arXiv:2603.05709v1 [math.NA] 5 Mar 2026

一切皆为 Vecchia：统一低秩与稀疏逆 Cholesky 近似

Eagan Kaminetz* 和 Robert J. Webber†

摘要。 部分主元 Cholesky 近似能够准确表示接近低秩的矩阵。与此同时，Vecchia 近似能够准确表示其逆 Cholesky 因子接近稀疏的矩阵。若将部分 Cholesky 近似与残差的 Vecchia 近似相结合，会发生什么？本文表明，两者之和恰好是原始矩阵的一种 Vecchia 近似，其稀疏模式经过了增广。因此，Vecchia 近似涵盖了一类现有的矩阵近似，适用范围广泛。

关键词。 Vecchia 近似、部分主元 Cholesky 近似、核矩阵分解 稀疏近似逆矩阵

AMS 学科分类。65F55, 65C99,15A23

1. 动机。 本文旨在通过查找并处理大型、稠密、半正定矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 的各个元素 $\boldsymbol{A}(i,\ j)$。作为主要示例， $\boldsymbol{A}$ 可以是高维机器学习数据集的核矩阵 [23]。由于核矩阵可能非常大（例如， $n \geq 10^5$），核计算需要一种近似 $\boldsymbol{A} \approx \boldsymbol{A}$，并且该近似的生成时间为线性或次线性。线性时间算法需要进行 $\mathcal{O}(n^2)$ 次算术运算，其计算量与完整遍历 $\boldsymbol{A}$ 一次的成本相当。次线性时间算法需要进行 $o(n^2)$ 次运算，少于完整遍历 $\boldsymbol{A}$所有元素一次的成本。

两种可在线性或次线性时间内生成的近似方法是部分主元 Cholesky [5]和 Vecchia [28] 方法。传统上，人们认为它们分别适用于不同类型的矩阵，且都能提供准确的近似。

- 当目标矩阵接近低秩时，部分主元 Cholesky 可提供精确的近似 [5,定理 2.3]。
- 当逆 Cholesky 因子接近稀疏时，Vecchia 可提供精确的近似 [22,第 B 节2]。

本文统一了这两种方法。文中表明，先进行部分 Cholesky 近似，再对残差进行 Vecchia 近似，与采用增广稀疏模式对原始矩阵进行 Vecchia 近似完全等价（定理 2.4）。作为计算上的优势，该混合方法生成的 Vecchia 近似在每行中包含 r 个非零元，需要 $\mathcal{O}(rn)$ 次条目访问，而不是 $\mathcal{O}(r^2n$，因此对于大型核矩阵更加实用。

部分 Cholesky $+$ Vecchia 方法曾出现在以往的工作中 [30, 4]，在理论上优雅，在实践中也十分有效。接下来的小节将介绍本文理论的亮点（第 1.1 小节）和实验结果（第 1.2 小节）。

1.1. 理论最优性。 本文提出并回答了一个问题：“Vecchia 近似以何种方式达到最优？”此前的研究 [28, 18, 2, 29, 22], 已建立 Vecchia 近似的最优性理论，而本文则将其扩展到半正定矩阵，并为线性求解和行列式计算给出了新的误差界。

T最优性分析基于以下 Kaporin 条件数 [18

*加利福尼亚大学圣迭戈分校，拉霍亚，CA（ekaminetz@ucsd.edu，rwebber@ucsd.edu）

TABLE 1 *Summary of error bounds in terms of the Kaporin condition number* κ_{Kap}. *The direct solver bounds require the normalization* $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{+}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$. *The determinant bounds require that* $\boldsymbol{A}$ *and* $\hat{\boldsymbol{A}}$ *are strictly positive-definite, and the iterative determinant bound requires* $\log(\kappa_{\mathrm{Kap}}) \le n$.

方法	误差界	参考文献
线性系统，直接求解器	$\frac{\|\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}^2}{\|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}^2} \le 2\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})$	命题3.2
线性系统，迭代求解器	$\frac{\|\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}^2}{\|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}^2} \le \left[\frac{3\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})}{t}\right]^t$	[2], 命题3.3
行列式，直接求解器	$\log\left(\frac{\det \hat{\boldsymbol{A}}}{\det \boldsymbol{A}}\right) = \det \log(\kappa_{\mathrm{Kap}})$	命题 3.4
行列式，迭代求解器	$\mathbb{E}\left\|\log\left(e^{s_t}\frac{\det \hat{\boldsymbol{A}}}{\det \boldsymbol{A}}\right)\right\|^2_{\det} \le \frac{4\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})}{t}$	命题 3.5

2], 它用于衡量矩阵近似的精度。这里我们对传统定义稍作扩展，以处理半正定矩阵。

DEFINITION 1.1（Kaporin 条件数）。对于任意半正定矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 以及任意半正定近似 $\hat{\boldsymbol{A}} \in \mathbb{C}^{n\times n}$，*Kaporin* 条件数为

$$\kappa_{\mathrm{Kap}} = \frac{\left(\frac{1}{r}\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{+})\right)^r}{\mathrm{vol}(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{+})}, \qquad \textit{where } r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}),$$

当 $\boldsymbol{A}$ 和 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的值域相同时。如果 $\boldsymbol{A}$ 与 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的值域不同，则 *Kaporin* 条件数为 $\kappa_{\mathrm{Kap}} = \infty$。这里，体积是正特征值的乘积。

Kaporin 条件数是 $\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{+}$ 的正特征值的算术平均值的 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$ 次幂除以特征值的乘积。直观地说，κ_{Kap} 衡量近似保留 $\boldsymbol{A}$的谱的效果；$\kappa_{\mathrm{Kap}} = 1$ 对应于相差一个常数倍的精确恢复，而较大的值则表示特征值发生了失真。

Kaporin [18, 附录 A。3]证明，对于任意严格正定目标矩阵和任意稀疏模式，Vecchia 近似都能达到可能的最小 Kaporin 条件数。关于这一结果在半正定矩阵上的推广，参见 定理 3.1 。

Kaporin 最优性结果十分重要，因为 Kaporin 条件数能够控制多种线性代数计算的误差。 表 1 显示，较小的 Kaporin 条件数能够直接改善两项常见任务：求解线性系统和估计行列式。线性代数计算的详细说明以及 Kaporin 条件数界见 第 3 节。

1.2. 实证性能。为了测试部分 Cholesky +Vecchia 的性能，我们下载了 22 个机器学习数据集，并对每个数据集进行子采样，使其包含 $n = 20,000$ 个包含 $d \in [4, 784]$ 个标准化预测变量的数据点；数据集列表见 表 2。利用数据点 $\boldsymbol{z}_1, \ldots, \boldsymbol{z}_n \in \mathbb{R}^d$，我们定义了严格

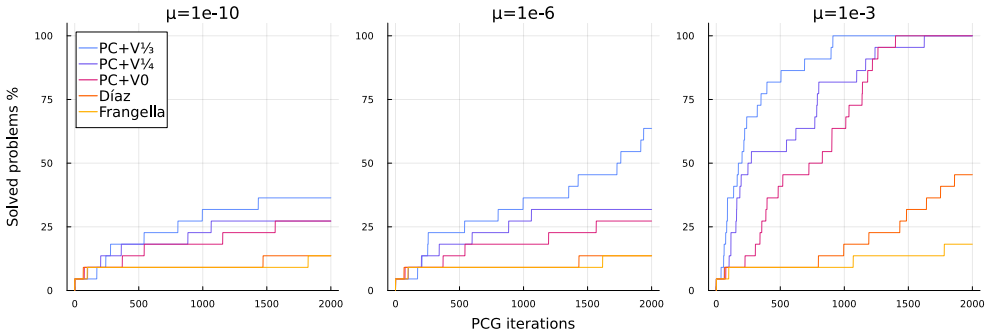

FIG. 1. *Comparison of five preconditioners based on randomly pivoted Cholesky [5] with rank* $r = \lfloor n^{1/2} \rfloor = 141$. *Partial Cholesky + Vecchia preconditioners use either* $q = 0$ (***PC+V0***), $q = \lfloor n^{1/4} \rfloor = 11$ (***PC+V1/4***), *or* $q = \lfloor n^{1/3} \rfloor = 27$ (***PC+V1/3***) *nonzers per row in the Vecchia component. Alternative preconditioners (**Díaz** [8] and **Frangella** [10]) modify randomly pivoted Cholesky by adding a multiple of the identity to the approximation and/or its nullspace.*

正定 $n \times n$ 核矩阵，其元素为

$$\boldsymbol{A}(i,j) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{z}_i - \boldsymbol{z}_j\|^2}{2d}\right) + \mu\,\delta(i,j), \qquad \text{for } \mu \in \{10^{-3}, 10^{-6}, 10^{-10}\}.$$

随后，我们使用共轭梯度法迭代求解线性系统 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$，并使用各种矩阵近似 $\boldsymbol{A}$ 作为预条件器。一旦相对误差达到容差 $\|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}\|/\|\boldsymbol{b}\| \le 10^{-3}$，我们便将相应问题判定为“已求解”。完整细节见第 5 节。

图 1 表明，部分 Cholesky + Vecchia 预条件器在求解问题时始终优于现有的基于 Cholesky 分解的方法 [10, 8],，在 $11\times$ 次迭代内求解的问题数量最多可达 $t = 1000$ 个。在部分 Cholesky + Vecchia 预条件器中，将 Vecchia 分量每行的非对角非零元数量从 $q = 0$增加到 $q = \lfloor n^{1/3} \rfloor = 27$，可使求解的问题数量增加 1。6–2.0×. 尽管取得了这些提升，为近奇异矩阵构造有效预条件器仍是一个悬而未决的问题，因为 在 给定最小正则化参数时，没有任何现有预条件器能够求解一半的目标问题 $\mu = 10^{-10}$。

总之，部分 Cholesky + Vecchia 能够为许多此前无法处理的半正定核矩阵提供令人满意的近似，但并非全部。未来，我们乐观地认为，通过创造性地优化稀疏模式，可以继续改进这种近似。

1.3. 文章结构。 本文其余部分安排如下。第 1.4 小节介绍符号约定。第 2 节 证明部分 Cholesky + Vecchia =Vecchia。第 3 节 阐述 Vecchia 近似的最优性理论。第 4 节 介绍如何为 Vecchia 近似选择稀疏模式的优化策略，而 第 5 节则展示数值实验。

1.4. 记号。 标量用小写斜体表示，例如 $m, n, r \in \mathbb{N}$。向量用小写粗体表示，例如 $\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n$。矩阵用大写粗体字母表示，例如 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in \mathbb{C}^{n\times n}$。指标集用无衬线字体表示，例如 R、S $\subseteq \{1, \dots, n\}$。我们用$\boldsymbol{u}(i)$表示向量 $\boldsymbol{u}$的第 i个元素，并用 $\boldsymbol{A}(i, j)$表示矩阵 $\boldsymbol{A}$的第(i, j)个元素。给定指标集 R, S，我们用 $\boldsymbol{u}$(R)表示子向量

$(\boldsymbol{u}(i))_{i\in \mathsf{R}}$，并用 $\boldsymbol{A}(\mathsf{R},\mathsf{S})$表示子矩阵$(\boldsymbol{A}(i,j))_{i\in \mathsf{R},\, j\in \mathsf{S}}$。此外，$\boldsymbol{A}(i,\cdot)$和 $\boldsymbol{A}(\cdot,i)$分别表示 $\boldsymbol{A}$的第 i行和第 i列。

按照标准约定，$\mathbf{0}$表示全零列向量、行向量或矩阵；$\mathbf{I}$ 表示单位矩阵； $\boldsymbol{e}_i$ 表示一个标准基向量，除第 i个分量为 1 外，其余分量均为 0。标量 u 的复共轭为 u。向量 $\boldsymbol{v}$ 或矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的共轭转置为 $\boldsymbol{v}^*$ 或 $\boldsymbol{A}^*$。 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵为 $\boldsymbol{A}^{-1}$，共轭转置逆矩阵为 $\boldsymbol{A}^{-*}$，Moore-Penrose伪逆为 $\boldsymbol{A}^{+}$。

给定任意半正定矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$，两个向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 之间的 $\boldsymbol{A}$加权距离为

$$d_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = \left[(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v})^*\boldsymbol{A}(\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v})\right]^{1/2}.$$

向量 $\boldsymbol{u}$ 与向量集 V 之间的 $\boldsymbol{A}$加权距离为

$$d_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{u},\mathsf{V}) = \inf_{\boldsymbol{v}\in\mathsf{V}} d_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}).$$

最后，体积是 $\boldsymbol{A}$的正特征值之积，

$$\mathrm{vol}(\boldsymbol{A}) = \prod_{\lambda_i(\boldsymbol{A})>0} \lambda_i(\boldsymbol{A}).$$

当 $\boldsymbol{A}$ 严格正定时，体积与行列式相同。

2. 部分 Cholesky $+$ Vecchia $=$ Vecchia。 本节介绍稀疏 Cholesky 近似的框架（第 2.1 小节）。随后证明，部分 Cholesky $+$ Vecchia $=$Vecchia（第 2.2 小节），并讨论更广泛的影响（第 2.3 小节）。

2.1. 基于 Cholesky 分解的因子化近似。任意半正定矩阵都可以通过 Cholesky 分解或逆 Cholesky 分解精确表示。定义如下，示意图见 图2 。

Definition 2.1（主元 Cholesky 分解和逆 Cholesky 分解）。对于任意半正定矩阵 $\boldsymbol{A}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 和置换矩阵 $\boldsymbol{P}\in\{0,1\}^{n\times n}$，主元 *Cholesky* 分解和主元逆 *Cholesky* 分解定义如下

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^*\boldsymbol{P}^* \quad \textit{and} \quad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{C}^{-*}\boldsymbol{P}^*. \tag{2.1}$$

这里，$\boldsymbol{D}\in\mathbb{R}_+^{n\times n}$是一个取非负值的对角矩阵，而 $\boldsymbol{L}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 和 $\boldsymbol{C}\in\mathbb{C}^{n\times n}$ 是对角线上元素均为 *1* 的下三角矩阵。

Cholesky分解可以通过矩阵求逆 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{L}^{-1}$变换为逆Cholesky形式，反之亦然。

Cholesky 分解和逆 Cholesky 分解有助于快速进行矩阵运 $\boldsymbol{P}$， $\boldsymbol{D}$， $\boldsymbol{L}$或 $\boldsymbol{P}$， $\boldsymbol{D}$， $\boldsymbol{C}$一旦生成并存储这些因子，就无需再次访问矩阵 $\boldsymbol{A}$ 。任何矩阵-向量乘积 $\boldsymbol{v}\mapsto\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}$都可以通过依次将向量与分解(2.1)中的每个矩阵相乘来计算；而与 $\boldsymbol{C}^{-1}$ 或 $\boldsymbol{C}^{-*}$ 的乘法，则可以通过高效的三角方程求解来完成，无需显式计算逆矩阵。此外，任何相容的线性系统 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 都可以通过将输出向量 $\boldsymbol{b}$ 依次乘以一系列矩阵来求解，

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{L}^{-*}\boldsymbol{D}^{+}\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{P}^*\boldsymbol{b} \quad \text{or} \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{C}^*\boldsymbol{D}^{+}\boldsymbol{C}\boldsymbol{P}^*\boldsymbol{b}.$$

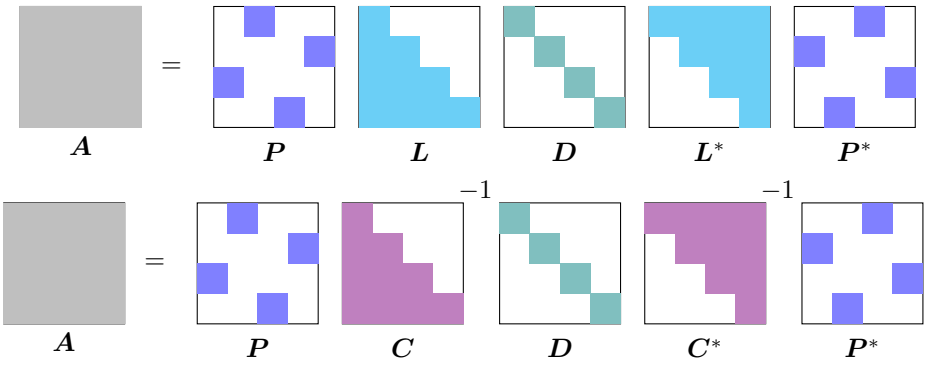

FIG. 2 *Cholesky and inverse Cholesky decompositions of a dense matrix* $\boldsymbol{A}$*. Filled boxes show entries that are allowed to be nonzero.*

