下载APP

15 | 如何从计算机的角度来理解线性代数?

2020-09-02 朱维刚

重学线性代数

进入课程 >

讲述：朱维刚
时长 10:37 大小 9.73M

你好，我是朱维刚。欢迎你继续跟我学习线性代数，今天我要讲的内容是“如何从计算机的角度来理解线性代数”。

基础和应用篇整体走了一圈后，最终我们还是要回归到一个话题——从计算机的角度来理解线性代数。或者更确切地说，如何让计算机在保证计算精度和内存可控的情况下，快速处理矩阵运算。在数据科学中，大部分内容都和矩阵运算有关，因为几乎所有的数据类型都能被表达成矩阵，比如：结构化数据、时序数据、在 Excel 里表达的数据、SQL 数据库、图像、信号、语言等等。

线性代数一旦和计算机结合起来，需要考虑的事情就多了。你还记得开篇词中我讲到的四个层次的最后一层——“能够踏入大规模矩阵计算的世界”吗？当我们面对大规模矩阵的

时候，计算机的硬件指标就需要考虑在内了，这也是硬性的限制条件。在碰到大规模矩阵的时候，这些限制条件会被放大，所以精度、内存、速度和扩展这四点是需要你思考的。

1. 精度：计算机的数字计算是有有限精度的，这个想必你能理解，当遇到迭代计算的情况下，四舍五入会放大很小的误差；
2. 内存：一些特殊结构的矩阵，比如包含很多 0 元素的矩阵，可以考虑优化内存存储方式；
3. 速度：不同的算法、并行执行、以及内存数据移动的耗时，这些都和速度有关；
4. 扩展：当单机内存不够时，你在考虑横向扩展的同时，还要考虑如何分片，也就是如何分布矩阵运算的算力。

接下来，我就从这几点深入讲解一下。

精度

首先是精度，我们先从计算机如何存储数字的角度入手，来做一个练习。你可以执行一下这个 Python 代码，想想会发生什么情况呢？


```
def f(x):
    if x <= 1/2:
        return 2 * x
    if x > 1/2:
        return 2*x - 1

x = 1/10

for i in range(80):
    print(x)
    x = f(x)
```

这个结果可能会和你想象的有很大的不同。

其实数学和计算机之间存在很大的不同，数学是连续的、无穷的，而计算机是离散的、有限的。就像这个练习，计算机存储的数字精度是有限的，而很小的误差通过很多次的迭代会累加，最终放大成比较大的错误。一个惨痛的例子就是 1996 年欧洲航天局的 Ariane 5

号火箭的发射失败，最后发现问题出在操作数误差上，也就是 64 位数字适配 16 位空间发生的整数溢出错误。

那我们该怎么来理解**数学是连续的，而计算机是离散的**呢？举个简单的例子，我们来看下数学中的区间表达[1,2]，这个形式就是连续的；但如果在计算机中以双精度来表达同样的东西，则会是这样的离散形式：

$$1, 1+2^{-52}, 1+2\times 2^{-52}, 1+3\times 2^{-52}, \ldots, 2$$

于是，我们就引出了一个计算机领域精度计算的概念——机械最小值（EPSILON），对于双精度来说，IEEE 标准指定机械最小值是：$\varepsilon = 2^{-53}$。

内存

刚才我们看的是数字精度，现在我们接着来看看矩阵的存储方式。我们都知道，内存是有限的，所以，当你面对大矩阵时，千万不要想着把矩阵所有的元素都存储起来。解决这个问题的一个最好方式就是只存储非零元素，这种方式就叫做稀疏存储。稀疏存储和稀疏矩阵是完美匹配的，因为稀疏矩阵大部分的元素都是零。

我们来看一个机器学习中比较简单的稀疏矩阵的例子：Word Embedding 中的 One-Hot 编码。One-Hot 编码就是给句子中的每个字分别用一个 0 或 1 编码，一个句子中有多少个字，就有多少维度。这样构造出来的矩阵是很大的，而且是稀疏矩阵。比如：“重学线性代数”这六个字，通过 One-Hot 编码，就能表达成下面这样的形式。

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

所以，一般稀疏矩阵的大致形态如下图所示。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

也有特殊类型的结构化矩阵，比如：对角线矩阵、三对角矩阵、海森堡矩阵等等，它们都有自己的特殊稀疏表达，也都通常被用来减少内存存储和计算量。可以说，数值线性代数在运算方面更多地聚焦在稀疏性上。

