

随机数值线性代数：原理及应用

张鹤龄 电子工程系 2024310593

摘要—线性代数作为一种常用的数据处理手段，被广泛应用于各个领域。近年来，随着各领域对数据处理需求的飞速上升，传统的分析方法已不再适用于越来越大的数据规模。相对地，随机数值线性代数 (RandNLA) 作为一种数据降维手段正日益被人们关注。通过对数据进行随机采样、嵌入低维子空间等手段降低待处理的数据规模，RandNLA 只牺牲少量精度便可明显降低数据处理的复杂度。在本文中，我们将简要介绍 RandNLA 实现数据降维的基本原理，随后以最小二乘、低秩逼近、矩阵相乘为例，展示其在解决实际问题中的应用。

关键词—随机数值线性代数，数据分析，矩阵分析，最小二乘，低秩逼近，深度学习

I. 引言

关于矩阵分析的讨论始终围绕着几个重要问题进行。在数据拟合领域，最小二乘是求解线性模型系数的重要手段；低秩逼近和对应的特征值/奇异值分析广泛应用于模式识别等领域；矩阵乘法则广泛存在于各个领域的科学计算中。然而，随着近年来数据规模的不断扩大，在这些重要问题上，传统的数据分析方法正在逐渐遇到困难。为与本文着重讨论的随机方法相区分，我们称一切常用的除随机方法外的矩阵分析方法为“确定性方法”。

A. 最小二乘

最小二乘问题的一般描述为求解

$$\mathbf{x}^* = \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 \quad (1)$$

其中 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 为按行排列的数据矩阵，每行代表一条数据，不同列代表不同的数据分量， \mathbf{b} 为回归目标， \mathbf{x} 是线性模型的系数。由于数据量通常较大，这里假设 $m \gg n$ 。

最小二乘问题的解由著名的 Moore-Penrose 逆给出：

$$\mathbf{x}^* = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{b} \quad (2)$$

其中 \mathbf{A}^\dagger 为矩阵 \mathbf{A} 的 Moore-Penrose 逆，而 \mathbf{x}^* 是满足均方误差 $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2$ 最小的线性空间中模最小的解。虽

然这个结果足够令人满意，但求解 Moore-Penrose 逆的时间复杂度为 $\mathcal{O}(mn^2)$ ，随问题规模 m 线性增长，随数据维度 n 平方增长 [1]。当数据规模增大时，求解 Moore-Penrose 逆也将变得非常困难。在部分应用场景中， \mathbf{x} 的精度并没有很高的要求，这就需要一种牺牲部分精度以换取较低复杂度的方法。

B. 低秩逼近

为降低矩阵规模，减小计算和存储开销，人们倾向于用具有较为简单结构的矩阵进行组合，从而近似数据矩阵。低秩逼近是其中一个重要的近似方法。其描述如下：

给定数据矩阵 \mathbf{A} ，寻找 $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T\mathbf{A}$ 使

$$\epsilon = \|\mathbf{A} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T\mathbf{A}\| \quad (3)$$

尽量小，其中 $\|\cdot\|$ 为某种度量（依问题选定，通常为谱范数或 Frobenius 范数）。 \mathbf{Q} 为逼近矩阵 $\tilde{\mathbf{A}}$ 列空间的一组基。显然， \mathbf{Q} 的选取应考虑如下两个核心问题：

- 1) 如何确定基向量的规模 k ?
- 2) 如何选取基向量?

在随机方法中，首先对随机矩阵进行采样，随后基于采样后的矩阵寻找合适的基向量。由于采样得到的矩阵规模较小，对其可以采用传统方法，以低得多的复杂度寻找基向量。根据基向量选取方式的不同，发展出 SVD、ID 等多种低秩逼近方法，这些方法已经被广泛应用于数据处理和深度学习等多个领域 [2]。本文的第三节将对这些方法分别进行简要介绍。

C. 矩阵相乘

给定矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 和 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ ，计算矩阵乘积 \mathbf{AB} 的复杂度为 $\mathcal{O}(mnp)$ 。使用计算机计算矩阵乘法需要从存储器加载被计算矩阵到 RAM，之后完成二者的相乘。当 m 、 n 和 p 均很大时，由于计算和存储资源的限制，直接计算矩阵乘积很可能是不可行的。然而，考虑到 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 可能具有的低秩特性，我们可以分别从 \mathbf{A}

和 \mathbf{B} 中抽样出部分行和部分列代替 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 本身估计矩阵乘积的结果，从而降低计算的复杂度。利用蒙特卡洛方法，进行多次独立的估计后取均值，将进一步降低误差。[3]

对上述问题的分析给出一个共同的结论：为更有效率地进行数据分析，对原数据进行降维是不可避免的。作为对数据降维的有效手段，RandNLA 主要关注以下几个问题：

- 1) 如何对数据进行随机采样，使得采样的结果保持原数据的性质？
- 2) 如何将这些采样应用于具体问题？基于采样结果的解在多大程度上接近原问题的解？
- 3) 给定解的精度要求，随机方法下的计算复杂度将如何变化？哪些方法可以进一步降低复杂度？

作为一篇旨在介绍 RandNLA 的文献综述，本文将依次对这些问题做出解答。内容安排如下：第二节概述 RandNLA（随机数值线性代数）实现数据降维的核心原理；第三、四、五通过最小二乘、低秩逼近、矩阵相乘等具体问题展示其实际应用。第六节则对全文内容做一总结。

II. 数据降维

我们希望对数据矩阵 \mathbf{A} 中的数据进行随机抽取或线性组合：

$$\mathbf{Y} = \mathbf{S}\mathbf{A} \quad (4)$$

其中 \mathbf{Y} 为采样得到的矩阵，左乘 $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{k \times m}$ 对数据进行采样和（或）组合。我们不规定 \mathbf{S} 的具体形式，但其应具有以下两个特征：

- 1) \mathbf{S} 从某个分布 Π 中随机地产生；
- 2) \mathbf{S} 的行数 $k \ll m$ 。

作为采样矩阵， \mathbf{S} 不应破坏原数据矩阵的性质。最本地，经过 \mathbf{S} 的作用， \mathbf{A} 包含的不同数据分量不应被扩张或压缩得太严重，以至于影响后续问题的求解精度。由此有以下定义 [4], [5]:

定义 1 (子空间嵌入精度). 若对 \mathbf{A} 和任意 \mathbf{x} ，矩阵 \mathbf{S} 满足

$$(1 - \epsilon)\|\mathbf{Ax}\|_2 \leq \|\mathbf{SAx}\|_2 \leq (1 + \epsilon)\|\mathbf{Ax}\|_2 \quad (5)$$

则称 \mathbf{S} 为 \mathbf{A} 的一个精度为 ϵ 的 l_2 子空间嵌入。如果我们要求得更严格，还可以定义 Johnson-Lindenstrauss 嵌入。[5] 由于二者类似，这里不再赘述。

如何获得具有这样性质的矩阵 \mathbf{S} ？幸运的是，对这个问题不需要做太多的努力，通过从独立高斯分布中采样便可获得；通过增大采样后的数据规模 k ，可以提高在一定精度 ϵ 下 \mathbf{S} 满足精度要求的成功概率，或是固定成功概率而提高精度。以下给出相关的结论：[5]

定理 1. 若 $\mathbf{S} = \frac{1}{k}\mathbf{R}$ ， \mathbf{R} 的每个元素均为独立且服从标准高斯分布的随机变量， $k = C(n + \log(1/\delta))\epsilon^{-2}$ ，则对任意 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ， \mathbf{S} 为 \mathbf{A} 的一个精度为 ϵ 的 l_2 子空间嵌入之概率不低于 $1 - \delta$ 。这里 C 为正常数。

对于 J-L 嵌入也有类似的结论。注意到采样规模 k 对数依赖于失败概率 δ 而与精度 ϵ 成平方反比关系，这意味着通过增大采样规模提高成功概率相对简单，但提高精度是非常困难的。在精度要求不高的场合，单次随机采样足以给出可靠的数据近似 \mathbf{Y} 用于下游任务；若需进一步提升精度则需迭代处理（详见第七节）。

尽管从高斯分布中采样较为直接，但采样本身的复杂度较高，同时由于采样的结果是浮点数，计算矩阵相乘也相对复杂。因此，常用其他方法产生采样矩阵 \mathbf{S} 来达到相似的效果。

A. 稀疏符号采样

用元素为 1 或 0 的符号矩阵代替高斯矩阵是一种常用的实现方法，实践证明其效果与高斯采样相近。[4], [6] 在采样矩阵的每一列中，随机选取 d 个元素为 1，其余元素为 0。而后进行归一化：

$$\mathbf{S} = \sqrt{\frac{1}{d}}[\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_m] \quad (6)$$

在 \mathbf{A} 列满秩的情况下，选取采样规模 $k = \mathcal{O}(n \log n)$ 和稀疏度 $d = \mathcal{O}(\log n)$ 可以保证精度。

特别地，计算 \mathbf{SA} 的复杂度仅为 $\mathcal{O}(mnd)$ 而非通常矩阵相乘的 $\mathcal{O}(mnk)$ 。通常 d 的值甚至小于 $\log(n)$ ，因此不仅相对于高斯采样，稀疏符号采样相对于其他快速采样方法仍然具有速度优势。[6]

相比左乘采样矩阵 \mathbf{S} ，直接选取数据矩阵 \mathbf{A} 中的某些元素进行采样更加简单，但在 \mathbf{A} 能量分布明显不均匀时，随机选取其中的元素得到的结果未必能保持矩阵的原有性质。例如，若 \mathbf{A} 仅有少数元素为 1，其他元素均为 0，则均匀随机选取元素的结果很可能是一个全零矩阵 [2]。因此，在选取元素之前，需对数据矩阵 \mathbf{A} 进行预处理。由此发展出以下的几种方法：

B. 快速 J-L 变换

不确定性原理说明, 稀疏的信号在频域 (或其他变换域) 必然是稠密的。因此, 对于稀疏矩阵 \mathbf{A} , 可以对其进行傅里叶变换 \mathbf{F} 或进行 Hadamard 变换 \mathbf{H} , 将能量分散到整个矩阵当中。随机选取变换后的矩阵元素, 将得到较好的效果。快速 J-L 变换实现了这一过程。[5]

$$\mathbf{S} = \mathbf{P}\mathbf{H}\mathbf{D} \quad (7)$$

采样矩阵 \mathbf{S} 由三部分构成。其中, \mathbf{D} 为对角矩阵, 对角元为独立同分布的随机变量, 分别以 $1/2$ 概率取 1 或 -1。其作用为随机旋转数据矩阵, 保证经 Hadamard 变换后的矩阵能量分布足够均匀; \mathbf{H} 为 Hadamard 变换矩阵; \mathbf{P} 则对矩阵元素进行随机选取, 三者依次作用于数据矩阵。

由于元素选取和随机翻转的复杂度较低, 快速 J-L 变换的复杂度集中于 Hadamard 变换。与高斯采样对应的矩阵相乘操作 (复杂度为 $\mathcal{O}(mnk)$) 相比, Hadamard 变换可以快速进行, 其复杂度为 $\mathcal{O}(mn \log m)$, 这就提升了计算效率。

C. 随机抽样三角变换

与快速 J-L 变换类似, 随机抽样三角变换同样对数据矩阵进行预处理, 但其采用的并非 Hadamard 变换, 而是一类三角变换: 在被处理矩阵为实数的情况, 一般采用离散余弦变换和 Hartley 变换; 复数情况则采用离散傅里叶变换。随机抽样三角变换的表达如下 [4]:

$$\mathbf{S} = \sqrt{\frac{m}{k}} \mathbf{R}\mathbf{F}\mathbf{E}\mathbf{\Pi} \quad (8)$$

其中 $\mathbf{\Pi}$ 为随机置换矩阵, \mathbf{E} 为随机旋转矩阵 (与上一节的 \mathbf{D} 类似), \mathbf{F} 为三角变换矩阵, \mathbf{R} 随机选取和组合变换后数据矩阵的行。为使得数据矩阵的能量分布更加均匀, 可以独立地产生多个 $\mathbf{F}\mathbf{E}\mathbf{\Pi}$ 对其进行多次变换。利用快速算法降低三角变换的复杂度后, 这一采样方法的时间复杂度为 $\mathcal{O}(mn \log k)$ 。