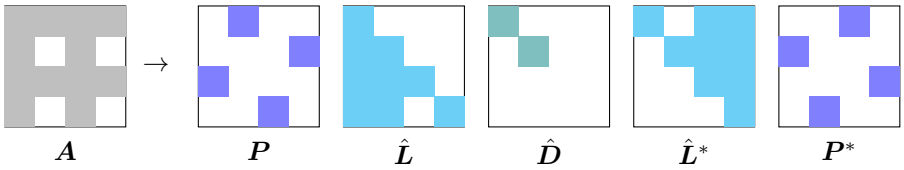

FIG. 3. *Partial pivoted Cholesky accesses the gray-colored entries of* $\boldsymbol{A}$*. Here, the approximation rank is* $r = 2$ *and the columns* $u_1 = 3$ *and* $u_2 = 1$ *are perfectly replicated.*

因此，矩阵向量乘积或线性求解的代价为 $\mathcal{O}(n^2)$次算术运算。

受 Cholesky 分解和逆 Cholesky 分解的启发，我们可以构造稀疏 Cholesky 近似或稀疏逆 Cholesky 近似

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{D}}\hat{\boldsymbol{L}}^*\boldsymbol{P}^* \quad \text{or} \quad \hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}\hat{\boldsymbol{C}}^{-1}\hat{\boldsymbol{D}}\hat{\boldsymbol{C}}^{-*}\boldsymbol{P}^*. \tag{2.2}$$

ˆ这里， $\boldsymbol{P}$ 是一个置换矩阵， $\boldsymbol{D}$ 是一个取非负值的对角矩阵，而ˆˆ$\boldsymbol{L}$或 $\boldsymbol{C}$ 是一个对角线上元素为 1 的稀疏下三角矩阵。稀疏模式$(\mathsf{S}_i)_{i=1}^n$是一系列稀疏索引集S$_i \subseteq \{1, \ldots, i-1\}$，用于描述 $\boldsymbol{L}$ 或 $\boldsymbol{C}$ 各行中哪些ˆˆ非对角元素可以为非零。

施加稀疏性带来三项好处。首先，稀疏近似因子可存储在 $\mathcal{O}(sn)$ 内存中。其次，矩阵-向量乘积和线性求解可通过 $\mathcal{O}(sn)$ 次算术运算完成，其中 s 是稀疏模式基数的上界：对于每个 $i = 1, \ldots\ldots, n$， $|\mathsf{S}_i| \leq s$。第三，在许多情况下，生成近似 $\boldsymbol{A}$ 的成本相对较低，因为只需检查 $\mathcal{O}(sn)$ 个或 $\mathcal{O}(s^2n)$ 个 $\boldsymbol{A}$的元素，并额外执行 $\mathcal{O}(s^2n)$ 次或 $\mathcal{O}(s^3n)$ 次算术运算。

小节 2.1.1 和2.1.2介绍了两种可在线性或次线性时间内生成的稀疏乔列斯基近似。

2.1.1. 部分主元 Cholesky。 部分主元 Cholesky 近似是半正定矩阵的一种常见秩揭示分解 [12]。定义如下，示意图见 图 3 。

DEFINITION 2.2（部分主元 Cholesky）。给定一个半正定矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$，其置换为 $\boldsymbol{P}$ 的部分主元 *Cholesky* 近似为

算法 2.1部分主元 Cholesky 近似

要求： 半正定矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$，可逐元素访问；置换-
矩阵 $\boldsymbol{P} \in \{0,1\}^{n\times n}$；近似秩 r
确保： 稀疏Cholesky近似 $\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}\hat{\boldsymbol{L}}\hat{\boldsymbol{D}}\hat{\boldsymbol{L}}^*\boldsymbol{P}^*$ 的因式分解形式
初始化稀疏矩阵 $\hat{\boldsymbol{F}} = \boldsymbol{P}$ 和 $\hat{\boldsymbol{D}} = \boldsymbol{0} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ ▷ $\hat{\boldsymbol{F}} = \boldsymbol{P}\hat{\boldsymbol{L}}$
对于 $i = 1, \ldots, r$ **do**
识别主元 $u_i \in \{1, \ldots, n\}$，其中 $\boldsymbol{P}(u_i, i) = 1$
$\boldsymbol{v} \leftarrow \boldsymbol{A}(\cdot, u_i) - \hat{\boldsymbol{F}}\hat{\boldsymbol{D}}\hat{\boldsymbol{F}}(u_i, \cdot)^*$
如果 $\boldsymbol{v}(u_i) > 0$ **那么**
$\hat{\boldsymbol{F}}(\cdot, i) \leftarrow \boldsymbol{v}/\boldsymbol{v}(u_i)$
$\hat{\boldsymbol{D}}(i, i) \leftarrow \boldsymbol{v}(u_i)$
结束如果
结束循环
$\hat{\boldsymbol{L}} = \boldsymbol{P}^*\hat{\boldsymbol{F}}$

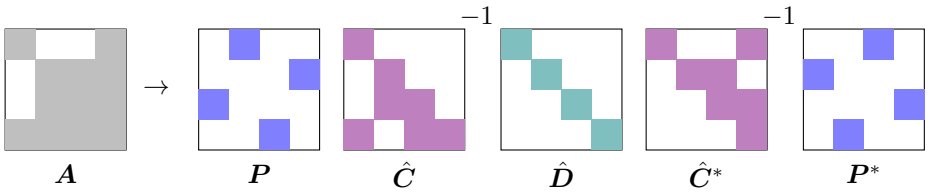

FIG. 4. *Vecchia approximation accesses the gray-colored entries in* $\boldsymbol{A}$. *The sparsity pattern is* $\mathsf{S}_1 = \emptyset$、$\mathsf{S}_2 = \emptyset$、$\mathsf{S}_3 = \{2\}$、$\mathsf{S}_4 = \{1, 3\}$.

ˆ ˆ ˆˆ近似秩 r 的稀疏 *Cholesky* 近似 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^*\boldsymbol{P}^*$，其中ˆ每一行 $\boldsymbol{L}(i, \cdot)$ 具有如下稀疏模式

$$\mathsf{S}_i = \{1, \ldots, r\} \cap \{1, \ldots i-1\}.$$

ˆ ˆˆ在此近似中，$\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^*$ 的前 r 行和列与置换矩阵 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}^*\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$的前 r 行˜和列相匹配，而 $\boldsymbol{D}$ 的最后 $n-r$ 个对角元素ˆ均为零。

算法 2.1 使用 $\mathcal{O}(rn)$ 次元素查找和额外的 $\mathcal{O}(r^2n)$ 次算术运算，生成一个部分 Cholesky 近似。该算法提取一系列主元 $u_1, \ldots, u_r$，它们由置换矩阵中的非零元素表示：对于每个 $i = 1, \ldots, r$，$\boldsymbol{P}(u_i, i) = 1$。随后，它生成一个秩为 r 的半正定矩阵，精确复现所选列 $u_1, \ldots, u_r$。该方法需要 $\mathcal{O}(r^2n)$ 次运算，因为每一步 i 都需要对前 i 个选定列形成线性组合。

长期以来，研究者一直致力于探索部分 Cholesky 近似中的主元选择策略。例如，“随机主元 Cholesky 分解”是一种随机化选择规则，可保证期望迹范数下的近似误差接近最优 [5]，，而列主元Cholesky则是另一种基于贪心选择的主元选择规则 [12]。详见第 4.1 小节，其中有更多分析和讨论。

2.1.2. Vecchia 近似。 Vecchia 近似以统计学家 Aldo Vecchia [28]，命名，是高斯过程文献中对严格正定协方差矩阵的一种常见近似。Vecchia 近似

算法 2.2传统 Vecchia 算法

要求： 具有逐元素访问功能的半正定矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$；置换-矩阵 $\boldsymbol{P} \in \{0,1\}^{n\times n}$；稀疏模式 $(\mathsf{S}_i)_{i=1}^n$

确保： Vecchia 近似 $\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}\hat{\boldsymbol{C}}^{-1}\hat{\boldsymbol{D}}\hat{\boldsymbol{C}}^{-*}\boldsymbol{P}^*$ 的因式分解形式

初始化稀疏矩阵 $\hat{\boldsymbol{C}} = \mathbf{I} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 和 $\hat{\boldsymbol{D}} = \mathbf{0} \in \mathbb{C}^{n\times n}$

对于 $i = 1, \ldots, n$ **执行** ▷ 可并行执行

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{M} & \boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{v}^* & \alpha \end{bmatrix} \leftarrow \begin{bmatrix} \boldsymbol{P}(\cdot, \mathsf{S}_i) & \boldsymbol{P}(\cdot, i) \end{bmatrix}^* \boldsymbol{A} \begin{bmatrix} \boldsymbol{P}(\cdot, \mathsf{S}_i) & \boldsymbol{P}(\cdot, i) \end{bmatrix}$$

求解半正定系统 $\boldsymbol{M}\boldsymbol{x} = -\boldsymbol{v}$

$\hat{\boldsymbol{C}}(i, \mathsf{S}_i) \leftarrow \boldsymbol{x}^*$

$\hat{\boldsymbol{D}}(i, i) \leftarrow \alpha + \boldsymbol{x}^*\boldsymbol{v}$

结束循环

不一定会复现 $\boldsymbol{A}$中的任何元素，但能保证以 Kaporin 条件数衡量时具有最优的近似精度（定理 3.1）。下文将给出其数学定义，该定义可推广至所有半正定矩阵；另请参见 图4以了解示意图。

DEFINITION 2.3（Vecchia 近似）。给定半正定矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$，采用置换 $\boldsymbol{P}$ 和稀疏模式$(\mathsf{S}_i)_{i=1}^n$ 的 *Vecchia* 近似是一种稀疏逆 *Cholesky* 近似$\hat{}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\hat{}\boldsymbol{C}^{-1}\hat{}\boldsymbol{D}\hat{}\boldsymbol{C}^{-*}\boldsymbol{P}^*$，其中每一行$\hat{}\boldsymbol{C}(i,\cdot)$ 具有稀疏模式S_i，且满足

$$\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{C}}(i, \mathsf{S}_i) & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{\boldsymbol{A}}(\mathsf{S}_i, \mathsf{S}_i) & \tilde{\boldsymbol{A}}(\mathsf{S}_i, i) \\ \tilde{\boldsymbol{A}}(i, \mathsf{S}_i) & \tilde{\boldsymbol{A}}(i, i) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \hat{\boldsymbol{D}}(i, i) \end{bmatrix} \quad \textit{for } \tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}^*\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}. \tag{2.3}$$

算法 2.2 展示了一种常规的 Vecchia 方法：通过迭代求解一个线性系统，确定每个行向量 $\boldsymbol{C}(i, \mathsf{S}_i)$，然后通过计算内积确定 $\boldsymbol{D}(i, i)$。该算法需要 $\mathcal{O}(s^2 n)$ 次元素查找和 $\mathcal{O}(s^3 n)$ 次额外算术运算，其中 s 是稀疏模式的上界：对于每个 $i = 1, \ldots\ldots, n$，其稀疏模式为 $\mathsf{S}_i| \leq s$。不过，当稀疏索引集 S_i 高度重叠时，可以更快地生成 Vecchia 近似。事实上，第 2.2 小节将介绍一种专门的 Vecchia 构造，其成本更低，只需 $\mathcal{O}(sn)$ 次元素查找和 $\mathcal{O}(s^2 n)$ 次算术运算。

Vecchia 近似中的设计选择包括置换 $\boldsymbol{P}$ 和稀疏模式（S_i）$_{i=1}^n$。历史上，研究人员使用最近邻基向量来选择稀疏模式，依据的是 $\boldsymbol{A}$ 加权距离 [24], ，并通过在同一距离 [15]中递归选择距离最远的基向量来生成置换矩阵。近期，Huan 等人 [17] 提出使用正交匹配追踪算法优化每个稀疏索引集 [25]。更多讨论请参见 第 4.2 小节。

2.2. 部分 Cholesky + Vecchia = Vecchia。 本文分析一种混合近似 [30, 4] 该近似结合了部分主元 Cholesky 和 Vecchia 近似。伪代码见 算法 2.3。我们将证明，这种近似等价于具有增广稀疏模式的 Vecchia 近似。

THEOREM 2.4（部分 Cholesky + Vecchia = Vecchia）。给定目标半正定矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$，考虑以下两部分近似。

1. 生成一个 $\boldsymbol{A}$ 的部分 *Cholesky* 近似，使用置换 $\boldsymbol{P}$，且$\hat{}$近似秩为 r。将其记为 $\boldsymbol{A}_{\text{part}}$。

算法 2.3部分 Cholesky +Vecchia 近似 [30, 4]

要求： 置换矩阵 $\boldsymbol{P} \in \{0,1\}^{n\times n}$；Cholesky 秩 r；Vecchia 稀疏模式 $(\mathsf{Q}_i)_{i=1}^n$；具有逐元素访问能力的半正定矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ **确保：** 因式分解形式的 Vecchia 近似 $\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}\hat{\boldsymbol{C}}^{-1}\hat{\boldsymbol{D}}\hat{\boldsymbol{C}}^{-*}\boldsymbol{P}^*$ 1: 生成具有置换 $\boldsymbol{P}$ 和近似秩 r 的部分 Cholesky 近似。

$$\hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}} = \boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{L}}_{11} & \\ \hat{\boldsymbol{L}}_{21} & \mathbf{I}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{D}}_{11} & \\ & \mathbf{0}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{L}}_{11} & \\ \hat{\boldsymbol{L}}_{21} & \mathbf{I}\end{bmatrix}^*\boldsymbol{P}^*,$$

其中，矩阵被划分为前 r 个和后 $n-r$ 个条目。

2: 令 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{A} - \hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}}$ 为部分 Cholesky 近似的残差。生成具有置换 $\boldsymbol{P}$ 和稀疏模式 $(\mathsf{Q}_i)_{i=1}^n$ 的 Vecchia 近似。

$$\hat{\boldsymbol{A}}_{\text{res}} = \boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\mathbf{I} & \\ \mathbf{0} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \\ & \hat{\boldsymbol{D}}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{I} & \\ \mathbf{0} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}\end{bmatrix}^{-*}\boldsymbol{P}^*.$$

3: 根据下式定义 $\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{D}$

$$\hat{\boldsymbol{C}} = \begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{L}}_{11}^{-1} & \\ -\hat{\boldsymbol{C}}_{22}\hat{\boldsymbol{L}}_{21}\hat{\boldsymbol{L}}_{11}^{-1} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}\end{bmatrix} \quad \text{and} \quad \hat{\boldsymbol{D}} = \begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{D}}_{11} & \\ & \hat{\boldsymbol{D}}_{22}\end{bmatrix}.$$

2. 生成残差 $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}_{\text{part}}$ 的 *Vecchia* 近似，并采用置换 $\boldsymbol{P}$ 与稀疏模式 $(\mathsf{Q}_i)_{i=1}^n$。将其记为 $\boldsymbol{A}_{\text{res}}$。

于是 $\boldsymbol{A}_{\text{part}} + \boldsymbol{A}_{\text{res}}$ 可改写为 $\boldsymbol{A}$ 的 *Vecchia* 近似，其置换为$\boldsymbol{P}$，并具有增广稀疏模式 $\mathsf{S}_i = \big(\{1,\dots,r\} \cup \mathsf{Q}_i\big) \cap \{1,\dots,i-1\}$。

证明。为简化记号，我们假设该置换为 $\boldsymbol{P} = \mathbf{I}$。否则，我们可以对 $\boldsymbol{A}$ 的指标进行置换，并将该证明应用于置换后的矩阵。我们分两步完成该证明。

步骤 1：$\hat{\boldsymbol{A}}$ 是一个稀疏逆乔列斯基近似。我们首先写 g

$$\hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}} = \begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{L}}_{11} & \\ \hat{\boldsymbol{L}}_{21} & \mathbf{I}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{D}}_{11} & \\ & \mathbf{0}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{L}}_{11} & \\ \hat{\boldsymbol{L}}_{21} & \mathbf{I}\end{bmatrix}^* \quad \text{and} \quad \boldsymbol{R} = \begin{bmatrix}\mathbf{0} & \\ & \boldsymbol{R}_{22}\end{bmatrix},$$

