Линейная алгебра

Матрицы и векторы. Первичное знакомство, основные операции.

Глеб Карпов

МНаД ФКН ВШЭ

Матрица

- **Definition**

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

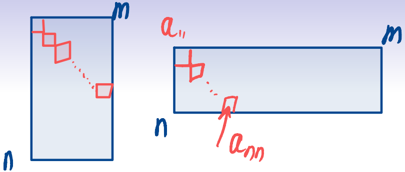
  $$A_{n\times m} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix}$$

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

$B \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ $\quad B = \begin{pmatrix} 2\cdot 10^7 & \pi \cdot 4 \\ -\ln 40 & e^7 \end{pmatrix}$ $\quad T \in \mathbb{C}^{2\times 2}$

$$T = \begin{pmatrix} 2+2i & 4+0i \\ -2i & 1-i \end{pmatrix}$$

Матрица



- > **Definition**
  >
  > Матрица — упорядоченный массив чисел в виде n строк и m столбцов.
  >
  > $$A_{n\times m} = \begin{bmatrix} \boxed{a_{11}} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & \boxed{a_{22}} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nm} \end{bmatrix}$$
  >
  > $\{a_{ii}\}$ – Главная диагональ

- 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

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 $\boxed{b_{ij} = a_{ji}}$

$$\underset{A_{2\times3}}{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}} \xrightarrow{A^T} \underset{B_{3\times2} = A^T}{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} \end{bmatrix}}$$

b_{12}

Основные операции: сложение матриц

- **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

- 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 $c_{ij} = \alpha \cdot a_{ij}$ $C \in \mathbb{R}^{n \times m}$

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

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

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

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)

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:** $\mathbf{x}^\top$ превращает столбец в строку

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Обычный подход

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

$$A \qquad \mathbf{x} \qquad \mathbf{y}$$

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

$$\boxed{y_j = \sum_{k=1}^{m} a_{jk}x_k} \qquad j = \overline{1, n}$$

$A \in \mathbb{R}^{n \times m}$

$x \in \mathbb{R}^m$

$Ax = y, \ y \in \mathbb{R}^n$

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Вычислительная сложность и немного о параллельных вычислениях

Вспомним общую формулу:

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

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 $\mathbf{y}$ (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 :)

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

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Просветленный подход :)

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

A $\qquad$ $\mathbf{x}$ $\qquad$ $\mathbf{y}$

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

Умножение матрицы на вектор (matvec)

Просветленный подход :)

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

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

Произведение матрицы на вектор

Визуальное сравнение

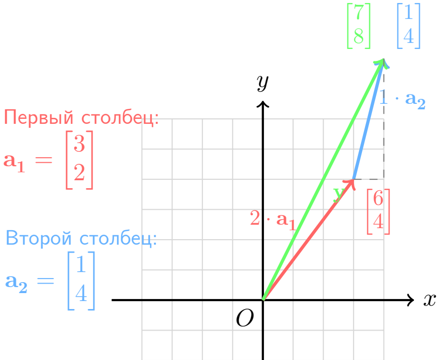
$$\underbrace{\begin{bmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 4 \end{bmatrix}}_{A} \underbrace{\begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{x}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 7 \\ 8 \end{bmatrix}}_{\mathbf{y}}$$

Строка на столбец

Вычисления:

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

Комбинация столбцов



Умножение матрицы на матрицу (matmul, GEMM)

Обычный подход

$$
\begin{array}{cc}
\textit{i}\text{-я строка} \rightarrow &
\begin{bmatrix}
a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ik} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nk}
\end{bmatrix}
\end{array}
\begin{array}{c}
\phantom{b_{11}} \quad \quad \textit{j}\text{-й столбец} \\
\begin{bmatrix}
b_{11} & \cdots & b_{1j} & \cdots & b_{1m} \\
b_{21} & \cdots & b_{2j} & \cdots & b_{2m} \\
\vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\
b_{k1} & \cdots & b_{kj} & \cdots & b_{km}
\end{bmatrix}
\end{array}
=
\begin{bmatrix}
c_{11} & \cdots & c_{1j} & \cdots & c_{1m} \\
\vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\
c_{i1} & \cdots & c_{ij} & \cdots & c_{im} \\
\vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\
c_{n1} & \cdots & c_{nj} & \cdots & c_{nm}
\end{bmatrix}
$$