以上的两种方法均对变换后的矩阵元素进行抽样, 得到的抽样结果是原数据矩阵元素的线性组合。另外一种思路则是提取数据本身的统计特征后, 再直接对数据矩阵进行抽取。相关的方法称为杠杆值抽样。

D. 杠杆值抽样

行杠杆值衡量数据矩阵每行包含的信息量。其定义如下 [6]:

定义 2 (行杠杆值). 数据矩阵 \mathbf{A} 的第 i ($1 \leq i \leq m$) 行的杠杆值为

$$l_i = \|\mathbf{P}_\mathbf{A} \delta_i\|_2 \quad (9)$$

其中 δ_i 为第 i 个标准单位向量, $\mathbf{P}_\mathbf{A}$ 为投影到 \mathbf{A} 列空间的投影矩阵。

通过对 \mathbf{A} 进行分解, 我们可以进一步解读杠杆值的含义。不妨假设 \mathbf{A} 秩为 n , 其列向量张成的空间的其中一组标准正交基为 \mathbf{Q} :

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{B}, \mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m \times n} \quad (10)$$

则有 $\|\mathbf{P}_\mathbf{A} \delta_i\|_2 = \delta_i^T \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T \delta_i = \delta_i^T \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T \delta_i = \|\mathbf{Q}^T \delta_i\|_2$ 。对于如上的 $\mathbf{Q}\mathbf{B}$ 分解, 可以认为 \mathbf{B} 的行包含了构建 \mathbf{A} 所需要的信息, 而 $\|\mathbf{Q}^T \delta_i\|_2$ 则代表将 \mathbf{B} 的各行组合成 \mathbf{A} 的第 i 行时组合系数包含的能量。这一能量越大, 表明 \mathbf{A} 的第 i 行包含的信息越多, 应该在采样时重点关注。

如果已经求得 \mathbf{A} 的杠杆值, 便可以根据杠杆值对数据矩阵进行重要度采样。通过对杠杆值归一化, 求得 \mathbf{A} 第 i 行被采样的概率为:

$$p_i = \frac{l_i}{\sum_i l_i} \quad (11)$$

根据这一概率分布, 设计采样矩阵 \mathbf{S} : \mathbf{S} 的每行以概率 p_i 取 $\delta_i / \sqrt{p_i k}$, 以抽取第 i 行数据和归一化, 并将这一过程重复 k 次。为使这样得到的 \mathbf{S} 为 \mathbf{A} 精度为 ϵ 的嵌入, 需要的采样规模为

$$k \geq 2\epsilon^{-2} n \log(2n) \quad (12)$$

与之相对, 若对每一行均匀采样, 则需要的采样规模增加到

$$k \geq 2\epsilon^{-2} \mu(\mathbf{A}) \log(2n) \quad (13)$$

其中 $\mu(\mathbf{A})$ 衡量 \mathbf{A} 的杠杆值分布差异, 在杠杆值分散的情况下, $\mu(\mathbf{A}) \gg n$ 。因此, 在按行采样的情况下, 按杠杆值进行重要度采样可以大幅降低所需的采样规模。[4]

然而, 由于计算杠杆值通常涉及计算 \mathbf{A} 的子空间, 需要对其进行复杂度较高的分解, 一般仅对 p_i 进行估计。记估计得到的分布为 $\{q_1, \dots, q_m\}$, 分布估计的质量 β 可通过下式衡量:

$$\beta = \min_i \frac{q_i}{p_i} \quad (14)$$

显然 $\beta \leq 1$, 当且仅当 $\beta = 1$ 时估计完全准确。以下定理保证了估计的质量:

定理 2. 给定采样规模 k , 精度 ϵ 和估计质量 β , 则按行抽样得到的采样矩阵 \mathbf{S} 是 \mathbf{A} 的一个精度为 ϵ 的子空间嵌入之概率不小于 $[6]$

$$1 - \delta \geq 1 - 2n \left(\frac{e^\epsilon}{(1 + \epsilon)^{(1+\epsilon)}} \right)^{\beta k/n} \quad (15)$$

定理 3. 给定精度 ϵ 和估计质量 β , 达到成功概率 $1 - \delta$ 所需要的采样规模为

$$k > 144n \ln(2n/\delta)/(\beta\epsilon^2) \quad (16)$$

估计分布 q_i 可以在较低的复杂度下获得 [5]。总的来说, 通过估计杠杆值分布和进行按行的重要度采样, 我们可以构建规模较小的子数据集而不影响数据的性质。

通过高斯采样、数据预处理和杠杆值采样等方法, 我们获得了采样矩阵 \mathbf{S} 和数据集降维后的低维“草图” $\mathbf{Y} = \mathbf{S}\mathbf{A}$ 。其中, 高斯采样的理论分析较为完备, 但复杂度较高, 通常使用稀疏符号采样作为替代; 预处理方法拥有较低的复杂度, 虽然欠缺理论分析, 但实际效果与高斯采样相仿; 杠杆值采样保留了原数据集的元素, 具有较好的可解释性, 在部分低秩逼近问题中较为实用, 但精度往往较低 [4]。根据处理的问题不同, 应选择不同的数据降维方式。为简洁起见, 本文在之后的内容中, 假设 \mathbf{S} 已经通过某种方法得到, 而不再对具体选择何种降维方法加以讨论。

III. 最小二乘

最小二乘问题已在 (1) 中描述。为降低其求解复杂度, RandNLA 首先生成 $[\mathbf{A} \ \mathbf{b}]$ 的一个精度为 ϵ 的子空间嵌入 \mathbf{S} , 而求解下列问题作为替代:

$$\tilde{\mathbf{x}}^* = \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{S}\mathbf{b}\|_2 \quad (17)$$

精度 ϵ 足够小的情况下, 问题的解 $\tilde{\mathbf{x}}^*$ 是原问题解的合理近似, 其近似精度为 [7]

$$\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\tilde{\mathbf{x}}^*\|_2 \leq (1 + \epsilon)\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^*\|_2 \quad (18)$$

$$\|\mathbf{x}^* - \tilde{\mathbf{x}}^*\|_2 \leq \sqrt{\epsilon} \text{cond}(\mathbf{A}) \sqrt{\gamma^{-2} - 1} \|\mathbf{x}^*\|_2 \quad (19)$$