其中我们将矩阵划分为前 r 个与后 $n-r$ 个元素。根据定义 2.3，前 r 个元素在 Vecchia 对角因子中为零，因此可得

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{A}}_{\text{res}} &= \begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{C}}_{11} & \\ \hat{\boldsymbol{C}}_{21} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \\ & \hat{\boldsymbol{D}}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{C}}_{11} & \\ \hat{\boldsymbol{C}}_{21} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}\end{bmatrix}^{-*} \\ &= \begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{C}}_{11}^{-1} & \\ -\hat{\boldsymbol{C}}_{22}^{-1}\hat{\boldsymbol{C}}_{21}\hat{\boldsymbol{C}}_{11}^{-1} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}^{-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \\ & \hat{\boldsymbol{D}}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{C}}_{11}^{-1} & \\ -\hat{\boldsymbol{C}}_{22}^{-1}\hat{\boldsymbol{C}}_{21}\hat{\boldsymbol{C}}_{11}^{-1} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}^{-1}\end{bmatrix}^* \\ &= \begin{bmatrix}\mathbf{I} & \\ \mathbf{0} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \\ & \hat{\boldsymbol{D}}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathbf{I} & \\ \mathbf{0} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}\end{bmatrix}^{-*}.\end{aligned}$$

我们通过将下三角因子中的前 r 列设为标准基向量，简化了残差 Vecchia 近似的公式。因此，

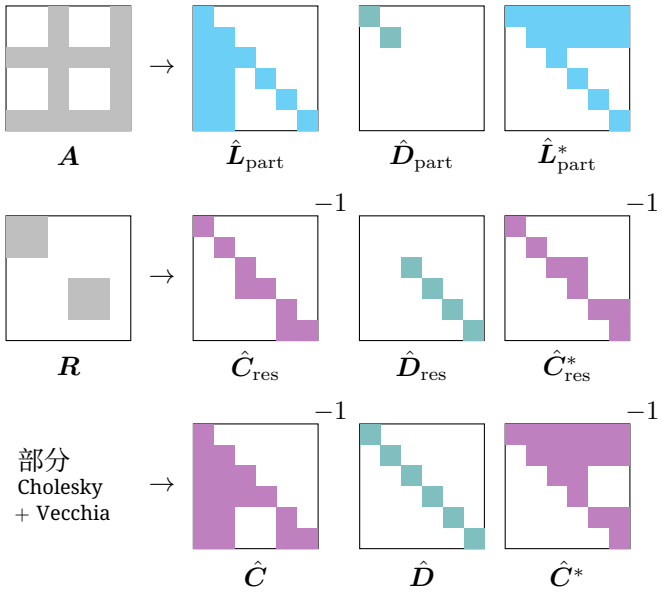

FIG. 5。 *First row: partial Cholesky accesses the gray entries of* $\boldsymbol{A}$ *to generate an approximation* ^ $\boldsymbol{A}_{\text{part}}$ = ^$\boldsymbol{L}_{\text{part}}$ ^$\boldsymbol{D}_{\text{part}}$^$\boldsymbol{L}^*_{\text{part}}$. *Second row: Vecchia accesses the gray entries of* $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{A} -$ ^$\boldsymbol{A}_{\text{part}}$ *to generate an approximation* $\boldsymbol{A}_{\text{res}} = \boldsymbol{C}_{\text{res}}^{-1}\boldsymbol{D}_{\text{res}}\boldsymbol{C}_{\text{res}}^{-*}$. *Third row: partial Cholesky + Vecchia yields an* ^^^^ *improved approximation* $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{C}^{-*}$. *3*
^^^^行的稀疏模式是第***1***行和第***2***行的稀疏模式的并集。

我们可以写作

$$
\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{A}} &= \hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}} + \hat{\boldsymbol{A}}_{\text{res}} \\
&= \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{L}}_{11} & \\ \hat{\boldsymbol{L}}_{21} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{D}}_{11} & \\ & \hat{\boldsymbol{D}}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{L}}_{11} & \\ \hat{\boldsymbol{L}}_{21} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}^{-1} \end{bmatrix}^* \\
&= \underbrace{\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{L}}_{11}^{-1} & \\ -\hat{\boldsymbol{C}}_{22}\hat{\boldsymbol{L}}_{21}\hat{\boldsymbol{L}}_{11}^{-1} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22} \end{bmatrix}^{-1}}_{\hat{\boldsymbol{C}}} \underbrace{\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{D}}_{11} & \\ & \hat{\boldsymbol{D}}_{22} \end{bmatrix}}_{\hat{\boldsymbol{D}}} \underbrace{\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{L}}_{11}^{-1} & \\ -\hat{\boldsymbol{C}}_{22}\hat{\boldsymbol{L}}_{21}\hat{\boldsymbol{L}}_{11}^{-1} & \hat{\boldsymbol{C}}_{22} \end{bmatrix}^{-*}}_{\hat{\boldsymbol{C}}}.
\end{aligned}
$$

^ 该推导表明**的稀疏模式 $\boldsymbol{A}$ 是以下稀疏模式的并集**^ ^**：** $\boldsymbol{A}_{\text{part}}$ **和** $\boldsymbol{A}_{\text{res}}$。参见图5了解示意图。

^^ 步骤 2： $\boldsymbol{A}$ 是 Vecchia 近似。要证明 $\boldsymbol{A}$ 是 Vecchia 近似，我们需要验证 $i = 1$、……、n满足以下等式：

$$
(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A})(i, \mathsf{S}_i) = 0 \quad \text{and} \quad (\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A})(i,i) = \hat{\boldsymbol{D}}(i,i). \tag{2.4}
$$

^ 首先考虑指标 $i \le r$。由于 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}_{\text{part}}$ 的前 r 行相同，我们可以写成

$$
\begin{aligned}
(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A})(i,\cdot) &= (\hat{\boldsymbol{C}}\hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}})(i,\cdot) \\
&= (\hat{\boldsymbol{L}}_{11}^{-1}\hat{\boldsymbol{L}}_{11}\hat{\boldsymbol{D}}_{11})(i,\cdot)\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{L}}_{11}^* & \hat{\boldsymbol{L}}_{21}^* \end{bmatrix} \\
&= \hat{\boldsymbol{D}}(i,i)\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{L}}_{11}(\cdot,i)^* & \hat{\boldsymbol{L}}_{21}(\cdot,i)^* \end{bmatrix}.
\end{aligned}
$$

由于前 $i-1$ 个元素 $\hat{}\ \boldsymbol{L}_{11}(\cdot,i)$ 为零，且第 i个元素为一，则前 $\hat{}\ \hat{}i-1$ 个元素 $(\boldsymbol{CA})(i,\cdot)$ 为零，且第 i个元素为 $\boldsymbol{D}(i,i)$，从而证实 (2.4)。接下来考虑指标 $i \geq r+1$。我们进行计算

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A})(i,\cdot) &= \hat{\boldsymbol{C}}(i,\cdot)(\hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}} + \boldsymbol{R}) \\ &= \hat{\boldsymbol{C}}_{22}(i-r,\cdot)\begin{bmatrix}-\hat{\boldsymbol{L}}_{21}\hat{\boldsymbol{L}}_{11}^{-1} & \mathbf{I}\end{bmatrix}\left(\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{L}}_{11}\\ \hat{\boldsymbol{L}}_{21}\end{bmatrix}\hat{\boldsymbol{D}}_{11}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{L}}_{11}^{*}\hat{\boldsymbol{L}}_{21}^{*}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix}\mathbf{0} & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \boldsymbol{R}_{22}\end{bmatrix}\right) \\ &= \hat{\boldsymbol{C}}_{22}(i-r,\cdot)\begin{bmatrix}\mathbf{0} & \boldsymbol{R}_{22}\end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{C}}_{21}(i-r,\cdot) & \hat{\boldsymbol{C}}_{22}(i-r,\cdot)\end{bmatrix}\boldsymbol{R}.\end{aligned}$$

由于 $\begin{bmatrix}\hat{}\boldsymbol{C}_{21}(i-r,\cdot) & \hat{}\boldsymbol{C}_{22}(i-r,\cdot)\end{bmatrix}$ 是 iVecchia 近似生成的第 行向量 $\boldsymbol{R}$，我们确认 (2.4) 并完成证明。 □

2.3. 含义。 定理 2.4表明，先前论文中出现的部分 Cholesky +Vecchia 方法 [30, 4], 实际上是在构造一种 Vecchia 近似，其中前 个 r 索引包含在稀疏模式中。下面列出两个重要含义。

首先，由于 Vecchia 近似的最优性（定理 3.1），部分 Cholesky +Vecchia 方法 在 *Kaporin* 条件数意义下具有理论最优性。此外，部分 Cholesky + Vecchia 方法可以理解为一种在实践中应用 Vecchia 近似的工具箱。在最简单的情况下，我们可以构建具有平凡稀疏模式的部分 Cholesky +Vecchia 近似： $\mathsf{Q}_i = \emptyset$ 对于 $i = 1, \ldots, n$。这种方法可归结为一种 部分 *Cholesky+* 对角矩阵 近似。

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}} + \hat{\boldsymbol{A}}_{\text{res}} = \hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}} + \operatorname{diag}(\boldsymbol{A} - \hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}}).$$

我们还可以构造一种近似，在 Vecchia 残差分量中纳入更多非零元素，从而改善 Kaporin 条件数，并提高线性代数计算的准确性。

其次，部分 Cholesky +Vecchia 方法是一种计算效率高的Vecchia 近似构造方法。假设部分 Cholesky 分量的秩为 r，且 Vecchia 残差分量的稀疏度有界

$$\max_{1\leq i\leq n} |\mathsf{Q}_i| = \mathcal{O}(r^{1/2}).$$

那么，部分 Cholesky + Vecchia 近似可通过 $\mathcal{O}(rn)$ 次元素查找和 $\mathcal{O}(r^2 n)$ 次运算构造，其成本远低于使用 算法 2.2.$(r^2 n)$ 次元素查找和 $\mathcal{O}(r^3 n)$ 次运算的传统 Vecchia 构造成本

3. Kaporin 最优性理论。 在本节中，我们提出并回答：“Vecchia 近似在何种意义上是最优的？”Vecchia 最优性理论此前已在论文 [28, 18, 2, 29, 22] 中得到发展。在此，我们回顾这一最优性理论，并将其推向新的方向，同时特别关注 Kaporin 条件数（定义 1.1）。 第 3.1 小节 表明，Vecchia 近似优化了 Kaporin 条件数。随后，第 3.2 小节 和 第 3.3 小节 分别探讨其对线性方程求解和行列式计算的影响。

3.1. Vecchia 最优性定理。 Kaporin [18, 附录 A.3]证明了，Vecchia 近似优化了 κ_{Kap}，适用于任意给定的稀疏模式，并假设目标矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是严格正定的。下一个结果将 Kaporin 的最优性定理推广到任意半正定目标矩阵 $\boldsymbol{A}$。该证明略长（三页），并在 第 A 节中给出。

THEOREM 3.1（Vecchia 的最优性）。对于任意半正定矩阵$\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$, *Vecchia* 近似 $\hat{}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\hat{}\boldsymbol{C}^{-1}\hat{}\boldsymbol{D}\hat{}\boldsymbol{C}^{-*}\boldsymbol{P}^*$ 是具有置换 $\boldsymbol{P}$ 和稀疏模式 $(\mathsf{S}_i)_{i=1}^n$ 的逆 *Cholesky* 近似，且其 *Kaporin* 条件数最小。如果 *Vecchia* 近似的值域与 $\boldsymbol{A}$相同，则 *Kaporin* 条件数为

$$\kappa_{\mathrm{Kap}} = \prod_{d_{\tilde{\boldsymbol{A}}}(\boldsymbol{e}_i,\operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j<i})>0} \frac{d_{\tilde{\boldsymbol{A}}}\big(\boldsymbol{e}_i,\operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{S}_i}\big)^2}{d_{\tilde{\boldsymbol{A}}}\big(\boldsymbol{e}_i,\operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j<i}\big)^2}, \qquad \textit{for } \tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}^*\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}. \tag{3.1}$$

定理 3.1有三个重要推论。首先，假设存在具有给定稀疏模式 (S_i)的精确逆 Cholesky 分解$_{i=1}^n$。那么，Vecchia 近似可实现最佳的 Kaporin 条件数 $\kappa_{\mathrm{Kap}} = 1$。$\hat{}$ 在这种情况下，Vecchia 的定义保证 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}$ 并实现完美恢复。

其次，当无法实现完美恢复时，定理 3.1 给出了 Kaporin 条件数的显式表达式 (3.1)。证明展示了如何以多种方式写出(3.1)。

$$\kappa_{\mathrm{Kap}} = \frac{\operatorname{vol}(\hat{\boldsymbol{A}})}{\operatorname{vol}(\boldsymbol{A})} = \frac{\operatorname{vol}(\hat{\boldsymbol{D}})}{\operatorname{vol}(\boldsymbol{D})} = \prod_{\boldsymbol{D}(i,i)>0} \frac{\hat{\boldsymbol{D}}(i,i)}{\boldsymbol{D}(i,i)},$$

其中，$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{C}^{-*}\boldsymbol{P}^*$ 是目标矩阵的精确逆 Cholesky 分解。此外，对角元素 $\boldsymbol{D}(i,\ i)$ 和 $\hat{}\boldsymbol{D}(i,\ i)$ 等于平方 $\tilde{\boldsymbol{A}}$-加权距离

$$\hat{\boldsymbol{D}}(i,i) = d_{\tilde{\boldsymbol{A}}}(\boldsymbol{e}_i,\operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{S}_i})^2 \quad \text{and} \quad \boldsymbol{D}(i,i) = d_{\tilde{\boldsymbol{A}}}(\boldsymbol{e}_i,\operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j<i})^2.$$

˜平方 $\boldsymbol{A}$-加权距离十分重要，因为它们启发了多种优化策略，用于最小化 Kaporin 条件数；我们将在第 4 节中探讨这些策略。

最后，定理 3.1 的证明展示了如何避免 $\kappa_{\mathrm{Kap}} = \infty$这一不良情形。具体而言，对于每个满足 i的“不良”指标

$$d_{\tilde{\boldsymbol{A}}}(\boldsymbol{e}_i,\operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j<i}) = 0,$$

我们必须选择一个足够大的稀疏索引集 S_i，以满足

$$d_{\tilde{\boldsymbol{A}}}(\boldsymbol{e}_i,\operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{S}_i}) = 0. \tag{3.2}$$

如果 (3.2) 不成立，则无法生成与 $\boldsymbol{A}$值域相同的稀疏逆乔列斯基近似。值得庆幸的是，只有当 $\boldsymbol{A}$ 秩亏时才会存在这些不良指标——在满秩情形下，Vecchia 近似总会得到 $\kappa_{\mathrm{Kap}} < \infty$。

3.2. 线性方程求解。现在我们展示如何使用因式分解矩阵近似 $\hat{}\boldsymbol{A}$ 来加速线性代数计算，其性能以 κ_{Kap} 为界。

为了求解线性系统 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 或更一般的最小二乘问题 $\min_{\boldsymbol{x}}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|^2$，我们可以先给出一个初始猜测 $\boldsymbol{x}_0$，再通过计算来改进这个猜测

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{x}_0+\hat{\boldsymbol{A}}^{+}[\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0].$$

这种计算可以非常快。在 $\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{0}$的情况下，我们甚至不需要检查 $\boldsymbol{A}$ 中的任何元素，只需对因子化近似 $\boldsymbol{A}$进行一次线性求解。我们认为，以下命题给出了近似直接求解的一个新误差界，证明见B.1小节。

PROPOSITION 3.2（线性系统的近似直接求解器）。若 $\hat{}\boldsymbol{A}$ 经过归一化，使得 $\mathrm{rank}\left(\boldsymbol{A}\,\hat{}\boldsymbol{A}^{+}\right)=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$，则 $\hat{}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_0+\hat{}\boldsymbol{A}^{+}[\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0]$ 满足

$$\frac{\|\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}^2}{\|\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}^2}\le 2\,\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})\log(\kappa_{\mathrm{Kap}}).$$

此处，$\boldsymbol{x}_\star=\boldsymbol{A}^{+}\boldsymbol{b}$ 是$\min_{\boldsymbol{x}}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|^2$的最小范数解。

当 命题3.2中的归一化假设对于 Vecchia 近似总是成立时，$\kappa_{\mathrm{Kap}}<\infty$。然而遗憾的是，命题3.2 无法保证相较于初始猜测 $\boldsymbol{x}_0$ 有任何改进，除非 Kaporin 条件数极小，即 $\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})<1/\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$。