速度

接下来我们再来看速度。速度涉及到很多方面，比如计算复杂度、单指令多数据矢量运算、存储类型和网络等。

计算复杂度

算法通常由计算复杂度表达，同一问题可用不同算法解决，而一个算法的质量优劣将影响到算法乃至程序的效率。算法分析的目的在于选择合适的算法或者优化算法。

那么我们该如何评价一个算法呢？主要就是从时间复杂度和空间复杂度来综合考虑的。从矩阵计算的角度看，计算复杂度的考虑是很有必要的。简单的计算，我们可以用直接法来计算，而有的比较复杂的计算就要用间接迭代法了。特别是在很多场景中会用到的大型稀疏矩阵，这些计算复杂度都是不同的。我在第 4 篇 “解线性方程组” 中提到了迭代法，你可以回顾一下，同时你也可以参考上一节课的迭代法应用细节。

单指令多数据矢量运算

现代 CPU 和 GPU 都支持在同一时间以同步方式执行同一条指令。

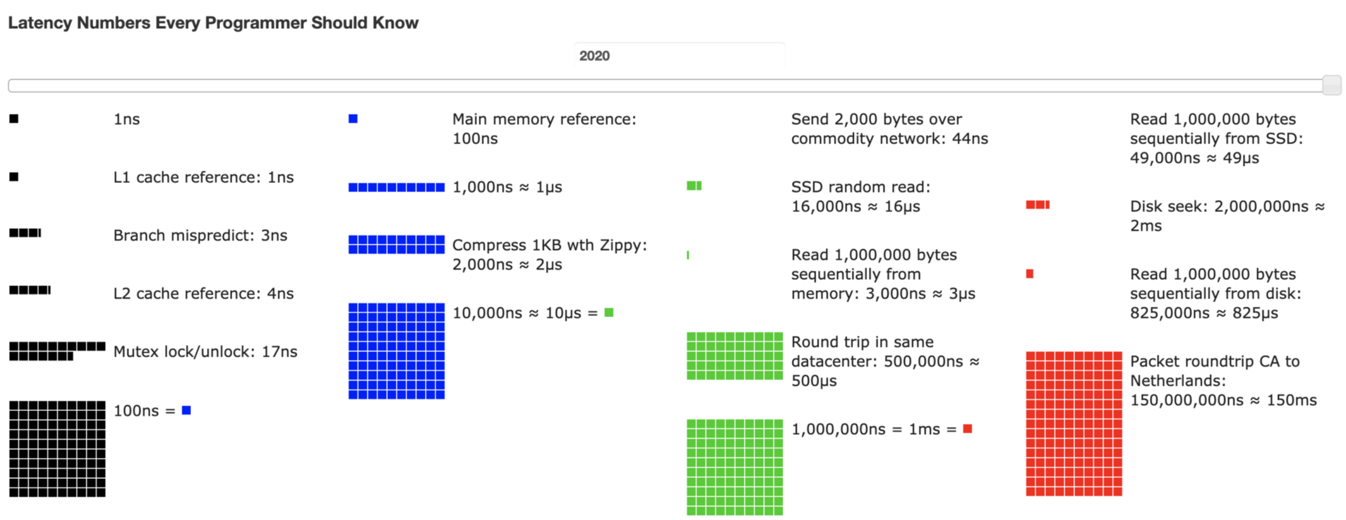
举个例子来说，一个向量中的 4 个浮点数的指数幂运算可以同时执行，从而极大地提高运算效率，这类单指令多数据矢量运算处理就叫做 SIMD（Single Instruction Multiple Data）。这在矩阵运算中非常重要，虽然我们不用太关心底层的实现，但如果你可以了解

一些矩阵运算的包和库，那么你就可以在实际的开发中直接使用它们了，其中比较出名的就是 python 的 NumPy，以及 BLAS（Basic Linear Algebra Subprograms）和 LAPACK。

> LAPACK 是用 Fortran 写的，这里也纪念一下 Fortran 创始人约翰·巴库斯 (John W. Backus)，不久前在美国俄勒冈州的家中去世，享年 82 岁。