其中 $\text{cond}(\mathbf{A})$ 是 \mathbf{A} 的条件数, $\gamma = \frac{\|\mathbf{P}_{\mathbf{A}}\mathbf{b}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2}$ 是 \mathbf{b} 落在 \mathbf{A} 列空间中的能量比例。特别地, 对于利用杠杆值采样求解最小二乘问题的误差分析见 [1]。通过单次采样求解最小二乘的复杂度为采样复杂度和计算 Moore-Penrose 逆复杂度的和 $\mathcal{O}(mn \log(k) + kn^2)$ 。

对于精度要求不太高的问题, 单次采样求解最小二乘便可满足要求。然而, 如第二节所述, 要产生精度为 ϵ 的嵌入 \mathbf{S} , 需要的采样规模 k 正比于 ϵ^{-2} 。当 ϵ 接近机器精度时, 需要的采样规模巨大, 因此不可能通过单次采样获得最小二乘问题足够精确的解。以下两个方法可以有效地降低高精度要求时的求解复杂度。

A. 迭代采样法

我们可以通过迭代求解, 使采样规模对精度的依赖下降至 $k = \mathcal{O}(\log(\epsilon))$, 从而使高精度求解变得可行。迭代算法见算法 1 [4]:

Algorithm 1 迭代最小二乘

Input: \mathbf{A} , \mathbf{b} , 嵌入精度为 ϵ_0 , 求解精度 η

Output: $\tilde{\mathbf{x}}^*$

```

1:  $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{b}$ 
2: while  $\|\mathbf{r}\|_2 \geq \eta$  do
3:    $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$ 
4:   产生精度为  $\epsilon_0$  的嵌入  $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{d \times m}$ 
5:    $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \min_{\mathbf{x}'} (\|\mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{x}'\|_2 - \langle \mathbf{A}^T \mathbf{r}, \mathbf{x}' \rangle)$ 
6: end while
7:  $\tilde{\mathbf{x}}^* \leftarrow \mathbf{x}$ 

```

其中第 5 步利用了性质 $\|\mathbf{S}\mathbf{A}\mathbf{x}\|_2 \approx \|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_2$ 。上述迭代的残差 \mathbf{r} 线性收敛至原问题的残差 $\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^*$, 故要得到理想的精度 ϵ , 所需的迭代次数为 $j = \mathcal{O}(\log(1/\epsilon))$ 。若设定嵌入精度为常数 ϵ_0 , 则 $k = \mathcal{O}(n \log n)$, 总的计算复杂度为 $\mathcal{O}((mn^2 + n^3) \log(n) \log(1/\epsilon))$ 。

B. 预处理法

迭代采样法的一个突出缺点是需要多次独立产生采样矩阵 \mathbf{S} 并计算 $\mathbf{S}\mathbf{A}$ 。与迭代采样法不同, 预处理法直接对原问题进行求解, 并且只需产生一次 \mathbf{S} 用于对 \mathbf{A} 进行预处理。其思路如下 [4], [6]: 对采样得到的 \mathbf{Y} , 有 $\mathbf{Q}\mathbf{R}$ 分解:

$$\mathbf{S}\mathbf{A} = \mathbf{Y} = \mathbf{Q}\mathbf{R}_Y \quad (20)$$

选取合适的采样规模, 可以认为 $\mathbf{Y}^T \mathbf{Y} \approx \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ 。对 \mathbf{S} 和 \mathbf{A} 分别进行 QR 分解得 $\mathbf{R}_Y^T \mathbf{R}_Y \approx \mathbf{R}_A^T \mathbf{R}_A$, 进而 $\mathbf{R}_Y \approx \mathbf{R}_A$ 。因此可用 \mathbf{R}_Y 对最小二乘问题进行预处理:

$$\tilde{\mathbf{x}}^* = \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{A}\mathbf{R}_Y^{-1} \mathbf{R}_Y \mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \quad (21)$$

预处理矩阵 $\mathbf{A}\mathbf{R}_Y^{-1}$ 近似列正交, 因此使用共轭梯度法求解上述问题, 每次迭代的复杂度为 $\mathcal{O}(mn)$, 与迭代采样

法类似, 同样迭代 $\mathcal{O}(\log(1/\epsilon))$ 次。预处理法总的复杂度为采样、QR 分解和迭代复杂度的和: $\mathcal{O}(mn\log(n) + n^3\log(n) + mn\log(1/\epsilon))$ 。

由于只需要进行一次采样, 预处理法的效率高于迭代采样法, 这也使其成为较常用的最小二乘求解方法 [4]–[6]。

C. 应用: 深层随机参数网络优化

深层随机参数网络 (Deep Stochastic Configuration Networks, DeepSCN) 是一种易于训练的网络架构, 其每层的节点数量和层数由迭代算法决定。记输入数据为 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, 在第 m 层节点数量、参数 $\mathbf{W}_m, \mathbf{b}_m$ 和层数 n 均确定的情况下, 最终的输出 $\hat{\mathbf{t}} \in \mathbb{R}^c$ 由下式决定:

$$\hat{\mathbf{t}} = \mathbf{H}\boldsymbol{\beta} \quad (22)$$

其中 $\mathbf{H} = [\mathbf{h}_1, \mathbf{h}_2, \dots, \mathbf{h}_\sigma]$ 为所有 $\sigma = \sum_m L_m$ 个节点的输出总和。在决定层数时, 最小二乘问题 $\min \|\mathbf{H}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{t}\|_2$ 被反复计算 (其中 \mathbf{t} 为数据标签), 以决定参数 $\boldsymbol{\beta}$ 和是否应该增加层数。

DeepSCN 的训练流程如下:

Algorithm 2 DeepSCN 训练算法

Input: 数据集 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 标签 $\mathbf{T} \in \mathbb{R}^{m \times c}$, 训练终止门限 η