当近似直接求解器无法为线性系统给出准确解时，我们可以改用预条件共轭梯度法（预条件共轭梯度，[13, 第11.5]节）迭代求解该线性系统。从初始猜测 $\boldsymbol{x}_0$出发，预条件共轭梯度计算初始残差 $\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$ 以及初始搜索方向 $\boldsymbol{d}_1=\hat{}\boldsymbol{A}^{+}\boldsymbol{r}_0$。在每一步 $t=1,2,\ldots\ldots$，预条件共轭梯度按下式更新迭代值与残差

$$\begin{cases}\boldsymbol{x}_t=\boldsymbol{x}_{t-1}+\alpha_t\boldsymbol{d}_t,\\ \boldsymbol{r}_t=\boldsymbol{r}_{t-1}-\alpha_t\boldsymbol{A}\boldsymbol{d}_t.\end{cases}$$

步长与搜索方向按下式选取

$$\alpha_t=\frac{\boldsymbol{r}_{t-1}^{*}\hat{\boldsymbol{A}}^{+}\boldsymbol{r}_{t-1}}{\boldsymbol{d}_i^{*}\boldsymbol{A}\boldsymbol{d}_i}\quad\text{and}\quad\boldsymbol{d}_{t+1}=\hat{\boldsymbol{A}}^{+}\boldsymbol{r}_t+\frac{\boldsymbol{r}_t^{*}\hat{\boldsymbol{A}}^{+}\boldsymbol{r}_t}{\boldsymbol{r}_{t-1}^{*}\hat{\boldsymbol{A}}^{+}\boldsymbol{r}_{t-1}}\boldsymbol{d}_t.$$

我们可以对预条件共轭梯度运行任意次数的迭代，每次迭代都会得到对 $\boldsymbol{x}_\star=\boldsymbol{A}^{+}\boldsymbol{b}$ 越来越好的估计。预条件共轭梯度每次迭代只需与 $\boldsymbol{A}$ 做一次乘法，并^对 $\boldsymbol{A}$做一次线性求解。

Axelsson与Kaporin [2, 定理4.3] 以 κ_{Kap}界定了预条件共轭梯度的误差（假设迭代次数为偶数），并且B.2小节将其证明推广至任意偶数或奇数次迭代。

PROPOSITION 3.3（预条件共轭梯度法的收敛性 [2]）。在每次迭代 $t\ge 0$ 中，预条件共轭梯度法生成的迭代解满足

$$\frac{\|\boldsymbol{x}_t-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}^2}{\|\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}^2}\le\left[\frac{3\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})}{t}\right]^{t}.\tag{3.3}$$

这里，$\boldsymbol{x}_\star=\boldsymbol{A}^{+}\boldsymbol{b}$ 是 $\min_{\boldsymbol{x}}\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|^2$ 的最小范数解。

命题3.3保证了超线性收敛，其性能甚至强于标准共轭梯度法的线性收敛界，例如，[13, 公式11.3。27]。在大规模应用中，超线性收敛主要出现在后期迭代阶段，此时预条件共轭梯度已经达到较高精度 [2]。

ˆ3.3. 行列式计算。当 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 严格正定时，ˆ我们可以使用 det($\boldsymbol{A}$) 作为 det($\boldsymbol{A}$) 的估计量。对于 Vecchia 近似 $\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{P}\hat{\boldsymbol{C}}^{-1}\hat{\boldsymbol{D}}\hat{\boldsymbol{C}}^{-*}\boldsymbol{P}^*$，这一计算非常快速，因为

$$\det(\hat{\boldsymbol{A}}) = \det(\hat{\boldsymbol{D}}) = \prod_{i=1}^{n} \hat{\boldsymbol{D}}(i,i).$$

下一个命题精确描述了行列式估计中的误差。

Proposition 3.4（行列式的近似直接求解器）。如果 $\boldsymbol{A}$ 和 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 均为严格正定，且 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 经过归一化，使得 $\operatorname{tr}\big(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1}\big) = n$，那么

$$\log\left(\frac{\det \hat{\boldsymbol{A}}}{\det \boldsymbol{A}}\right) = \log(\kappa_{\mathrm{Kap}}).$$

证明。我们将 Kaporin 条件数改写为

$$\kappa_{\mathrm{Kap}} = \frac{\big(\frac{1}{n}\operatorname{tr}(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1})\big)^n}{\det(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1})} = \frac{1}{\det(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1})} = \frac{\det(\hat{\boldsymbol{A}})}{\det(\boldsymbol{A})},$$

使用迹归一化 $\operatorname{tr}\big(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1}\big) = n$。 □

命题 3.4 中的归一化假设 对于 Vecchia 近似总是成立，只要 $\boldsymbol{A}$ 是严格正定的。因此，Vecchia 行列式是 $\boldsymbol{A}$真实行列式的上界。不过请注意，在已知元素的条件下，Vecchia 近似并不总能给出 $\boldsymbol{A}$行列式的最紧上界：最紧上界由最大熵问题的解给出；参见 [6, 第 161]页。

当不够精确时，我们可以通过乘法修正项来改进该近似。为此，我们写作

$$\log\left(\frac{\det \boldsymbol{A}}{\det \hat{\boldsymbol{A}}}\right) = \log\big(\det\big(\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\big)\big) = \operatorname{tr}\big(\log\big(\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\big)\big).$$

这里，矩阵对数定义为对矩阵特征值取对数。我们可以通过抽取方向均匀随机的独立长度为 $\sqrt{n}$ 的向量来近似矩阵对数的迹，$\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_t$，并构造一个随机迹估计量 [27]:

$$s_t = \frac{1}{t}\sum_{i=1}^{t} \boldsymbol{u}_i^* \log\big(\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\big)\boldsymbol{u}_i.$$

假设矩阵对数是精确计算的，该估计量是无偏的，并且随着 $t \to \infty$而收敛。接下来的新命题给出了均方误差的界，证明见B.3 小节。

Proposition 3.5（随机行列式估计）。假设 $\boldsymbol{A}$ 和 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 是严格正定的 $n \times n$ 矩阵，其 *Kaporin* 条件数为 $\kappa_{\mathrm{Kap}} \le \mathrm{e}^n$。假设 $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_t$ 是长度为 $\sqrt{n}$ 且方向均匀随机的独立向量，并令 $s_t = \frac{1}{t}\sum_{i=1}^{t} \boldsymbol{u}_i^* \log\big(\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\big)\boldsymbol{u}_i$。那么

$$\mathbb{E}\left|\log\left(\frac{\mathrm{e}^{s_t}\det \hat{\boldsymbol{A}}}{\det \boldsymbol{A}}\right)\right|^2 \le \frac{4\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})}{t}. \tag{3.4}$$

若 $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ 是复值的，则将 4 替换为 8 后，界仍然成立；若 $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_n$ 是实值的，也有相同的界。

命题 3.5 表明，当迭代次数达到 $t \geq 4/\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})$ 时，随机行列式估计量的均方误差便小于近似直接行列式估计量。

在随机行列式估计中，我们需要计算以下形式的项：

$$\boldsymbol{u}_i^* \log(\boldsymbol{B})\boldsymbol{u}_i, \qquad \text{where } \boldsymbol{B} = \hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}.$$

要计算每一项，我们可以先为 Krylov 子空间生成一组标准正交基 $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{C}^{n\times m}$

$$K_m(\boldsymbol{B}, \boldsymbol{u}_i) = \operatorname{span}\{\boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_i, \ldots, \boldsymbol{B}^m\boldsymbol{u}_i\}.$$

然后，我们可以返回 Krylov-Ritz 近似 [11]

$$\boldsymbol{u}_i^* \log(\boldsymbol{B})\boldsymbol{u}_i \approx \boldsymbol{u}_i^*\boldsymbol{Q}\log(\boldsymbol{Q}^*\boldsymbol{B}\boldsymbol{Q})\boldsymbol{Q}^*\boldsymbol{u}_i.$$

我们通过直接对矩阵特征值取对数来计算 $\log(\boldsymbol{Q}^*\boldsymbol{B}\boldsymbol{Q})$。此时，计算成本主要来自 m 次矩阵-向量乘法，需要 $\mathcal{O}(mn^2)$ 次算术运算。不同深度参数下 Krylov-Ritz 近似的比较请参见C 节 $m \in \{100, 1000\}$。

4. 优化策略。 本节研究不同的稀疏模式，旨在最小化 Kaporin 条件数。首先，我们考察可用于部分 Cholesky $+$ 对角近似（第 4.1 小节）的不同主元集。随后，我们向 Vecchia 残差分量中添加非零元素，以进一步降低 Kaporin 条件数（第 4.2 小节）。

4.1. 部分 Cholesky $+$ 对角矩阵。 部分 Cholesky $+$ 对角近似的 Kaporin 条件数在有限时可写为

$$\kappa_{\mathrm{Kap}}(\mathsf{R}) = \prod_{d_{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{e}_i, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}})>0} \frac{d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_i, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big)^2}{d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_i, \operatorname{span}\big(\{\boldsymbol{e}_j\}_{j<i} \cup \{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big)^2}. \tag{4.1}$$

$\kappa_{\mathrm{Kap}}(\mathsf{R})$ 仅取决于部分 Cholesky 主元集 $\mathsf{R} = \{u_1, \ldots, u_r\}$。下面我们将探讨几种选择主元集以最小化 Kaporin 条件数的策略。

4.1.1. 自适应搜索。 我们首先介绍一种直接优化策略，称为自适应搜索。自适应搜索从空主元集 $\mathsf{R} = \emptyset$ 开始。在每个阶段，该算法都会尝试所有可用的主元，并引入一个能够使 Kaporin 条件数降幅最大的主元。

$$\mathsf{R} \leftarrow \mathsf{R} \cup \{i\}, \quad \text{where } i \in \operatorname*{argmin}_{1\leq j\leq n} \kappa_{\mathrm{Kap}}(\mathsf{R} \cup \{j\}) \qquad [\text{自适应搜索}].$$

自适应搜索可以得到高质量的近似，但代价高昂。每个阶段都需要处理所有矩阵条目，因此生成基数为 r 的主元集的成本为 $\mathcal{O}(rn^2)$ 次算术运算。

4.1.2. 自适应采样。 接下来，我们考虑一类成本更低的优化策略，我们称之为自适应采样。自适应采样方法常用于为基于列的矩阵近似选择主元，包括部分 Cholesky + Vecchia 近似 [30, 4]。每种自适应采样算法都基于一条选择规则，该规则优先选择与已选主元“相距较远”的主元。最常见的主元选择规则定义如下。

- 在“随机主元 Cholesky 分解”（RPC，[5]）中，每个新主元都从以下自适应概率分布中随机采样。

$$\mathsf{R} \leftarrow \mathsf{R} \cup \{i\}, \quad \text{with } \operatorname{prob}(i) = \frac{d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_i, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big)^2}{\sum_{j=1}^n d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_j, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big)^2}. \tag{RPC}$$

- 在“平方距离采样”（SDS，[1]）中，每个新主元以略有不同的概率随机采样。

$$\mathsf{R} \leftarrow \mathsf{R} \cup \{i\}, \quad \text{with } \operatorname{prob}(i) = \frac{d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_i, \{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big)^2}{\sum_{j=1}^n d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_j, \{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big)^2}. \tag{SDS}$$

- 在“列主元乔列斯基分解”（CPC，[16]）中，每个新主元都使以下距离最大化。

$$\mathsf{R} \leftarrow \mathsf{R} \cup \{i\}, \quad \text{where } i \in \operatorname*{argmax}_{1\le j\le n} d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_j, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big). \tag{CPC}$$

- 最后，在“最远点采样”（FPS，[14]）中，我们采用略有不同的最大距离规则。

$$\mathsf{R} \leftarrow \mathsf{R} \cup \{i\}, \quad \text{where } i \in \operatorname*{argmax}_{1\le j\le n} d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_j, \{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big). \tag{FPS}$$

如果 CPC 或 FPS 中存在并列情况，我们可以采用任意平局决胜规则，例如均匀随机选择。

每种自适应采样算法的执行成本都很低。回顾一下，部分 Cholesky 近似的构造成本为 $\mathcal{O}(rn)$ 次元素查找，另需 $\mathcal{O}(r^2 n)$ 次算术运算。为主元实现自适应采样规则还会额外增加 $\mathcal{O}(n)$ 次元素查找和 $\mathcal{O}(rn)$ 次运算，因此实际上几乎没有额外成本。

大量研究成果 [5, 7, 9, 1, 19, 14] 表明，自适应采样算法如何最小化以下距离泛函。

$$\begin{aligned}
\eta_{\mathrm{RPC}}(\mathsf{R}) &= \sum_{i=1}^n d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_i, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big)^2, \\
\eta_{\mathrm{SDS}}(\mathsf{R}) &= \sum_{i=1}^n d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_i, \{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big)^2, \\
\eta_{\mathrm{CPC}}(\mathsf{R}) &= \max_{1\le i\le n} d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_i, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big), \text{ or} \\
\eta_{\mathrm{FPS}}(\mathsf{R}) &= \max_{1\le i\le n} d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_i, \{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{R}}\big).
\end{aligned} \tag{4.2}$$

近似质量严格界定如下。

THEOREM 4.1（自适应采样保证）。对于任意半正定矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ 以及任意基数为 $r \le$ 秩$(\boldsymbol{A})$的情形，自适应采样会生成一个随机或确定性的主元集 $\mathsf{R} \subseteq \{1,\dots,n\}$，其基数为 $|\mathsf{R}| = r$，并满足

$$\frac{\mathbb{E}\big[\eta_{\mathrm{RPC}}(\mathsf{R})\big]}{\min_{|\mathsf{S}|\le r}\eta_{\mathrm{RPC}}(\mathsf{S})} \le 2^r, \qquad \text{[RPC]}$$

$$\frac{\eta_{\mathrm{CPC}}(\mathsf{R})}{\min_{|\mathsf{S}|\le r}\eta_{\mathrm{CPC}}(\mathsf{S})} \le r!, \qquad \text{[CPC]}$$

$$\frac{\mathbb{E}\big[\eta_{\mathrm{SDS}}(\mathsf{R})\big]}{\min_{|\mathsf{S}|\le r}\eta_{\mathrm{SDS}}(\mathsf{S})} \le 5(\log r + 2), \qquad \text{[SDS]}$$

$$\frac{\eta_{\mathrm{FPS}}(\mathsf{R})}{\min_{|\mathsf{S}|\le r}\eta_{\mathrm{FPS}}(\mathsf{S})} \le 2. \qquad \text{[FPS]}$$

距离泛函 η_{RPC}，η_{CPC}，η_{SDS}，以及 η_{FPS} 在(4.2)中定义。

证明。RPC 误差界为 [5, 引理 5.5]。CPC 误差界可由 [7, 定理 1] 在极限 $p \to \infty$下推出；另见 [9, 定理 2]。SDS 误差界为 [1,定理 3.1]，，其近似因子因 [19, 引理 4.1]而得到改进。FPS 误差界为 [14,定理 2.2]。 □

定理 4.1为自适应采样算法提供了严格的近似保证。近似因子仅取决于所选主元的数量 r，而与目标矩阵的维度 n 无关。然而，这一理论的一个不足之处在于，自适应采样算法优化的泛函与 Kaporin 条件数不同。根据实证结果，自适应采样算法产生的近似不如自适应搜索精确（第 5 节）。

在实际应用中采用自适应采样的主要原因是速度快；它远快于自适应搜索。未来，我们理想的目标是开发出与自适应采样一样快速、且能直接针对 Kaporin 条件数进行优化的主元选择器。

4.2. 部分 Cholesky + Vecchia。 通过引入具有非零稀疏模式（Q_i）的 Vecchia 残差分量，我们可以改进部分 Cholesky +对角近似$_{i=1}^{n}$。部分 Cholesky + Vecchia 近似的 Kaporin 条件数在有限时可写为

$$\kappa_{\mathrm{Kap}} = \prod_{d_{\tilde{\boldsymbol{R}}}(\boldsymbol{e}_i,\,\mathrm{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j<i})>0} \frac{d_{\tilde{\boldsymbol{R}}}\big(\boldsymbol{e}_i, \mathrm{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{Q}_i}\big)^2}{d_{\tilde{\boldsymbol{R}}}\big(\boldsymbol{e}_i, \mathrm{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j<i}\big)^2}, \qquad \text{where } \tilde{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{P}^*\boldsymbol{R}\boldsymbol{P}. \tag{4.3}$$

κ_{Kap} 取决于一组平方加权距离的乘积，其中加权矩阵˜是部分 Cholesky 近似 $\boldsymbol{R}$ 得到的主元化残差矩阵。

为了优化 Kaporin 条件数，理想情况下，我们会选择每个稀疏索引集 Q_i，使距离

$$d_{\tilde{\boldsymbol{R}}}\big(\boldsymbol{e}_i, \mathrm{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{Q}_i}\big) \tag{4.4}$$