A $\qquad$ B $\qquad$ C

$A \in \mathbb{R}^{n \times k}$

$B \in \mathbb{R}^{k \times m}$

$C = A \cdot B, \quad C \in \mathbb{R}^{n \times m}$

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

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

Умножение матрицы на матрицу (matmul, GEMM)

Столбцовый подход

$$
\underset{A}{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{ik} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nk} \end{bmatrix}}
\underset{B}{\begin{array}{c} \begin{matrix} \phantom{b_{11}} & \phantom{b_{12}} & B_3 & & \phantom{b_{1m}} \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & \cdots & b_{1m} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & \cdots & b_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{k1} & b_{k2} & b_{k3} & \cdots & b_{km} \end{bmatrix} \end{array}}
=
\underset{C}{\begin{array}{c} \begin{matrix} \phantom{c_{11}} & \phantom{c_{12}} & C_3 & & \phantom{c_{1m}} \end{matrix} \\ \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & \cdots & c_{1m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{i1} & c_{i2} & c_{i3} & \cdots & c_{im} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & c_{n3} & \cdots & c_{nm} \end{bmatrix} \end{array}}
$$

Каждый столбец $C = A\times$ соответствующий столбец B

$$\boxed{\mathbf{C_j} = A\mathbf{B_j}, \quad j = 1, 2, \ldots, m}$$

Умножение матрицы на матрицу (matmul, 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:**
$$\alpha(AB) = (\alpha A)B = A(\alpha B)$$

$(ABC)^T = C^T B^T A^T$

Умножение матрицы на матрицу (matmul, GEMM)

Важные ограничения

$\underset{n\times k}{A} \quad \underset{k\times m}{B} \quad n \neq m$

$\underset{k\times m}{B}\,\underset{n\times k}{A} \rightarrow \times$

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:**

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

$$\underset{1\times n}{(Ax)^T} = \underset{1\times m}{x^T}\,\underset{m\times n}{A^T} = \underset{1\times n}{y^T}$$

Уведомление

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

$$(\underset{n\times k}{A} \cdot \underset{k\times m}{B})^T = \underset{m\times n}{(C^T)} = \underset{m\times k}{B^T} \cdot \underset{k\times n}{A^T} = \underset{m\times n}{(C^T)}$$

Умножение матрицы на матрицу (matmul, GEMM)

Вычислительная сложность и параллелизация

Вспомним общую формулу:

$$\boxed{c_{ij} = \sum_{k=1}^{p} a_{ik} b_{kj}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, m}$$

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

- Для вычисления одного элемента c_{ij}: p умножений, $p - 1$ сложений
- Общее количество операций: $n \times m \times (2p - 1)$

Временная сложность:

- Для квадратных матриц $n \times n$: $\mathcal{O}(2n^3 - n^2) = \mathcal{O}(n^3)$
- Для прямоугольных матриц: $\mathcal{O}(nmp)$

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.

$A_1 \cdot A_2 = W \quad 3^3 = 27$ mult

$\underset{3\times3}{W} \cdot \underset{3\times3}{A_3} = Y \quad 3^3 = 27$ mults

$Y \cdot x \quad 3^2$ mults

total: 63 mults

Предположим, у вас есть следующее выражение

$$b = A_1 A_2 A_3 x,$$

где $A_1, A_2, A_3 \in \mathbb{R}^{3\times3}$ - случайные квадратные плотные 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.

$A_3 \cdot x = K \quad 3^2$

$A_2 \cdot K = T \quad 3^2$

$A_1 \cdot T \quad 3^2$

total: 27 mults