Output: 网络层数 n , 每节节点个数和参数 $L_n, \mathbf{b}_n, \mathbf{W}_n$

```

1:  $\epsilon \leftarrow \inf, n \leftarrow 1$ 
2: while  $\epsilon \geq \eta$  do
3:    $L_n, \mathbf{b}_n, \mathbf{W}_n = \text{Config\_Decider}(\mathbf{X}, \mathbf{T})$ 
4:    $\mathbf{H}_{L_n} = \text{Inference}(\mathbf{X}; \mathbf{b}_n, \mathbf{W}_n)$ 
5:    $\mathbf{H} = [\mathbf{H}, \mathbf{H}_{L_n}]$ 
6:    $\boldsymbol{\beta} = \text{LS\_Solver}(\mathbf{H}, \mathbf{T})$ 
7:    $\epsilon = \|\mathbf{H}\boldsymbol{\beta} - \mathbf{T}\|_2$ 
8:    $n \leftarrow n + 1$ 
9: end while
```

由于 \mathbf{H} 规模正比于网络参数规模, 多次计算最小二乘严重影响训练效率。同时, \mathbf{H} 本身的较小奇异值也将带来数值不稳定性。通过对其进行基于 SVD 分解的低秩逼近, 降低最小二乘的复杂度, 可以以牺牲少量网络性能为代价, 将计算最小二乘的时间缩短 10 倍左右 [8] (基于 SVD 分解的低秩逼近将在下一章说明)。

IV. 低秩逼近

A. 列空间基选取

假设矩阵 \mathbf{A} 是低秩逼近的目标矩阵, 且其秩约为 r 。为使低秩逼近具有良好效果 (式 (3) 中的逼近误差较小), 应找到其列空间的 r 个基并将其投影到这些基张成的子空间上。如果对 \mathbf{A} 的列进行线性组合:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{S} \quad (23)$$

则只要 $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{n \times l}$, 取 $l \geq r$ 并使得 \mathbf{S} 列满秩, 得到的 \mathbf{Y} 张成的列空间将是 \mathbf{A} 列空间的一个至少 r 维的子空间。直接对 \mathbf{Y} 进行 QR 分解即可得到这个子空间的基。选取的 l 通常稍大于 r , 称 $p = l - r$ 为过采样参数。一般而言选取较小的 p (例如 5 或 10) 即可, 但 p 的选择也和 \mathbf{A} 的性质有关: \mathbf{A} 的规模较大, 或奇异值下降的速度较大时, 则需要的过采样程度 p 也更大。列组合矩阵 \mathbf{S} 在这里起到数据降维作用, 它和第二节的采样矩阵类似, 因此同样可以通过高斯采样、快速 J-L 变换等方法产生。[4], [9]

更多情况下, 矩阵 \mathbf{A} 的秩难以确定, 需要观察估计误差来确定预先选择的秩 r 是否足够近似 \mathbf{A} 。若限定重建误差 $\|(\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T)\mathbf{A}\|_2 < \epsilon$, 则在选择 l 个基向量 $\mathbf{Q}^{n \times l}$ 之后, 可以通过下式估计重建误差 [9]:

$$\|(\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T)\mathbf{A}\|_2 \leq 10\sqrt{\frac{2}{\pi}} \max_{i=1,2,\dots,k} \|(\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T)\mathbf{A}\boldsymbol{\omega}_i\|_2 \quad (24)$$

其中 $\boldsymbol{\omega}_i, 1 \leq i \leq k$ 从标准高斯分布 $\mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}_n)$ 中独立采样 k 次得到。式 (24) 的成立几率大于 $1 - 10^{-k}$, 故只需取适当 k , (24) 几乎必然成立。

进一步, 在对 $\text{rank}(\mathbf{A})$ 没有任何先验知识的情况下, 可以选取足够大的采样规模 l , 保证采样结果 \mathbf{Y} 的秩等于 $\text{rank}(\mathbf{A})$; 或是, 在选取基时, 迭代地增加 \mathbf{Q} 的维数, 并在每次增加维数后检验重建误差是否满足要求, 在误差足够小时停止向 \mathbf{Q} 中添加新的向量 [9]。算法如下:

B. 随机奇异值分解 (RSVD)

随机奇异值分解是较为常用的低秩逼近算法, 基于列空间基选取实现。假设通过某种列空间基选取的手段, 已经获得足够精确的 $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T\mathbf{A}$ 和 \mathbf{Q} 。则存在如下的近似分解 [4]:

$$\mathbf{A} \approx \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T\mathbf{A} = \mathbf{Q}(\mathbf{Q}^T\mathbf{A}) = \mathbf{Q}\hat{\mathbf{U}}\Sigma\mathbf{V}^* = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^* \quad (25)$$

Algorithm 3 迭代基选取算法**Input:** 待近似矩阵 \mathbf{A} , 重建精度 ϵ , 检验向量个数 k **Output:** 基向量矩阵 \mathbf{Q}

```

1: 从标准高斯分布中采样得  $\omega_1, \dots, \omega_k$ 
2:  $\mathbf{y}_i = \mathbf{A}\omega_i$ 
3:  $j \leftarrow 0$ 
4:  $\mathbf{Q} \leftarrow []$ 
5: while  $\max_{i=1, \dots, k} \|\mathbf{y}_i\|_2 \geq \epsilon$  do
6:    $j \leftarrow j + 1$ 
7:    $\mathbf{q}_j \leftarrow \mathbf{y}_j / \|\mathbf{y}_j\|_2$ 
8:    $\mathbf{Q} \leftarrow [\mathbf{Q}, \mathbf{q}_j]$ 
9:   从标准高斯分布中采样得  $\omega_{j+k}$ 
10:   $\mathbf{y}_{j+k} \leftarrow (\mathbf{I} - \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T)\omega_{j+k}$ 
11:   $\mathbf{y}_i = \mathbf{y}_i - \mathbf{q}_j \langle \mathbf{q}_j, \mathbf{y}_i \rangle, i = j + 1, \dots, j + k - 1$ 
12: end while

```

Algorithm 4 RSVD**Input:** 待近似矩阵 \mathbf{A} **Output:** 近似的奇异值分解 $\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^*$

```

1:  $\mathbf{Q} \leftarrow \text{RangeFinder}(\mathbf{A})$ 
2:  $\mathbf{C} \leftarrow \mathbf{Q}^T \mathbf{A}$ 
3:  $\hat{\mathbf{U}}, \Sigma, \mathbf{V}^* \leftarrow \text{svd}(\mathbf{C})$ 
4:  $\mathbf{U} \leftarrow \mathbf{Q}\hat{\mathbf{U}}$ 

```

故 RSVD 可以通过如下的方法实现:

其中, $\text{RangeFinder}()$ 表示任意的基选取算法。RSVD 已经被用于加速深度学习领域中的网络优化, 上节中 DeepSCN 的加速算法就基于 RSVD [8]; 另外, RSVD 也被用于快速计算二阶优化方法中的 Fisher 信息矩阵 [10] (将在本章最后介绍)。

C. 插值分解 (ID)

对于数据矩阵 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, 奇异值分解是重要的数据特征提取手段, 例如, 通过对采集到个体核苷酸数据主成分的分析, 可以建立地域与基因间的相关关系 [2]。然而, 经过分解得到的特征向量和特征值并没有明确的物理意义。考虑到若在数据矩阵中抽出少量的代表数据作为线性空间的基底, 这些基底将不仅具有明确的物理含义, 而且张成的子空间也可能包含数据集的大部分数据, 用这些数据进行原矩阵 \mathbf{A} 的低秩逼近可能可解释性上均更具优势。由此, 发展出插值分类方法。

插值分类方法的表示如下:

1) 列插值: $\mathbf{A} = \mathbf{CZ}$

2) 行插值: $\mathbf{A} = \mathbf{XR}$

其中的 \mathbf{C} 和 \mathbf{R} 分别为原矩阵 \mathbf{A} 的部分列和部分行组成的矩阵。记 \mathbf{C} 和 \mathbf{R} 在原矩阵中对应的列和行索引集合为 \mathcal{I}, \mathcal{J} , 则 $\mathbf{C} = \mathbf{A}[:, \mathcal{I}], \mathbf{R} = \mathbf{A}[\mathcal{J}, :]$ 。 \mathbf{Z} 和 \mathbf{X} 分别用于插值。由于原理类似, 这里主要介绍列 ID 分解。

ID 分解的主要任务是找到列索引集合 \mathcal{I} 。对于规模较小的矩阵 \mathbf{A} , 设定列矩阵 \mathbf{C} 的规模 $|\mathcal{I}| = k$, 用基于 Gram-Schmidt 分解的贪婪算法可以很好地找到合适的 \mathcal{I} 。[4] 首先, 找到 \mathbf{A} 中模最大的一列, 作为 G-S 分解中列正交矩阵 \mathbf{Q} 的第一列; 随后的每轮迭代中, 将余下的矩阵投影到 \mathbf{Q} 的列空间上, 将残量模值最大的列索引加入 \mathcal{I} 的同时, 将残量归一化后并入 \mathbf{Q} , 直到 \mathcal{I} 的规模满足要求。此时有如下等式成立:

$$\mathbf{A}\Pi = \mathbf{Q}\mathbf{S} + \mathbf{E} \quad (26)$$

贪婪算法的每次迭代需要进行列选取, 这使得矩阵 \mathbf{A} 在被 G-S 算法 \mathbf{QR} 分解之前, 列向量被重新排列, 用矩阵 Π 表示。 \mathbf{S} 对应 \mathbf{QR} 分解中的上三角矩阵 \mathbf{R} , \mathbf{E} 则为矩阵 \mathbf{A} 向 \mathbf{Q} 列空间投影产生的残量。

在贪婪算法的迭代选取过程中, 列索引集合 \mathcal{I} 可以直接求得。为推导 ID 分解的具体形式, 将 (26) 式进一步展开: 由贪婪算法的过程容易得出, 若将 \mathbf{S} 表示为分块矩阵

$$\mathbf{S} = [\mathbf{S}_{11}, \mathbf{S}_{12}] \quad (\mathbf{S}_{11} \in \mathbb{R}^{k \times k}) \quad (27)$$

则 $\mathbf{Q}\mathbf{S}_{11}$ 恰为选取的列矩阵 \mathbf{C} 。代入 (26) 得

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{S}_{11}[\mathbf{I}_k \mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}]\Pi^T + \mathbf{E}\Pi^T \quad (28)$$

若记 $[\mathbf{I}_k \mathbf{S}_{11}^{-1}\mathbf{S}_{12}]\Pi^T = \mathbf{Z}$, 则得到 \mathbf{A} 的 ID 分解形式 $\mathbf{A} \approx \mathbf{CZ}$, $\tilde{\mathbf{E}} = \mathbf{E}\Pi^T$ 为逼近误差。

对于规模更大的矩阵 \mathbf{A} , 则需要采用随机方法进行预处理, 降低 ID 的复杂度。与列空间基选取过程类似, 这里需要对 \mathbf{A} 的行进行线性组合 $\mathbf{Y} = \mathbf{SA}$; 为保持 \mathbf{A} 的列空间在随机采样后大致不变, 需要选取 \mathbf{S} 的列数 l 稍大于预先确定的秩 k 。这样, 可以认为 \mathbf{A} 的各行均位于 \mathbf{Y} 的行空间中:

$$\mathbf{A} = \mathbf{FY} \quad (29)$$

若对 \mathbf{Y} 存在 ID

$$\mathbf{Y} = \mathbf{CX} \quad (30)$$

则有 $\mathbf{A} = \mathbf{FY} = \mathbf{FCX}$ 。由于 $\mathbf{A} = \mathbf{FY}$, 而 \mathbf{C} 又是 \mathbf{Y} 的部分列, 容易得到 $\mathbf{FC} = \mathbf{C}_A$ 也是 \mathbf{A} 的部分列。这意味

着, \mathbf{A} 和 \mathbf{Y} 的 ID 具有完全相同的列索引, 因此通过对规模较小的 \mathbf{Y} 进行 ID, 可以直接得到原矩阵 \mathbf{A} 的 ID [4]。

ID 分解也可以通过杠杆值采样获得。通过杠杆值采样, 可以获得原矩阵 \mathbf{A} 的一组列 \mathbf{C} 。在第二节中提到, 只要选取采样规模 $k = \mathcal{O}(n \log(2n)/\epsilon^2)$, 则 \mathbf{C} 为 \mathbf{A} 精度为 ϵ 的嵌入。推导可得

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{P}_{\mathbf{C}_k} \mathbf{X}\|_F \leq (1 + \epsilon) \|\mathbf{A} - \mathbf{P}_{\mathbf{U}_k} \mathbf{A}\|_F \quad (31)$$