尽可能小。不幸的是，寻找一个基数有界的稀疏索引集$|\mathsf{Q}_i| \le q$，使距离达到精确最小值，是 NP 难的 [20, 定理 1]。尽管如此，˜我们仍可考虑一些近似方法，它们可能适用于实践中 $\boldsymbol{R}$ 出现的矩阵。

近期 Vecchia 文献中出现的两种稀疏性选择器是 最近邻搜索 [15] 和 正交匹配追踪 [17]。这两种方法都从一个空的稀疏索引集 $\mathsf{Q}_i = \emptyset$开始。然后，在我们的场景中，最近邻搜索会递归地添加一个新索引 以求解以下距离最小化问题。

$$\mathsf{Q}_i \leftarrow \mathsf{Q}_i \cup \{j\}, \quad \text{where } j \in \operatorname*{argmin}_{k \notin \mathsf{Q}_i} d_{\tilde{\boldsymbol{R}}}(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_k) \qquad \text{[NN search]}. \tag{4.5}$$

相比之下, 正交匹配追踪使用了稍有不同的索引选择规则 .

$$\mathsf{Q}_i \leftarrow \mathsf{Q}_i \cup \{j\}, \quad \text{where } j \in \operatorname*{argmin}_{k \notin \mathsf{Q}_i} d_{\tilde{\boldsymbol{R}}}\big(\boldsymbol{e}_i, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j \in \mathsf{Q}_i \cup \{k\}}\big) \qquad \text{[OMP]}. \tag{4.6}$$

比较这两种方法，OMP 的优势在于它直接针对 Kaporin 条件数中的距离。然而，OMP 并无先验保证˜，除非 $\boldsymbol{R}$ 的非对角元素快速衰减 [25, 定理 B 和 C]。

执行完整的最近邻搜索或 OMP 算法代价高昂，因为访问 ˜ ˜ $\boldsymbol{R}$ 的相关元素代价很高。要查找条目 $\boldsymbol{R}(i, j)$，我们必须先查找 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}^*\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$的$(i, j)$条目，然后使用秩为$r$ 的部分 Cholesky 近似执行 $\mathcal{O}(r)$次额外算术运算。因此，最近邻搜索最快的直接实现需要对 $\boldsymbol{A}$ 进行 $\mathcal{O}(n)$次条目查找，并执行 $\mathcal{O}(rn)$次算术运算，且与最近邻的数量 [3]无关。OMP 最快的直接实现需要对 $\boldsymbol{A}$ 进行 $\mathcal{O}(n)$次条目查找，并执行 $\mathcal{O}((q^2+qr)n)$次运算 [21]。

为降低计算负担，Huan 及其合作者提出将 Vecchia 稀疏模式限制在一个“候选”索引集 $\mathcal{C}_i \subseteq \{1, \ldots, i-1\}$ 中，该集合对应于 ˜ 加权距离 [17] 下的最近邻。这里我们对其方法进行改编，定义如下两步优化过程。

1. 构建一个基数受限的候选集 C_i，其中包含使 $j < i$ 最小化的索引 $d_{\tilde{\boldsymbol{A}}}(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j)$。
2. 应用最近邻搜索 (4.5) 或 OMP 算法(4.6)，并将搜索限制在候选索引 $j \in \mathsf{C}_i$ 中。

步骤 1 需要进行 $\mathcal{O}(n)$ 次条目查找，并额外执行 $\mathcal{O}(n)$ 次算术运算，且与候选项的数量无关。当最近邻搜索的候选项数量为 $|\mathsf{C}_i| = \mathcal{O}(n/r)$，或 OMP 算法的候选项数量为 $|\mathsf{C}_i| = \mathcal{O}(n/(q^2+qr))$ 时，步骤 2 仅需执行 $\mathcal{O}(n)$ 次算术运算。两步优化方法属于启发式方法，但在实际应用中通常效果良好。

5. 实验。核机器学习是一种高性能的预测与插值方法，但由于计算成本高，目前仅适用于小规模或中等规模的数据集 [23]。核矩阵通常是稠密且近乎奇异的，因此难以使用传统的迭代线性求解器或行列式估计方法进行处理。本节评估部分 Cholesky + Vecchia 作为一种准确的因子化近似，未来有望加速核机器学习计算。

5.1. 实验设置。 为开展核机器学习测试，我们首先从 LIBSVM 和 OpenML 下载了 22 个数据集。对于每个数据集，我们将预测变量归一化，使其均值为零、方差为一。随后，我们抽取前 $n = 20,000$ 个观测值，得到数据点 $\boldsymbol{z}_1, \ldots, \boldsymbol{z}_n \in \mathbb{R}^d$。每个数据集中的预测变量数量范围为 $d = 4$ 至 $d = 784$；完整列表见 表 2 。对于每个正则化参数 $\mu \in \{10^{-10}, 10^{-6}, 10^{-3}\}$，我们定义了严格

TABLE 2
Data sets used in our experiments. The machine learning data sets can be downloaded using a script developed for the paper [8] available at this link.

数据集	维度 d	来源
COMET_MC_SAMPLE	4	LIBSVM
cod_rna	8	LIBSVM
Airlines DepDelay 1M	9	OpenML
diamonds	9	OpenML
ACS收入	11	OpenML
小型点击预测	11	OpenML
hls4ml LHC 喷注 HLF	16	OpenML
医疗预约	18	OpenML
ijcnn1	22	LIBSVM
希格斯	28	LIBSVM
信用卡	29	OpenML
无传感器	48	LIBSVM
MiniBoonNE	50	OpenML
森林覆盖类型二分类	54	LIBSVM
jannis	54	OpenML
年份预测MSD	90	LIBSVM
车辆传感	100	LIBSVM
yolanda	100	OpenML
Connect 4	126	LIBSVM
volkert	180	OpenML
santander	200	OpenML
MNIST	784	OpenML

正定核矩阵 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$，其元素为

$$\boldsymbol{A}(i,j) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{z}_i - \boldsymbol{z}_j\|^2}{2d}\right) + \mu\,\delta(i,j).$$

ˆ 随后，我们生成了若干矩阵近似 $\boldsymbol{A}$，并将这些近似用作预条件器，以求解线性方程组或计算行列式。关于线性方程组和行列式计算所用预处理方法的详细说明，请参见第 3 节 。我们进行了以下三项具体测试。

1. 使用标签向量进行 *PCG* 测试。首先，我们求解了线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$，其中响应向量 $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$ 包含每个数据集提供的标签。我们没有对 $\boldsymbol{b}$ 进行归一化，甚至将定性响应视为定量响应。这些标签向量导致 PCG 收敛相对较慢，因此当相对误差达到容差 $\|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}\|/\|\boldsymbol{b}\| \le 10^{-3}$时，我们便终止了该方法。

2. 使用核向量进行 *PCG* 测试。接下来，我们随机抽取测试数据点$\tilde{\boldsymbol{z}}_k \in \mathbb{R}^d$，对于 $k = 1,$ ....., 5，并定义核响应向量 $\boldsymbol{b}_k \in \mathbb{R}^n$，其各项为

$$\boldsymbol{b}_k(i) = \exp\left(-\frac{\|\boldsymbol{z}_i - \tilde{\boldsymbol{z}}_k\|^2}{2d}\right), \qquad \text{for } i = 1,\ldots,n. \tag{5.1}$$

与标签向量相比，这些核向量使 10×PCG 收敛更快，因此我们运行 PCG 方法，直到达到容差 $\|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}}_k - \boldsymbol{b}_k\|/\|\boldsymbol{b}_k\| \le 10^{-4}$。

3. 对数行列式测试。最后，我们对 $\boldsymbol{A}$应用了随机对数行列式估计。我们使用了十个随机抽取的测试向量 $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_{10} \in \mathbb{R}^n$，并使用深度为 [11] 的 Krylov–Ritz 近似来计算矩阵对数 $m = 100$；参见C 节，其中将其与更大的深度 $m = 1000$进行了比较。在测试中，我们报告归一化对数行列式估计的误差 $\frac{1}{n}\log(\hat{\boldsymbol{A}}) \approx \frac{1}{n}\log(\boldsymbol{A})$.

5.2. 枢轴选择器比较。 我们首先比较了 第 4.1 小节中介绍的五种主元选择器的性能。

- AS – 自适应搜索；
- RPC – 随机主元 Cholesky 分解；
- CPC – 列主元乔列斯基分解；
- SDS – 平方距离采样；以及
- FPS – 最远点采样。

我们将正则化参数设为 $\mu = 10^{-3}$，并采用五种主元选择器，近似秩为 $r = \lfloor n^{1/2} \rfloor = 141$，以构造部分 Cholesky+ 对角矩阵（$\mathbf{PC{+}V0}$）和部分 Cholesky + Vecchia（$\mathbf{PC{+}V1/4}$）近似。对于 Vecchia 分量，我们使用两步 OMP 算法，选择每行 $q = \lfloor n^{1/4} \rfloor = 11$ 个非对角非零元，并采用 $c = 10q$ 个候选项（第 4.2 小节）。

图 6 表明，在所有可用的主元选择器中，AS 得到的线性方程组求解和对数行列式估计最准确。然而，使用 AS 时，其构造成本比其他任何方法高出两个数量级。因此，AS 并非实用的枢轴选择方案，但该方法的高精度表明，未来或许有机会提升实用型主元选择器的性能。

在实用的主元选择器中，图 6 表明，RPC 和 SDS 得出的线性方程组求解结果最准确，而 RPC 得出的行列式计算结果最准确。在各项测试中，FPS 和 CPC 的准确度较低。这令人意外，因为 FPS 是近期构造部分 Cholesky + Vecchia 近似 [30, 4]所采用的主要方法。例如，经过 100 次迭代后，使用 RPC 可求解的、包含核向量的线性方程组数量达到原来的 1.4–1.7× 倍。

5.3. 稀疏性选择器比较。接下来，我们比较了第 4.2 小节中介绍的两种稀疏性选择器的性能。

- NN – 使用 $c = 10\lfloor n^{1/2} \rfloor = 1$ 个候选项进行最近邻搜索；以及
- OMP – 使用 $c = 10\lfloor n^{1/2} \rfloor$ 个候选项进行正交匹配追踪。

我们将进行参数配对 $\mu = 10^{-3}$，并使用每行含有 $q = \lfloor n^{1/4} \rfloor = 11$ 个非对角非零元的两种稀疏性选择器，构造部分 Cholesky + Vecchia（$\mathbf{PC{+}V1/4}$）近似。对于部分 Cholesky 组件，我们采用随机主元 Cholesky 分解，近似秩为 $r = \lfloor n^{1/2} \rfloor$ =141。

图 7 表明，经过 1000 次迭代后，OMP 求解的 1.3× 线性方程组数量与最近邻搜索相同。然而，在其他测试中，OMP 和最近邻搜索的表现相近。

后续工作中，我们决定采用随机主元 Cholesky 分解作为主元选择器，并采用正交匹配追踪作为稀疏性选择器，因为这种方法组合通常能达到最高精度。从理论上看，OMP 直接针对 Kaporin 条件数中各项距离的最小化(4.3)。我们发现，直接最小化 Kaporin 条件数的方法与能够实现精确线性方程求解和行列式估计的方法之间存在很强的对应关系。

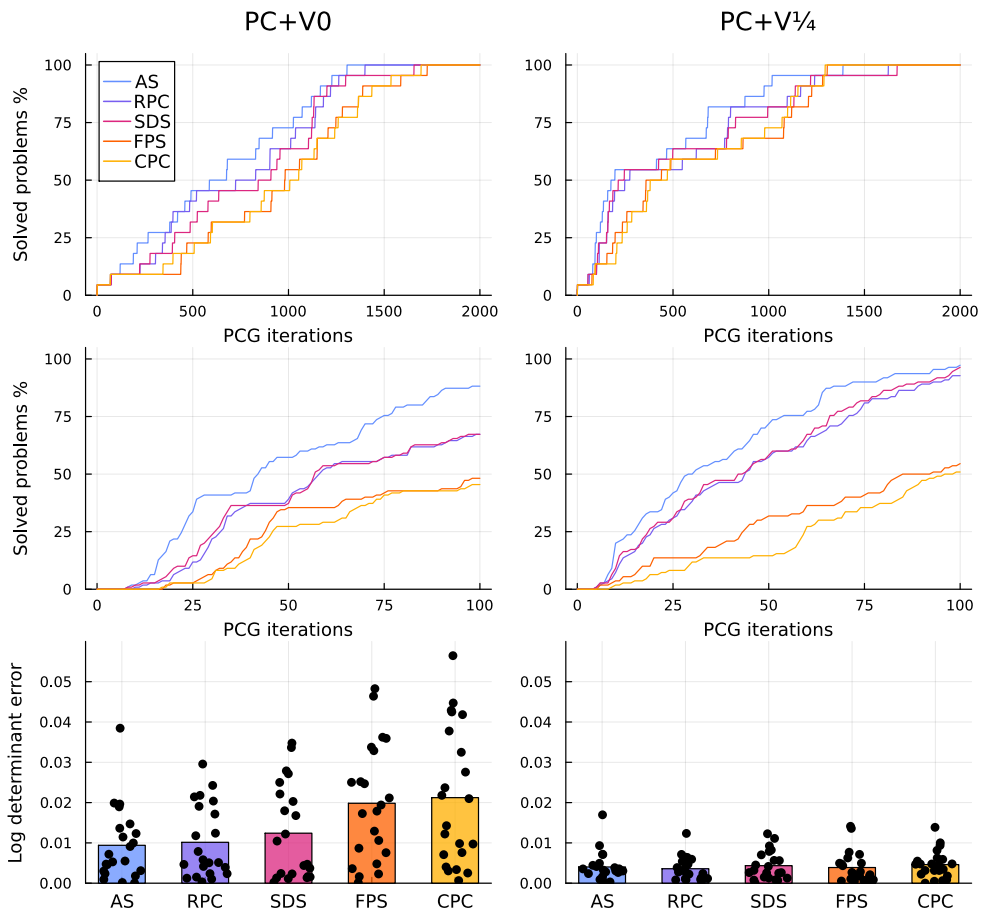

FIG. 6。 *Comparison of five pivot choosers for building partial Cholesky + diagonal (**PC+V0**, left) and partial Cholesky + Vecchia (+ 1 4 right) approximations. Top row: PCG tests with **PC V/**, , kernel vectors. Middle row: PCG tests with label vectors. Bottom row: log determinant tests.*

5.4. 与以往预条件器的比较。半正定矩阵的预条件器种类繁多 [26], ，对它们进行全面的实证比较超出了本文的范围。不过，我们可以回答一个更具针对性的问题：修改部分 Cholesky 近似以构造有效预条件器的最佳方法是什么？

为回答这个问题，我们比较了三种基于部分 Cholesky 的预条件器，分别称为 **Frangella**、**D´ıaz** 和 **PC+V**。

- **Frangella**。Frangella 等人 [10, 式 1.3] 首次提出了一种适用于以下形式矩阵的部分 Cholesky 预条件器

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{K} + \mu \mathbf{I}.$$

这里， $\boldsymbol{K}$ 是一个半正定核矩阵， $\mu \geq 0$ 是正则化参数。在他们的工作中，Frangella 及其合作者构造了一个秩为 r 的部分 Cholesky 近似 $\hat{} \boldsymbol{K}$ [10, 第 2.2 节。3] ，然后构造了预-

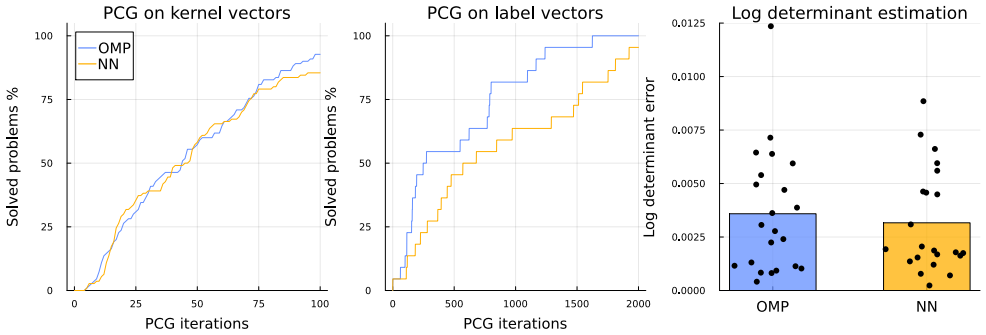

FIG. 7. *Comparison of two sparsity choosers for building a partial Cholesky + Vecchia* 部分 ***Cholesky V/*** *4) approximation. Left panel: PCG tests with label vectors. Middle panel: PCG tests with kernel vectors. Right panel: log determinant tests.*