存储类型和网络

计算机存储类型有很多，比如：缓存、内存、机械盘、SSD，这些不同存储媒介的存储延迟都是不一样的；在网络方面，不同 IDC、地区、地域的传输速率也是不同的。



上图中的这些数据是所有程序员必须要知道的，因为毕竟各类计算机资源是有限的，在做解决方案时，必须综合考虑存储和网络的性能和成本来做组合，最终达到最大的产出投入比。这些数据来自GitHub，可以调整年限值来观察每年的动态变换。

扩展

最后我再来讲一下扩展，扩展分为单机多核、多处理器的垂直方向扩展，以及多节点平行方向扩展。

当我们想要利用多处理器能力来处理大型矩阵运算的时候，传统的方法就是把大矩阵分解成小矩阵块。比如：一台拥有 4 个处理器的服务器，现在有这样的两个 6×6 矩阵 A 和 B 要做乘运算。

A11 A12

$$
\left[\begin{array}{ccc|ccc}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\
a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\
a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\
\hline
a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \\
a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} & a_{56} \\
a_{61} & a_{62} & a_{63} & a_{64} & a_{65} & a_{66}
\end{array}\right]
$$

A21 A22

B11 B12

$$
\left[\begin{array}{ccc|ccc}
b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} & b_{15} & b_{16} \\
b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} & b_{25} & b_{26} \\
b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} & b_{35} & b_{36} \\
\hline
b_{41} & b_{42} & b_{43} & b_{44} & b_{45} & b_{46} \\
b_{51} & b_{52} & b_{53} & b_{54} & b_{55} & b_{56} \\
b_{61} & b_{62} & b_{63} & b_{64} & b_{65} & b_{66}
\end{array}\right]
$$

B21 B22

我们可以把这两个矩阵分别分成四块，每块都是 3×3 矩阵，例如：$A11$、$A12$、$A21$ 和 $A22$、$B11$、$B12$、$B21$ 和 $B22$，A 和 B 的乘运算就是把各自分好的块分配到各处理器上做并行处理，处理后的结果再做合并。

比如：处理器 P1 处理 $A11$ 和 $B11$，处理器 P2 处理 $A12$ 和 $B12$，处理器 P3 处理 $A21$ 和 $B21$，处理器 P4 处理 $A22$ 和 $B22$。于是，4 个处理器分别处理 A 和 B 的乘计算来获取结果：$C11$、$C12$、$C21$ 和 $C22$。拿 $C11$ 来看，$C11 = A11 \times B11 + A12 \times B21$，虽然 $B21$ 不在 P2 中，但可以从 P3 传递过来再计算。

当计算机垂直扩展到极限后，就需要考虑扩展到多节点计算了，其实原理也是一样的，不一样的是需要从应用层面来设计调度器，来调度不同的计算机节点来做计算。

本节小结

线性代数运用在计算机科学中就是数值线性代数，它是一门特殊的学科，是特别为计算机上进行线性代数计算服务的，可以说它是研究矩阵运算算法的学科。这里，你需要掌握很重要的一个点就是：数学和计算机之间存在很大的不同，数学是连续的、无穷的，而计算机是离散的、有限的。

所以，从计算机角度来执行矩阵运算，需要考虑很多方面：精度、内存、速度和扩展，这样，你在做解决方案时，又或者在写程序时，才能在计算机资源有限的情况下做到方案或程序的最优化，也可以避免类似 1996 年欧洲航天局的 Ariane 5 号火箭发射失败的这类错误。

线性代数练习场

我想让最后一篇的练习成为一个知识点的补充。

针对矩阵高性能并行计算，我前面在“扩展”一模块讲的是一般传统方法，也就是把大矩阵分解成小矩阵块，利用多处理器能力来处理大型矩阵运算。现在，请你研究一下如何用 Cannon 算法解决这个问题？

Cannon 算法是一种存储效率很高的算法，也是对传统算法的改进，目标就是减少分块矩阵乘法的存储量。而且你也可以把它看成是 MPI 编程的一个例子。

欢迎在留言区分享你的研究成果，大家一起探讨。同时，也欢迎你把这篇文章分享给你的朋友，一起讨论、学习。

提建议

上一篇 14 | 如何在深度学习中运用数值代数的迭代法做训练？

下一篇 强化通关 | 线性代数水平测试20题

精选留言

写留言

由作者筛选后的优质留言将会公开显示，欢迎踊跃留言。