其中 \mathbf{C}_k 和 \mathbf{U}_k 分别为矩阵 \mathbf{C} 和 \mathbf{A} 前 k 个左特征向量组成的矩阵。鉴于 $\|\mathbf{A} - \mathbf{P}_{\mathbf{U}_k} \mathbf{A}\|_F$ 为对 \mathbf{A} 进行秩 k 逼近的误差下界, 通过增大采样规模减小 ϵ 可以获得精度可靠的低秩逼近。

D. 应用: 快速 K-FAC 优化方法

K-FAC (Kronecker-Factored Approximate Curvature) 是针对自然梯度方法 (Natural Gradient) 提出的近似算法。自然梯度的形式如下:

$$\nabla_{NG} f(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{F}^{-1} \nabla f(\boldsymbol{\theta}) \quad (32)$$

其中 \mathbf{F} 为 Fisher 矩阵, $\boldsymbol{\theta} = [\boldsymbol{\theta}_1^T, \boldsymbol{\theta}_2^T, \dots, \boldsymbol{\theta}_n^T]^T$ 为按层排列的网络参数, $f(\cdot)$ 为损失函数。通过将 Fisher 矩阵的逆作用于梯度向量, 自然梯度法可以提高优化效率。

由于 Fisher 矩阵的规模正比于网络参数的数量, 计算其逆是十分困难的。K-FAC 将 Fisher 矩阵的结构做简化近似, 仅考虑 Fisher 矩阵的层内部分, 而将层间部分的影响置零。由于参数 $\boldsymbol{\theta}$ 是按层排列的, 这对应于将 Fisher 矩阵的非对角块置零。进一步推导 Fisher 矩阵, 得到其 Kronecker 分解形式:

$$\mathbf{F}_{K-FAC} = \text{blockdiag}\{\mathcal{A}_n \otimes \boldsymbol{\Gamma}_n\} \quad (33)$$

其中 \mathcal{A}_n , $\boldsymbol{\Gamma}_n$, 分别为第 n 层的输入自相关矩阵和对第 n 层参数的梯度自相关矩阵。通过将 Fisher 矩阵近似为块对角矩阵, 求逆操作得到简化:

$$\mathbf{F}_{K-FAC}^{-1} = \text{blockdiag}\{\mathcal{A}_n^{-1} \otimes \boldsymbol{\Gamma}_n^{-1}\} \quad (34)$$

将上式代入 $\nabla_{NG} f(\boldsymbol{\theta})$ 。对第 k 层的参数 $\boldsymbol{\theta}_k$, 自然梯度为

$$\nabla_{NG} f(\boldsymbol{\theta}_k) = \text{vec}(\boldsymbol{\Gamma}_k^{-1} \text{Mat}(\nabla f(\boldsymbol{\theta}_k)) \mathcal{A}_k^{-1}) \quad (35)$$

其中 $\text{vec}(\cdot)$ 和 $\text{Mat}(\cdot)$ 分别将矩阵拉伸为向量/将向量组织为矩阵。考虑到自相关矩阵 \mathcal{A} , $\boldsymbol{\Gamma}$ 分别有 SVD

分解 $\mathbf{U}_{\mathbf{r}} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{r}} \mathbf{V}_{\mathbf{r}}^T$ 和 $\mathbf{U}_{\mathcal{A}} \boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{A}} \mathbf{V}_{\mathcal{A}}^T$, 自然梯度可以借助 SVD 分解进行:

$$\begin{aligned} \nabla_{NG} f(\boldsymbol{\theta}_k) &= \text{vec}(\mathbf{V}_{\mathbf{r}} (\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{r}} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{U}_{\mathbf{r}}^T \text{Mat}(\nabla f(\boldsymbol{\theta}_k)) \\ &\quad \mathbf{V}_{\mathcal{A}} (\boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{A}} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{U}_{\mathcal{A}}^T) \end{aligned} \quad (36)$$

Puiu 在 [10] 中指出, $\boldsymbol{\Gamma}_k^{-1}$ 和 \mathcal{A}_k^{-1} 均可以进行秩 r 的低秩逼近, 从而降低 (36) 中矩阵相乘的复杂度。据此, [10] 提出了一种基于 RSVD 的计算加速方法, 用于近似 (34) 中自相关矩阵的逆:

$$\begin{aligned} \nabla_{NG} f(\boldsymbol{\theta}_k) &\approx \text{vec}(\mathbf{V}_{\mathbf{r}}^{(r)} (\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{r}}^{(r)} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{U}_{\mathbf{r}}^{(r)T} \text{Mat}(\nabla f(\boldsymbol{\theta}_k)) \\ &\quad \mathbf{V}_{\mathcal{A}}^{(r)} (\boldsymbol{\Sigma}_{\mathcal{A}}^{(r)} + \lambda \mathbf{I})^{-1} \mathbf{U}_{\mathcal{A}}^{(r)T}) \end{aligned} \quad (37)$$

其中上标 (r) 表示取最大的 r 个特征值和特征向量。通过进行低秩逼近, 在不影响训练效果的前提下可将训练时间缩短至原先的约 1/3 [10]。

V. 矩阵相乘

以最小二乘和低秩逼近为代表的矩阵计算采用的随机方法, 利用随机生成的单个降维矩阵 \mathbf{S} 对原矩阵 \mathbf{A} 进行预处理并应用于后续计算, 这相当于用单次随机试验的结果估计问题的精确解。与这些方法不同, 在矩阵相乘和矩阵函数估计等问题中, 广泛采用蒙特卡洛方法, 算法思路为:

- 1) 从某一简单分布 \mathcal{P} 中采样得到随机矩阵 \mathbf{X} ;
- 2) 以原矩阵 \mathbf{A} 和随机矩阵 \mathbf{X} 为自变量, 构建合适的随机变量 $F = f(\mathbf{A}, \mathbf{X})$, 使得 $\mathbb{E}_{\mathcal{P}}(F) = F^*$, 其中 F^* 为问题的精确解;
- 3) 独立对 F 进行 k 轮采样, 取平均值得到 F^* 的估计。
- 4) 另外, 还需计算 $\text{Var}(F)$ 用于决定合适的采样轮次 k 。