条件器

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \hat{\boldsymbol{K}} + \lambda_r(\hat{\boldsymbol{K}})(\mathbf{I} - \boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}) + \mu\mathbf{I}. \tag{5.2}$$

这里， $\lambda_r(\hat{\boldsymbol{K}})$是$\hat{\boldsymbol{K}}$的第 r大特征值，而 $\boldsymbol{Q}$是$\hat{\boldsymbol{K}}$的一组标准正交基。

- **D´ıaz**. D´ıaz 等人 [8, 式 2。2] 随后提出了一种简化的、基于部分 Cholesky 的预条件器

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \hat{\boldsymbol{K}} + \mu\mathbf{I}. \tag{5.3}$$

- **部分 Cholesky+Vecchia**。Zhao 等人 [30]最近提出了部分 Cholesky + Vecchia 预条件器

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \hat{\boldsymbol{A}}_{\text{part}} + \hat{\boldsymbol{A}}_{\text{res}}.$$

这种方法直接构造 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{K} + \mu\mathbf{I}$的秩为$r$ 的部分 Cholesky 近似，而不依赖于 $\boldsymbol{K}$的部分 Cholesky 近似。

我们针对一系列正则化参数 $\mu \in \{10^{-10}, 10^{-6}, 10^{-3}\}$ 进行了实验，并基于近似秩为 $r = \lfloor n^{1/2} \rfloor = 141$ 的随机主元 Cholesky 分解构造了五种不同的预条件器。具体而言，我们构造了若干部分 Cholesky + Vecchia 近似，其中 Vecchia 分量的非零非对角元素数量分别为 $q = 0$ （**PC+V0**）、 $q = \lfloor n^{1/4} \rfloor$ =11（**PC+V1/4**）或 $q = \lfloor n^{1/3} \rfloor = 27$ （**PC+V1/3**）。在 Vecchia 构造中，我们使用了含 $c = 10q$ 个候选项的两步 OMP 算法。

图 1 和图 8 展示了对五种基于部分 Cholesky 分解的预条件器进行比较的结果。在我们的各项测试中，**PC+V1/3**所得的线性求解和行列式估计精度最高。然而，**PC+V1/3**的构造成本为$\mathcal{O}(q^2rn) = \mathcal{O}(n^{13/6})$ 次算术运算，因此其开销略高于线性时间算法。尽管如此，这种近似在实践中可能仍有用处；其高精度表明，我们可以通过一种巧妙的策略进一步扩展稀疏模式，同时控制计算开销，从而改进部分 Cholesky + Vecchia 近似。

图 1和8 还表明，**PC+V0** 和**PC+V1/4** 预条件器的精度始终高于**Frangella**和**D´ıaz** 预条件器

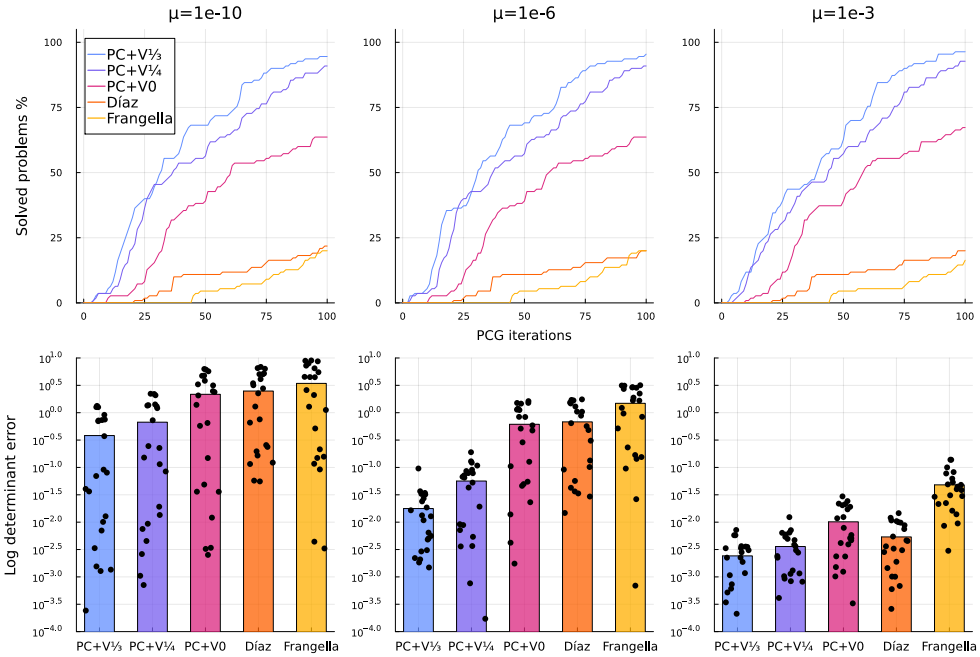

FIG. 8. *Comparison of five preconditioners based on randomly pivoted Cholesky with rank* $r = \lfloor n^{1/2} \rfloor = 141$. *Top row: PCG tests with kernel vectors. Bottom row: log determinant tests. Also see Figure 1 for the PCG tests with label vectors, using the same preconditioners.*

同时保持渐近的 $\mathcal{O}(n^2)$ 构造成本。与 **PC+V0**预条件器相比，**PC+V1/4**预条件器使行列式精度提高了 3–11×，并且经过 100 次迭代后，可求解多达 1.4× 个带核向量的线性系统。因此，在 Vecchia 分量中加入少量非零非对角元素在经验上非常有帮助。这一结果模式可能令人意外，因为在 70% 的机器学习数据集中，非对角非零元的数量 $q = \lfloor n^{1/4} \rfloor = 11$ 小于预测变量的数量 $d \in [4, 784]$ 。

致谢。 作者谨向 Chris Cama˜no、Yifan Chen、EthanN. Epperly、Christopher J. Geoga 和 Florian Sch¨afer 致谢，感谢他们提供的宝贵讨论。

参考文献

[1] D. ARTHUR AND S. VASSILVITSKII, *k-means++: The advantages of careful seeding*, 载于《第十八届 ACM-SIAM 离散算法年度研讨会论文集》，2007 年，https://dlacm.org/doi/10.5555/1283383.1283494。[2] O. AXELSSON AND I. KAPORIN, *On the sublinear and superlinear rate of convergence of conjugate gradient methods* 25 2000 1 22, 10 1023 , NumericalAlgorithms, （），第 – 页https://doi.org/ 。 / a:1016694031362。[3] M. BLUM, R. W. FLOYD, V. PRATT, R. L. RIVEST, AND R. E. TARJAN, *Time bounds for selection* 7 1973 448 461, , 《计算机与系统科学杂志》，（），第 – 页https://doi. org/10.1016/S0022-0000(73)80033-9。[4] D. CAI, E. CHOW, AND Y. XI, *Posterior covariance structures in gaussian processes*, SIAM 矩阵分析与应用杂志，46（2025），第 1640–1673 页，https://doi.org/

10.1137/24M1684918。[5] Y. Chen, E. N. Epperly, J. A. Tropp, and R. J. Webber, *Randomly pivoted Cholesky:Practical approximation of a kernel matrix with few entry evaluations*, 《纯粹与应用数学通讯》，78（2025），第 995–1041 页，https://doi.org/10.1002/cpa. 22234。[6] A. P. Dempster, *Covariance selection*, 《生物统计学》，28（1972），第 157–175 页，https://doi.org/ https://doi.org/10.2307/2528966。[7] A. Deshpande and K. Varadarajan, *Sampling-based dimension reduction for subspace ap-proximation*, 载于《第三十九届 ACM 理论计算年度研讨会论文集》，2007 年，https://doi.org/10.1145/1250790.1250884。[8] M. Díaz, E. N. Epperly, Z. Frangella, J. A. Tropp, and R. J. Webber, *Robust randomized , , , preconditioning for kernel ridge regression* 2024 2304 12465 https://arxiv.org/abs/。。[9] H. Engler, *The behavior of the QR-factorization algorithm with column pivoting*, 《应用数学快报》，10（1997），第 7–11 页，https://doi.org/10.1016/S0893-9659(97) 00098-0。[10] Z. Frangella, J. A. Tropp, and M. Udell, *Randomized Nyström preconditioning*, SIAM 矩阵分析与应用杂志，44（2023），第 718–752 页，https://doi.org/10. 1137/21M1466244。[11] A. Frommer and M. Schweitzer, *Error bounds and estimates for Krylov subspace approximations of Stieltjes matrix functions* 56 2016 865 892, , BIT 数值数学, （），第 – 页 https://doi.org/10.1007/s10543-015-0596-3。[12] G. Golub, *Numerical methods for solving linear least squares problems*, 《数值数学》，7（1965），第 206–216 页，https://doi.org/10.1007/bf01436075。[13] G. H. Golub and C. F. Van Loan, *Matrix Computations - 4th Edition*, 约翰斯·霍普金斯大学出版社，宾夕法尼亚州费城，第 4 版，2013 年，https://doi.org/10.1137/1.9781421407944。[14] T. F. Gonzalez, *Clustering to minimize the maximum intercluster distance*, 《理论计算机科学》，38（1985），第 293–306 页，https://doi.org/10.1016/0304-3975(85)90224-5。[15] J. Guinness, *Permutation and grouping methods for sharpening Gaussian process approximations* 60 2018 415 429, 10 1080 00401706 2018 , 《计量经济学》，（），第 – 页 https://doi.org/ . / . . 1437476。[16] N. J. Higham, *Analysis of the Cholesky decomposition of a semi-definite matrix*, 载于《可靠数值计算》，M. G. Cox 和 S. J. Hammarling 编，牛津大学出版社，1990 年，第 161–185 页，https://eprints.maths.manchester.ac.uk/id/eprint/1193。[17] S. Huan, J. Guinness, M. Katzfuss, H. Owhadi, and F. Schäfer, *Sparse inverse Cholesky factorization of dense kernel matrices by greedy conditional selection*, SIAM/ASA 不确定性量化杂志，13（2025），第 1649–1679 页，https://doi.org/10.1137/ 23M1606253。[18] I. E. Kaporin, *New convergence results and preconditioning strategies for the conjugate gradient method* 1 1994 179 210, , 《应用数值线性代数》， （），第 – 页 https://doi.org/10.1002/nla.1680010208。[19] K. Makarychev, A. Reddy, and L. Shan, *Improved guarantees for k-means++ and k-means++ parallel*, 载于《第 34 届神经信息处理系统国际会议论文集》，2020 年，https://dl.acm.org/doi/10.5555/3495724.3497078。[20] B. K. Natarajan, *Sparse approximate solutions to linear systems*, SIAM 计算杂志，24（1995），第 227–234 页，https://doi.org/10.1137/S0097539792240406。[21] R. Rubinstein, M. Zibulevsky, and M. Elad, *Efficient implementation of the K-SVD algorithm using batch orthogonal matching pursuit* 2008 08, , 技术报告 CS- - 以色列理工学院，2008 年，https://csaws.cs.technion.ac.il/~ronrubin/Publications/ KSVD-OMP-v2.pdf。[22] F. Schäfer, M. Katzfuss and H. Owhadi *Sparse Cholesky factorization by Kullback–Leibler , , , minimization* 43 2021 2019 2046, SIAM 科学计算杂志，（），第 A –A 页 https: //doi.org/10.1137/20M1336254。[23] B. Schölkopf and A. J. Smola, *Learning with Kernels: Support Vector Machines Regulariza- , , , , , 麻省理工学 tion Optimization and Beyond* 2001, 10 7551 院出版社，https://doi.org/ . /mitpress/ 4175.001.0001。[24] Y. Sun and M. L. Stein, *Statistically and computationally efficient estimating equationsfor large spatial datasets*, 《计算与图形统计学杂志》，25（2016），第 187–208 页，https://doi.org/10.1080/10618600.2014.975230。[25] J. Tropp, *Greed is good: Algorithmic results for sparse approximation*, 《IEEE 信息论汇刊》，50（2004），第 2231–2242 页，https://doi.org/10.1109/TIT.2004.834793。[26] M. A. Tunnell, and D. F. Gleich, *An empirical study of conjugate gradient preconditioners for solving symmetric positive definite systems of linear equations* 2025 , https://arxiv。

org/abs/2505.20696, https://arxiv.org/abs/2505.20696. [27] S. Ubaru, J. Chen, and Y. Saad, *Fast estimation of tr(f(a)) via stochastic lanczos quad-* $ $, SIAM 矩
rature 38 2017 1075
阵分析与应用杂志, ( ), pp. –1099, https://doi.org/10.1137/16M1104974. [28] A. V. Vecchia, *Estimation and model identification for continuous spatial processes*, 英国皇家统计学会杂志 B辑：统计方法学, 50 (1988), pp. 297–312, https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1988.tb01729.x. [29] A. Y. Yeremin, L. Y. Kolotilina, and A. Nikishin, *Factorized sparse approximate inverse preconditionings. III. Iterative construction of preconditioners*, 数学科学杂志, 101 (2000), pp. 3237–3254, https://doi.org/10.1007/BF02672769. [30] S. Zhao, T. Xu, H. Huang, E. Chow, and Y. Xi, *An adaptive factorized Nyström precondi-tioner for regularized kernel matrices*, SIAM 科学计算杂志, 46 (2024), pp. A2351–A2376, https://doi.org/10.1137/23M1565139.

附录 A. Kaporin 最优性理论的证明。本节确立了如下所述 Vecchia 近似的最优性：定理 3.1。为简化记号，本节假设置换为 $\boldsymbol{P} = \mathbf{I}$。否则，我们可以置换 $\boldsymbol{A}$ 的索引，并将证明应用于置换后的矩阵。

首先，我们需要用矩阵的逆 Cholesky 分解来表示其伪逆和体积的公式。

Lemma A.1（伪逆和体积公式）。设一个半正定矩阵的逆 *Cholesky* 分解为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{C}^{-*}$。令 $\boldsymbol{Q}$ 为$\mathrm{range}(\boldsymbol{A})$ 的标准正交基，并设 $\boldsymbol{R} = \mathbf{I}(\cdot, \mathsf{G})$，其中$\mathsf{G} \subseteq \{1, \dots, n\}$ 选出 $\boldsymbol{D}$中的非零元素。那么

$$\boldsymbol{A}^{+} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{*}\boldsymbol{C}^{*}\boldsymbol{D}^{+}\boldsymbol{C}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{*} \quad \textit{and} \quad \mathrm{vol}(\boldsymbol{A}) = \frac{\mathrm{vol}(\boldsymbol{D})}{\det(\boldsymbol{R}^{*}\boldsymbol{Q})^{2}}. \tag{A.1}$$

证明。伪逆 $\boldsymbol{A}^{+}$ 是唯一满足以下条件的半正定矩阵： $\boldsymbol{A}^{+}\boldsymbol{x} = \mathbf{0}$ 当 $\boldsymbol{x} \perp \mathrm{range}(\boldsymbol{Q})$ 时，以及 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{+}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}$当 $\boldsymbol{x} \in \mathrm{range}(\boldsymbol{Q})$ 时。矩阵$\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{*}\boldsymbol{C}^{*}\boldsymbol{D}^{+}\boldsymbol{C}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{*}$ 满足这些条件，从而证实了(A.1)。

接下来注意到， $\boldsymbol{R}^{*}\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{R}$是一个对角线上元素均为 1 的下三角矩阵；因此，其行列式为 1。由此可得，

$$1 = \det\big(\boldsymbol{R}^{*}\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{R}\big) = \det\big(\boldsymbol{R}^{*}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{*}\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{R}\big) = \det(\boldsymbol{R}^{*}\boldsymbol{Q})\det(\boldsymbol{Q}^{*}\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{R}).$$

$\boldsymbol{A}$ 的体积为

$$\begin{aligned}\mathrm{vol}(\boldsymbol{A}) &= \mathrm{vol}\big(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{*}\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^{*}\boldsymbol{D}\boldsymbol{R}\boldsymbol{R}^{*}\boldsymbol{C}^{-*}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{*}\big) \\ &= \det\big(\boldsymbol{Q}^{*}\boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{R}\big)^{2}\det\big(\boldsymbol{R}^{*}\boldsymbol{D}\boldsymbol{R}\big) = \mathrm{vol}(\boldsymbol{D})/\det(\boldsymbol{R}^{*}\boldsymbol{Q})^{2}.\end{aligned}$$

