \times (2k - 1)$

Временная сложность:

- 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

Умножение матриц (matmul, GEneral Matrix Multiplication - GEMM)

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_{ij} : k умножений, $k - 1$ сложений
- Общее количество операций: $n \times m \times (2k - 1)$

Временная сложность:

- 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 $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$ - 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. $(A_1 (A_2 (A_3 x)))$ (справа налево)
3. Не имеет значения
4. Результаты первых двух вариантов не будут одинаковыми.

Посмотрите прикрепленный .ipynb файл в репозитории.