问题的关键在于如何构建合适的随机变量 F^* 。本节以矩阵相乘和矩阵函数估计为例, 给出这些问题中随机变量的构造方法。

A. 矩阵相乘

给定 $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 和 $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times p}$, 通过对 \mathbf{A} 和 \mathbf{B} 分别进行列采样和行采样, 可以得到矩阵相乘的大致结果。记采样矩阵为 \mathbf{S} , 算法如下 [3]: 可以证明如此构造的随机变量 \mathbf{F} 之期望恰为 \mathbf{AB} :

Algorithm 5 矩阵乘法估计**Input:** \mathbf{A} , \mathbf{B} , 采样规模 c , 分布列 $\mathcal{P} = \{p_1, \dots, p_n\}$ **Output:** 矩阵乘积估计值 $\mathbf{F} \approx \mathbf{AB}$

```

1:  $\mathbf{S} \leftarrow [], \mathbf{D} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{c \times c}$ 
2: for  $i=1,2,\dots,c$  do
3:   随机选取  $\mathbf{s} = \delta_{i_t}, Pr\{i_t = k\} = p_k$ 
4:    $\mathbf{S} \leftarrow [\mathbf{S}, \mathbf{s}]$ 
5:    $\mathbf{D}_{ii} = \frac{1}{\sqrt{cp_{i_t}}}$ 
6: end for
7:  $\mathbf{F} = \mathbf{ASDD}^T \mathbf{S}^T \mathbf{B}$ 

```

证明. 由 $\mathbf{F}_{kl} = \sum_{i=1}^c \frac{1}{cp_{i_t}} \mathbf{A}_{ki_t} \mathbf{B}_{i_t l}$ 得:

$$\mathbf{F}_{kl} = \sum_{i=1}^c X_{i_t}$$

其中 $X_{i_t} = \frac{1}{cp_{i_t}} \mathbf{A}_{ki_t} \mathbf{B}_{i_t l}$. 而

$$\mathbb{E}(X_{i_t}) = \sum_{i=1}^n p_i \frac{1}{cp_i} \mathbf{A}_{ki} \mathbf{B}_{il} = [\mathbf{AB}]_{kl}/c$$

故

$$\mathbb{E}(\mathbf{F}_{kl}) = [\mathbf{AB}]_{kl}$$

进而 $\mathbb{E}(\mathbf{F}) = \mathbf{AB}$. \square

产生多个 \mathbf{F} 的样本并求平均, 即得到矩阵乘积 \mathbf{AB} 的估计值。

\mathbf{F} 的方差随预先给定的分布列 \mathcal{P} 变化。可以进一步证明, 当 \mathcal{P} 的值取得较为合理时, 估计误差的量级大致为 $\epsilon = \|\mathbf{AB} - \mathbf{F}\|_F = \mathcal{O}(\|\mathbf{A}\|_F \|\mathbf{B}\|_F / c)$ 。

一个更加简单的方法是, 在以上方法中取 $c=1$ 。基于类似的证明过程, 构建随机变量 $\mathbf{X} = p_{i_t} \mathbf{A}_{i_t} \mathbf{B}_{i_t}^T$, 则 $\mathbb{E}(\mathbf{X}) = \mathbf{AB}$, 多次采样求平均同样可以估计 \mathbf{AB} [4]。

在第一种方法中, 每次采样随机变量 \mathbf{F} 的复杂度较高, 但方差较少, 因此需要的采样次数较少; 第二种方法中, 采样复杂度较低, 但需要大量样本才能得到可信的估计值。然而, 对这两种方法, 若要使以 Frobenius 范数计算的估计精度小于 ϵ , 计算复杂度均正比于 $1/\epsilon^2$, 这意味着很难通过随机方法计算矩阵相乘的精确结果。

VI. 总结

本文中, 我们简述了 RandNLA 实现数据降维, 从而降低矩阵计算复杂度的原理, 针对最小二乘、低秩逼近和矩阵乘法等具体问题, 对相应算法的复杂度和精确度进行了分析, 在最小二乘和低秩逼近领域, 也介绍了

其在深度学习领域的部分最新应用。在精确度要求较低の場合, 通过数据降维, RandNLA 可以明显降低矩阵计算的复杂度; 同时, 大部分 RandNLA 算法中精确度与采样规模成平方反比关系, 这使得 RandNLA 难以完成非常精确的计算, 可能需要考虑采用残差迭代或蒙特卡洛等方法减小计算误差。

参考文献

- [1] P. Drineas, M. W. Mahoney and S. Muthukrishnan, "Sampling algorithms for regression and applications," in Proc. of the 17th annual ACM-SIAM symp. on Discrete algorithm, 2006, pp. 1127-1136.
- [2] P. Drineas and M. W. Mahoney, "RandNLA: Randomized numerical linear algebra," Commun. of the ACM, vol. 59, no. 6, pp. 80-90, 2016.
- [3] P. Drineas, R. Kannan and M. W. Mahoney, "Fast Monte Carlo algorithms for matrices I: Approximating matrix multiplication," SIAM J. on Computing, vol. 36, no. 1, pp. 132-157, 2006.
- [4] P. G. Martinsson and J. A. Tropp, "Randomized numerical linear algebra: Foundations & algorithms," arXiv:2002.01387v3 [math.NA], 15 Mar 2021. <https://arxiv.org/pdf/2002.01387>.
- [5] D. P. Woodruff, "Sketching as a tool for numerical linear algebra," Foundations and Trends in Theoretical Computer Science, vol. 10, no. 1-2, pp. 1-157, 2014.
- [6] R. Murray, et al., "Randomized numerical linear algebra: A perspective on the field with an eye to software," arXiv preprint arXiv:2302.11474, 2023.
- [7] M. W. Mahoney, "Randomized algorithms for matrices and data," Foundations and Trends in Machine Learning, vol. 3, no. 2, pp. 123-224, 2010.
- [8] C. Subramani, et al., "Enhancing deep stochastic configuration networks Efficient training via low-rank matrix approximation," Information Sciences, vol. 690, no. 121519, 2025.
- [9] N. Halko, P. G. Martinsson and J. A. Tropp, "Finding structure with randomness: Probabilistic algorithms for constructing approximate matrix decompositions," SIAM review, vol. 53, no. 2, pp. 217-288, 2011.
- [10] C.O.Puiu, Natural Gradient Algorithms for Training Deep Neural Networks, Ph. D. thesis, University of Oxford, 2023.