这证实了(A.1) 并完成了证明。 □

接下来，我们给出 $\boldsymbol{A}\hat{}\boldsymbol{A}^{+}$ 的迹和体积的显式公式，其中 $\hat{}\boldsymbol{A}$ 是一个与 $\boldsymbol{A}$具有相同值域的近似。

Lemma A.2（迹和体积公式）。考虑两个具有相同值域的逆 *Cholesky* 分解，$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{C}^{-*}$ 和 $\hat{}\boldsymbol{A} = \hat{}\boldsymbol{C}^{-1}\,\hat{}\boldsymbol{D}\,\hat{}\boldsymbol{C}^{-*}$。那么

$$\mathrm{vol}\big(\hat{\boldsymbol{A}}^{+}\boldsymbol{A}\big) = \frac{\mathrm{vol}\big(\boldsymbol{A}\big)}{\mathrm{vol}\big(\hat{\boldsymbol{A}}\big)} = \frac{\mathrm{vol}\big(\boldsymbol{D}\big)}{\mathrm{vol}\big(\hat{\boldsymbol{D}}\big)} \quad \textit{and} \quad \mathrm{tr}\big(\hat{\boldsymbol{A}}^{+}\boldsymbol{A}\big) = \mathrm{tr}\big(\hat{\boldsymbol{D}}^{+}\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\big).$$

证明。 首先，我们论证 $\mathrm{range}(\hat{}\boldsymbol{D}) = \mathrm{range}(\boldsymbol{D})$。为此，引入仿射子空间

$$\mathcal{A}_i = \{\boldsymbol{v} \in \mathbb{C}^n \,|\, \boldsymbol{v}(i) = 1, \boldsymbol{v}(j) = 0 \text{ for } j < i\}.$$

for $i = 1, \ldots, n$。由于下三角分解，$\boldsymbol{A}$ 的值域包含向量 $\hat{\boldsymbol{v}} \in \mathrm{A}_i$ 当且仅当 $\boldsymbol{D}(i,i) > 0$。类似地，$\boldsymbol{A}$ 的值域包含向量 $\hat{\boldsymbol{v}} \in \mathrm{A}_i$ 当且仅当 $\boldsymbol{D}(i,i) > 0$。由于 $\mathrm{range}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{range}(\boldsymbol{A})$，因此可得 $\mathrm{range}(\hat{\boldsymbol{D}}) = \mathrm{range}(\boldsymbol{D})$。

接下来，我们取 $\boldsymbol{Q}$ 作为值域$(\hat{\boldsymbol{A}}) =$ 值域$(\boldsymbol{A})$的标准正交基，并取 $\boldsymbol{R}$ 作为值域$(\hat{\boldsymbol{D}}) =$ 值域$(\boldsymbol{D})$的标准正交基。为计算 $\mathrm{vol}(\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{A})$，我们观察到

$$\begin{aligned}\mathrm{vol}\big(\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{A}\big) &= \mathrm{vol}\big(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^*\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^*\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^*\big)\\ &= \det\big(\boldsymbol{Q}^*\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{Q}\big)\det\big(\boldsymbol{Q}^*\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}\big) = \mathrm{vol}\big(\hat{\boldsymbol{A}}^+\big)\,\mathrm{vol}\big(\boldsymbol{A}\big) = \frac{\mathrm{vol}\big(\boldsymbol{A}\big)}{\mathrm{vol}\big(\hat{\boldsymbol{A}}\big)}.\end{aligned}$$

最后一行利用了如下事实：$\mathrm{vol}(\hat{\boldsymbol{A}}^+)$ 是 $\mathrm{vol}(\hat{\boldsymbol{A}})$的逆矩阵。接下来，我们应用关于 $\mathrm{vol}(\boldsymbol{A})$ 与 $\mathrm{vol}(\hat{\boldsymbol{A}})$ 的精确公式，这些公式见引理 A.1。

$$\frac{\mathrm{vol}\big(\boldsymbol{A}\big)}{\mathrm{vol}\big(\hat{\boldsymbol{A}}\big)} = \frac{\mathrm{vol}\big(\boldsymbol{D}\big)/\det(\boldsymbol{R}^*\boldsymbol{Q})^2}{\mathrm{vol}\big(\hat{\boldsymbol{D}}\big)/\det(\boldsymbol{R}^*\boldsymbol{Q})^2} = \frac{\mathrm{vol}\big(\boldsymbol{D}\big)}{\mathrm{vol}\big(\hat{\boldsymbol{D}}\big)}.$$

类似地，我们计算 $\mathrm{tr}(\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{A})$，方法是应用伪逆 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的精确公式，该公式见引理 A.1。

$$\begin{aligned}&\mathrm{tr}\big(\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{A}\big) = \mathrm{tr}\big(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^*\hat{\boldsymbol{C}}^*\hat{\boldsymbol{D}}^+\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^*\boldsymbol{A}\big)\\ &= \mathrm{tr}\big(\hat{\boldsymbol{D}}^+\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^*\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^*\hat{\boldsymbol{C}}^*\big) = \mathrm{tr}\big(\hat{\boldsymbol{D}}^+\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^*\big)\end{aligned}$$

至此，证明完毕。 □

现在我们建立主要结果，即定理 3.1。

定理 3.1 的证明。 设 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{C}^{-*}$ 是一个精确的逆 Cholesky 分解。我们将推导具有给定稀疏模式（$\boldsymbol{A} = \hat{\boldsymbol{C}}^{-1}\hat{\boldsymbol{D}}\hat{\boldsymbol{C}}^{-*}$）的逆 Cholesky 近似 $\hat{\mathsf{S}}_{i=1}^n$，使其最小化 κ_{Kap}。我们将重点讨论 $\hat{}$满足 $\boldsymbol{A}$ 且 $\boldsymbol{A}$ 具有相同值域的情形，因为否则 $\kappa_{\mathrm{Kap}} = \infty$。

我们将指标 $\{1, \ldots, n\}$ 划分为一组“良好”指标 $\mathsf{G} = \{i \,|\, \boldsymbol{D}(i,\ i) > 0\}$ 和一组“不良”指标 $\mathsf{B} = \{i \,|\, \boldsymbol{D}(i,\ i) = 0\}$。由于 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{D})$，良好指标的数量为 $r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$，不良指标的数量为 $n - r$。我们将分别考察良好指标和不良指标。

我们首先考察不良指标 $i \in \mathsf{B}$ 会发生什么。由于 $\boldsymbol{D}(i,\ i) = 0$ 以及 $\hat{\boldsymbol{A}}$与 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的零空间，因此可得

$$\boldsymbol{0} = \boldsymbol{C}(i,\cdot)\boldsymbol{A} = \boldsymbol{C}(i,\cdot)\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{C}(i,\cdot)\hat{\boldsymbol{C}}^{-1}\hat{\boldsymbol{D}}.$$

我们利用了这样一个事实：$\hat{\boldsymbol{A}}$ 与$\hat{\boldsymbol{C}}^{-1}\hat{\boldsymbol{D}}$具有相同的左零空间。接下来我们观-察到，$\boldsymbol{C}\hat{\boldsymbol{C}}^{-1}$ 是一个对角线上元素均为 1 的下三角矩阵，因此必有 $(\boldsymbol{C}\hat{\boldsymbol{C}}^{-1})(i,\ i) = 1$，从而$\hat{\boldsymbol{D}}(i,\ i) = 0$。由于$\hat{\boldsymbol{D}}(i,\ i) = 0$，并且 $\boldsymbol{A}$ 与$\hat{\boldsymbol{A}}$具有相同的零空间，因此可得

$$\boldsymbol{0} = \hat{\boldsymbol{C}}(i,\cdot)\hat{\boldsymbol{A}} = \hat{\boldsymbol{C}}(i,\cdot)\boldsymbol{A},$$

并且我们可以写成

$$\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{C}}(i,\mathsf{S}_i) & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,\mathsf{S}_i) & \boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,i)\\ \boldsymbol{A}(i,\mathsf{S}_i) & \boldsymbol{A}(i,i)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{0} & \hat{\boldsymbol{D}}(i,i)\end{bmatrix}.$$

这个 i 这正是定义 2.3中给出的 Vecchia 近似定义。

现在我们关注良好指标 $i \in \mathsf{G}$。为此，我们利用 κ_{Kap} 来自 引理 A.2的体积与迹公式进行改写。

$$\kappa_{\mathrm{Kap}} = \frac{\left(\frac{1}{r}\operatorname{tr}\left(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{+}\right)\right)^{r}}{\operatorname{vol}\left(\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{+}\right)} = \frac{\operatorname{vol}\left(\hat{\boldsymbol{D}}\right)\operatorname{tr}\left(\hat{\boldsymbol{D}}^{+}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}\right)^{r}}{r^{r}\operatorname{vol}\left(\boldsymbol{D}\right)}.$$

我们计算对数导数

$$\partial_{\hat{\boldsymbol{D}}(i,i)}\log(\kappa_{\mathrm{Kap}}) = \frac{1}{\hat{\boldsymbol{D}}(i,i)} - \frac{r\left(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\right)(i,i)}{\hat{\boldsymbol{D}}(i,i)^{2}\operatorname{tr}\left(\hat{\boldsymbol{D}}^{+}\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\right)}.$$

当 $\hat{\boldsymbol{D}}(i,i)$ 较小时，对数导数为负；当 $\hat{\boldsymbol{D}}(i,i)$ 较大时，对数导数为正，并且当

$$\frac{\left(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\right)(i,i)}{\hat{\boldsymbol{D}}(i,i)} = \frac{\operatorname{tr}\left(\hat{\boldsymbol{D}}^{+}\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\right)}{r}$$

对每个 $i \in \mathsf{G}$，我们选取极小化元 $\hat{\boldsymbol{D}}(i,i) = \left(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\right)(i,i)$。于是，Kaporin 条件数变为

$$\kappa_{\mathrm{Kap}} = \frac{\operatorname{vol}\left(\hat{\boldsymbol{D}}\right)}{\operatorname{vol}\left(\boldsymbol{D}\right)} = \frac{1}{\operatorname{vol}\left(\boldsymbol{D}\right)}\prod_{i\in\mathsf{G}}\left(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\right)(i,i).$$

最后，我们展开平方项。

$$\begin{aligned}
&\left(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\right)(i,i)\\
&= \hat{\boldsymbol{C}}(i,\mathsf{S}_i)\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,\mathsf{S}_i)\hat{\boldsymbol{C}}(i,\mathsf{S}_i)^{*} + \hat{\boldsymbol{C}}(i,\mathsf{S}_i)\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,i) + \boldsymbol{A}(i,\mathsf{S}_i)\hat{\boldsymbol{C}}(i,\mathsf{S}_i)^{*} + \boldsymbol{A}(i,i)\\
&= \left[\hat{\boldsymbol{C}}(i,\mathsf{S}_i)\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,\mathsf{S}_i) + \boldsymbol{A}(i,\mathsf{S}_i)\right]\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,\mathsf{S}_i)^{+}\left[\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,\mathsf{S}_i)\hat{\boldsymbol{C}}(\mathsf{S}_i,i) + \boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,i)\right]\\
&\quad + \left[\boldsymbol{A}(i,i) - \boldsymbol{A}(i,\mathsf{S}_i)\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,\mathsf{S}_i)^{+}\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,i)\right].
\end{aligned}$$

这里我们利用了这样一个事实：$\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i, i) \in$ 值域$\left(\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i, \mathsf{S}_i)\right)$，因为 $\boldsymbol{A}$ 是半正定的。$\left(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\right)(i, i)$ 的极小化元是行向量 $\hat{\boldsymbol{C}}(i, \mathsf{S}_i)$，其特征由以下条件刻画：

$$\hat{\boldsymbol{C}}(i,\mathsf{S}_i)\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,\mathsf{S}_i) + \boldsymbol{A}(i,\mathsf{S}_i) = \boldsymbol{0}.$$

最小值为

$$d_{\boldsymbol{A}}\left(\boldsymbol{e}_i, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{S}_i}\right)^{2} = \left(\hat{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{C}}^{*}\right)(i,i) = \hat{\boldsymbol{C}}(i,\mathsf{S}_i)\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,i) + \boldsymbol{A}(i,i). \tag{A.2}$$

至此，我们已经证明

$$\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{C}}(i,\mathsf{S}_i) & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,\mathsf{S}_i) & \boldsymbol{A}(\mathsf{S}_i,i)\\ \boldsymbol{A}(i,\mathsf{S}_i) & \boldsymbol{A}(i,i)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{0} & \hat{\boldsymbol{D}}(i,i)\end{bmatrix}.$$

这正是定义 2.3中给出的 Vecchia 近似的定义。

总之，Vecchia 近似达到最小 Kaporin 条件数，可写为

$$\kappa_{\mathrm{Kap}} = \frac{1}{\operatorname{vol}\left(\boldsymbol{D}\right)}\prod_{i\in\mathsf{G}} d_{\boldsymbol{A}}\left(\boldsymbol{e}_i, \operatorname{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j\in\mathsf{S}_i}\right)^{2},$$

使用 (A.2)。在稀疏模式为 $\mathsf{S}_i = \{1,\dots,i-1\}$且 $i=1$、.....、n 时，最小 Kaporin 条件数为 $\kappa_{\mathrm{Kap}} = 1$。因此，

$$\mathrm{vol}(\boldsymbol{D}) = \prod_{i\in\mathsf{G}} d_{\boldsymbol{A}}\big(\boldsymbol{e}_i, \mathrm{span}\{\boldsymbol{e}_j\}_{j<i}\big)^2.$$

这就完成了证明。 □

附录 B. Kaporin 条件数的应用。本节根据 Kaporin 条件数，证明了线性代数计算的若干上界。

B.1. 命题3.2的证明。我们可以利用以下事实：$\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_\star$ 与值域$(\boldsymbol{A})$ =值域$(\boldsymbol{A})$ 正交，从而计算

$$\begin{aligned}\|\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}} &= \|\boldsymbol{x}_0+\hat{\boldsymbol{A}}^+[\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0]-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}\\ &= \big\|\big[\mathbf{I}-\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{A}\big]\big[\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}_\star\big]\big\|_{\boldsymbol{A}}\\ &= \big\|\big[\mathbf{I}-\boldsymbol{A}^{1/2}\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{A}^{1/2}\big]\boldsymbol{A}^{1/2}\big[\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}_\star\big]\big\|\\ &\le \|\mathbf{I}-\boldsymbol{A}^{1/2}\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{A}^{1/2}\|\|\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}_0\|_{\boldsymbol{A}}\end{aligned}$$

$\boldsymbol{A}^{1/2}\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{A}^{1/2}$ 的特征值就是 $\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^+$的特征值，记作 $\lambda_1 \ge \cdots \ge \lambda_r > 0$。因此，

$$\frac{\|\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}{\|\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{x}_0\|_{\boldsymbol{A}}} \le \|\mathbf{I}-\boldsymbol{A}^{1/2}\hat{\boldsymbol{A}}^+\boldsymbol{A}^{1/2}\| = \max_{1\le i\le r}|1-\lambda_i|,$$

这给出了一个紧确的上界。

鉴于 $\sum_{j=1}^r \lambda_j = r$，$x\mapsto \log x$ 的凹性表明，当 $j\neq i$ 对应的特征值 λ_j 相等时，$\sum_{j=1}^r \log(\lambda_j)$ 取得最大值。再次利用 $\sum_{j=1}^r \lambda_j = r$，可得

$$-\log(\kappa_{\mathrm{Kap}}) = \sum_{j=1}^r \log(\lambda_j) \le \log(\lambda_i) + (r-1)\log\left(\frac{r-\lambda_i}{r-1}\right).$$

在区间 $(0,r]$ 上，我们可以用一条经过 $(1,0)$ 和 $(r, \frac{r}{2}-\frac{1}{2r})$ 的凹二次函数从上方界定 $\log(x)$，因此

$$\log(\lambda_i) \le -1+\lambda_i - \frac{1}{2r}(1-\lambda_i)^2.$$

此外，$\log(1+x)\le x$ 在全局范围内成立，因此

$$(r-1)\log\left(\frac{r-\lambda_i}{r-1}\right) = (r-1)\log\left(1+\frac{1-\lambda_i}{r-1}\right) \le 1-\lambda_i.$$

由此可得

$$-\log(\kappa_{\mathrm{Kap}}) \le \log(\lambda_i) + (r-1)\log\left(\frac{r-\lambda_i}{r-1}\right) \le -\frac{1}{2r}(1-\lambda_i)^2.$$

我们得出，对于每个 $i=1,\dots,r$，$(1-\lambda_i)^2 \le 2r\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})$，由此完成证明。

B.2. 命题3.3的证明。 起点是关于预条件共轭梯度迭代的经典误差界 [2,式 (3.4)]。

$$\frac{\|\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}{\|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}} \le \max_{1\le i\le r} |p_t(\lambda_i)|.$$

其中， p_t 是任意满足 $p_t(0) = 1$的t 次多项式， $\lambda_1 \ge \cdots \ge \lambda_r$ 是 $\boldsymbol{A}\,\hat{}\,\boldsymbol{A}^+$的正特征值，按升序排列。在 t为偶数的情况下，我们构造

$$p_t(\lambda) = \prod_{i=1}^{t/2}\left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_i}\right)\left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_{r+1-i}}\right).$$

在 t为奇数的情况下，我们令 $t_\star = (t+1)/2$ 并构造

$$p_t(\lambda) = \left(1 - \frac{2\lambda}{\lambda_{t_\star} + \lambda_{r+1-t_\star}}\right)\prod_{i=1}^{(t-1)/2}\left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_i}\right)\left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_{r+1-i}}\right).$$

现在注意到

$$\max_{1\le i\le r} |p_t(\lambda_i)| = \max_{\lfloor t/2\rfloor \le i\le r+1-\lfloor t/2\rfloor} |p_t(\lambda_i)|,$$

且右侧由以下各项的乘积所界定

$$\max_{\lambda_i\le\lambda\le\lambda_{r+1-i}}\left(\frac{\lambda}{\lambda_i} - 1\right)\left(1 - \frac{\lambda}{\lambda_{r+1-i}}\right) = \frac{(\lambda_i - \lambda_{r+1-i})^2}{4\lambda_i\lambda_{r+1-i}}$$

以及可能还有一项

$$\max_{\lambda_{t_\star}\le\lambda\le\lambda_{r+1-t_\star}}\left|1 - \frac{2\lambda}{\lambda_{t_\star} + \lambda_{r+1-t_\star}}\right| = \frac{\lambda_{t_\star} - \lambda_{r+1-t_\star}}{\lambda_{t_\star} + \lambda_{r+1-t_\star}} \le \frac{\lambda_{t_\star} - \lambda_{r+1-t_\star}}{2(\lambda_{t_\star}\lambda_{r+1-t_\star})^{1/2}},$$

其中，最后一行由算术-几何平均不等式推出

$$(\lambda_{t_\star}\lambda_{r+1-t_\star})^{1/2} \le \frac{\lambda_{t_\star} + \lambda_{r+1-t_\star}}{2}.$$

当 t 为偶数时，我们可以两次使用算术-几何平均不等式，得到

$$\begin{aligned}&\prod_{i=1}^{t/2}\left(\frac{4\lambda_i\lambda_{r+1-i}}{(\lambda_i + \lambda_{r+1-i})^2}\right)^{2/t} + \prod_{i=1}^{t/2}\left(\frac{(\lambda_i - \lambda_{r+1-i})^2}{(\lambda_i + \lambda_{r+1-i})^2}\right)^{2/t}\\ &\le \frac{2}{t}\sum_{i=1}^{t/2}\frac{4\lambda_i\lambda_{r+1-i} + (\lambda_i - \lambda_{r+1-i})^2}{(\lambda_i + \lambda_{r+1-i})^2} = 1,\end{aligned}$$

因此

$$1 + \left[\frac{\|\boldsymbol{x}_t - \boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}{\|\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}\right]^{2/t} \le 1 + \prod_{i=1}^{t/2}\left(\frac{(\lambda_i - \lambda_{r+1-i})^2}{4\lambda_i\lambda_{r+1-i}}\right)^{2/t} \le \prod_{i=1}^{t/2}\left(\frac{(\lambda_i + \lambda_{r+1-i})^2}{4\lambda_i\lambda_{r+1-i}}\right)^{2/t}.$$

当 t 为奇数时，我们可以两次使用权重为 $1/t$、$2/t$、.....、$2/t$ 的广义算术-几何平均不等式，得到

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{4\lambda_{t_\star}\lambda_{r+1-t_\star}}{(\lambda_{t_\star}+\lambda_{r+1-t_\star})^2}\right)^{1/t}\prod_{i=1}^{(t-1)/2}\left(\frac{4\lambda_i\lambda_{r+1-i}}{(\lambda_i+\lambda_{r+1-i})^2}\right)^{2/t}\\
&\quad+\left(\frac{(\lambda_{t_\star}-\lambda_{r+1-t_\star})^2}{(\lambda_{t_\star}+\lambda_{r+1-t_\star})^2}\right)^{1/t}\prod_{i=1}^{(t-1)/2}\left(\frac{(\lambda_i-\lambda_{r+1-i})^2}{(\lambda_i+\lambda_{r+1-i})^2}\right)^{2/t}\\
&\le\frac{1}{t}\frac{4\lambda_{t_\star}\lambda_{r+1-t_\star}+(\lambda_{t_\star}-\lambda_{r+1-t_\star})^2}{(\lambda_{t_\star}+\lambda_{r+1-t_\star})^2}+\frac{2}{t}\sum_{i=1}^{(t-1)/2}\frac{4\lambda_i\lambda_{r+1-i}+(\lambda_i-\lambda_{r+1-i})^2}{(\lambda_i+\lambda_{r+1-i})^2}=1,
\end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned}
&1+\left[\frac{\|\boldsymbol{x}_t-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}{\|\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}\right]^{2/t}\\
&\le 1+\left(\frac{(\lambda_{t_\star}-\lambda_{r+1-t_\star})^2}{4\lambda_{t_\star}\lambda_{r+1-t_\star}}\right)^{1/t}\prod_{i=1}^{(t-1)/2}\left(\frac{(\lambda_i-\lambda_{r+1-i})^2}{4\lambda_i\lambda_{r+1-i}}\right)^{2/t}\\
&\le\left(\frac{(\lambda_{t_\star}+\lambda_{r+1-t_\star})^2}{4\lambda_{t_\star}\lambda_{r+1-t_\star}}\right)^{1/t}\prod_{i=1}^{t/2}\left(\frac{(\lambda_i+\lambda_{r+1-i})^2}{4\lambda_i\lambda_{r+1-i}}\right)^{2/t}.
\end{aligned}$$

最后，当 r 为偶数时，我们可以再使用两次算术-几何平均不等式，得到

$$\left(1+\left[\frac{\|\boldsymbol{x}_t-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}{\|\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}\right]^{2/t}\right)^{t/2}\le\frac{1}{\prod_{i=1}^r\lambda_i}\prod_{i=1}^{r/2}\left(\frac{\lambda_i+\lambda_{r+1-i}}{2}\right)^2\le\kappa_{\mathrm{Kap}}.$$

类似地，当 r 为奇数时，我们可以再使用两次广义算术-几何平均不等式，得到

$$\left(1+\left[\frac{\|\boldsymbol{x}_t-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}{\|\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}\right]^{2/t}\right)^{t/2}\le\frac{1}{\prod_{i=1}^r\lambda_i}\lambda_{(r+1)/2}\prod_{i=1}^{(r-1)/2}\left(\frac{\lambda_i+\lambda_{r+1-i}}{2}\right)^2\le\kappa_{\mathrm{Kap}}.$$

最后，我们回顾一下

$$\begin{aligned}
2x&=\int_0^x 2\mathrm{d}y\le\int_0^x\frac{2\mathrm{d}y}{1-y^2}=\int_0^x\left[\frac{1}{1-y}+\frac{1}{1+y}\right]\mathrm{d}y\\
&=\Big[-\log(1-y)+\log(1+y)\Big]_{y=0}^{y=x}=\log\left(\frac{1+x}{1-x}\right)
\end{aligned}$$

因此 $\mathsf{e}^{2x}-1\le\frac{2x}{1-x}$。因此，我们进行如下计算

$$\begin{aligned}
&\frac{\|\boldsymbol{x}_t-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}{\|\boldsymbol{x}_0-\boldsymbol{x}_\star\|_{\boldsymbol{A}}}\le\left(\kappa_{\mathrm{Kap}}^{2/t}-1\right)^{t/2}\le\left(\frac{2\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})/t}{1-\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})/t}\right)^{t/2}\\
&=\left(\frac{2\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})}{2t/3+[t/3-\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})]}\right)^{t/2}\le\left(\frac{3\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})}{t}\right)^{t/2}
\end{aligned}$$

在事件 $t/3\ge\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})$ 发生时。另一方面，如果 $t/3<\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})$，则结果(3.3)显然成立。证明完毕。

B.3. 命题 3.5 的证明。 我们针对复值向量证明该结果；实值情形类似。考虑矩阵 $\boldsymbol{B} = \hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{A}}^{-1/2}$ 其特征分解为

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{Q}^* \quad \text{where} \quad \boldsymbol{\Lambda} = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n).$$

我们需要证明均方误差界

$$\mathbb{E}\left|\operatorname{tr}(\log \boldsymbol{B}) - \frac{1}{t}\sum_{i=1}^{t} \boldsymbol{z}_i^*(\log \boldsymbol{B})\boldsymbol{z}_i\right|^2 \le \frac{4\log(\kappa_{\text{Kap}})}{t}.$$

为此，我们引入一个复高斯向量 $\boldsymbol{\omega} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$，并令 $\boldsymbol{z} = \sqrt{n}\,\boldsymbol{\omega}/\|\boldsymbol{\omega}\|$。只需证明

$$\text{(B.1)} \qquad \mathbb{E}[\boldsymbol{z}^*(\log \boldsymbol{B})\boldsymbol{z}] = \operatorname{tr}(\log \boldsymbol{B}) \quad \text{and} \quad \operatorname{Var}[\boldsymbol{z}^*(\log \boldsymbol{B})\boldsymbol{z}] \le 4\log(\kappa_{\text{Kap}})$$

当 Kaporin 条件数为 $\log(\kappa_{\text{Kap}}) \le n$ 时。

我们首先注意到，旋转不变性意味着 $\boldsymbol{z} \overset{\mathcal{D}}{=} \boldsymbol{Q}^*\boldsymbol{z}$ 因此

$$\boldsymbol{z}^*(\log \boldsymbol{B})\boldsymbol{z} \overset{\mathcal{D}}{=} \boldsymbol{z}^*(\log \boldsymbol{\Lambda})\boldsymbol{z} = \sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)|\boldsymbol{z}(i)|^2.$$

接下来，我们验证随机迹估计量是无偏的。

$$\text{(B.2)} \qquad \mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)|\boldsymbol{z}(i)|^2\right] = \sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)\,\mathbb{E}|\boldsymbol{z}(i)|^2 = \sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i) = \operatorname{tr}(\log \boldsymbol{B}).$$

这证实了(B.2)的第一部分。

为了对方差定界，我们利用高斯向量 $\boldsymbol{\omega} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I})$ 进行计算。

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}\left|\sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)|\boldsymbol{\omega}(i)|^2\right|^2 - \left|\sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)\right|^2 = \operatorname{Var}\left[\sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)|\boldsymbol{\omega}(i)|^2\right] \\
&= \sum_{i=1}^{n} (\log \lambda_i)^2 \operatorname{Var}\left[|\boldsymbol{\omega}(i)|^2\right] = \sum_{i=1}^{n} (\log \lambda_i)^2.
\end{aligned}$$

这里我们利用了 $\boldsymbol{\omega}(i)$ 变量的独立性以及恒等式 $\operatorname{Var}\left[|\boldsymbol{\omega}(i)|^2\right] = 1$，该恒等式对复高斯变量成立。由于 $\boldsymbol{\omega}$ 的长度与方向相互独立，我们计算

$$\mathbb{E}\left|\sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)|\boldsymbol{\omega}(i)|^2\right|^2 = \frac{\mathbb{E}\|\boldsymbol{\omega}\|^4}{n^2}\,\mathbb{E}\left|\sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)|\boldsymbol{z}(i)|^2\right|^2 = \frac{n^2+n}{n^2}\,\mathbb{E}\left|\sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)|\boldsymbol{z}(i)|^2\right|^2,$$

这里我们再次利用了 $\operatorname{Var}\left[|\boldsymbol{\omega}(i)|^2\right] = 1$ 这一事实。经过整理可得

$$\mathbb{E}\left|\sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)|\boldsymbol{z}(i)|^2\right|^2 = \frac{n}{n+1}\left[\sum_{i=1}^{n} (\log \lambda_i)^2 + \left(\sum_{i=1}^{n} \log(\lambda_i)\right)^2\right].$$

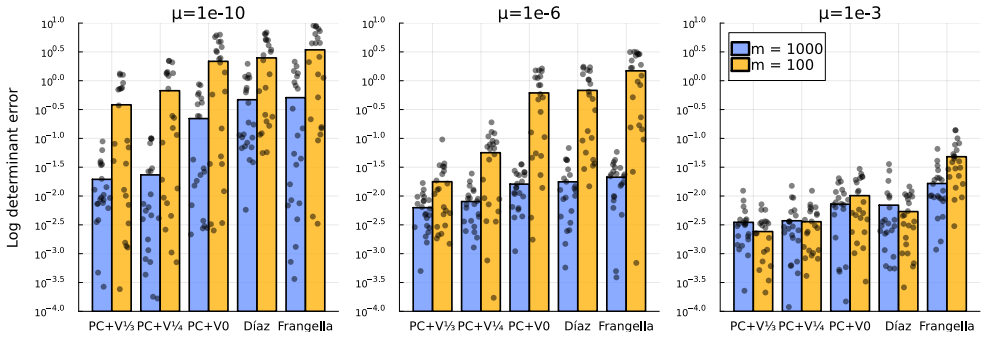

FIG. 9。

Comparison of log determinant calculations with Krylov depths $m = 1000$ (blue) and $m = 100$ (yellow).

减去平方均值(B.2) 可得

$$\operatorname{Var}\left[\sum_{i=1}^{n}\log(\lambda_i)|\boldsymbol{z}(i)|^2\right]$$
$$= \frac{n}{n+1}\left[\sum_{i=1}^{n}(\log\lambda_i)^2 - \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n}\log(\lambda_i)\right)^2\right] = \frac{n}{n+1}\sum_{i=1}^{n}(\log\lambda_i')^2,$$

其中我们引入了 $\lambda_i' = \lambda_i/\left(\prod_{j=1}^{n}\lambda_j\right)^{1/n}$，并注意到 $\prod_{i=1}^{n}\lambda_i' = 1$和 $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i' = \kappa^{1/n}\,\mathrm{Kap}$。接着回顾标准恒等式：

$$1 + t + \frac{1}{2}t^2 \le \mathrm{e}^t \quad \text{and therefore} \quad (\log u)^2 \le 2(u - 1 - \log u).$$

我们得到方差界

$$\operatorname{Var}\left[\sum_{i=1}^{n}\log(\lambda_i)|\boldsymbol{z}(i)|^2\right] \le \frac{2n}{n+1}\sum_{i=1}^{n}\left(\lambda_i' - 1 - \log\lambda_i'\right) = \frac{2n^2}{n+1}\left(\kappa_{\mathrm{Kap}}^{1/n} - 1\right).$$

最后注意到 $t \mapsto (\mathrm{e}^t - 1)/t$ 在 $t > 0$ 上严格递增，因此

$$\frac{\kappa_{\mathrm{Kap}}^{1/n} - 1}{\log(\kappa_{\mathrm{Kap}})/n} \le 2 \quad \text{if} \quad \log(\kappa_{\mathrm{Kap}}) \le 1.42n.$$

这就完成了证明。

附录C. Krylov 深度的比较。 图9比较了在两种不同 Krylov 深度参数下得到的随机行列式估计，$m = 1000$ 和 $m = 100$，同时将样本数固定为 10。增大 Krylov 深度会降低估计量的偏差，因为它使矩阵对数的 Krylov 近似更加准确。参见 第 3.3 小节和 5.4 以了解这些计算的细节。

较大的 $10\times$ Krylov 子空间有时能将对数行列式的精度提高 1–2 个数量级，但效果取决于 μ和预条件器。当 $\mu = 10^{-3}$ 时， $m = 1000$ 和 $m = 100$ 的精度几乎相同

或者当 $\mu = 10^{-6}$ 并且我们使用精度很高的 **PC+V1/3** 预条件器时。尽管 Krylov 深度 $m = 1000$ 对于比较很有参考价值，但我们预计，在大多数情况下，这种深度的计算成本过高，不切实际，因此我们重点介绍深度 $m = 100$ 的结果，见第 5 节。