计算物理学(A)第三次作业

物理学院　陈伟杰 1500011335

May 1, 2018

1　QR分解

1.1　Householder与Givens的计算复杂度

首先假设被分解矩阵A是一个$n \times n$非稀疏矩阵：

对于Householder方法，由于Hoseholder反射子的结构特点，矩阵Q和R与Householder反射子的乘积都为$O(n^2)$，且随着分解次数的增加，Householder反射子的有效尺寸在减小。因此当i从1走到n，最终Q矩阵贡献的复杂度为$\sum_{i=1}^{n} 4n(n-i) = O(2n^3)$，R贡献的复杂度为$\sum_{i}^{n} 4(n-i)^2 = O(4n^3/3)$，最终得到Householder计算复杂度为$O(10/3n^3)$。

对于Givens方法，首先考虑到Givens旋转矩阵是一个稀疏矩阵，与被分解矩阵的相乘主要是用2×2矩阵相乘，大致是$O(6n)$量级，即两次乘法一次加法。迭代过程中对R和Q分别需要乘一次Givens旋转矩阵。对于R，由于随着分解次数增加，需要做变换的元素个数变少，因此贡献$\sum_{i=1}^{n} 6(n-i)^2 = O(2n^3)$；对于Q矩阵，则贡献$\sum_{i=1}^{n} 6(n-i)n = O(3n^3)$，最终得到Givens分解的复杂度为$O(5n^3)$。

1.2　Householder与Givens的程序效率比较

将测试程序运行5次，每次随机生成20个6×6矩阵用Householder或者Givens方法进行QR分解，并记下每次运行的时间，得到下表：

Method/Time(s)	1	2	3	4	5
Householder	0.0190	0.0270	0.0190	0.0200	0.0240
Givens	0.0180	0.0230	0.0170	0.0180	0.0240

将矩阵尺寸改为20×20，再做一次实验得：

Method/Time(s)	1	2	3	4	5
Householder	0.2712	02842	0.2412	0.2943	0.2972
Givens	0.2982	0.3042	0.2682	0.3032	0.3392

注意到当矩阵尺寸较小时，理论上分析得到领头阶复杂度更大的Givens比Householder快，这可能是因为计算复杂度在n比较小时仍保持三次函数的整体特点，因此领头阶系数大的Givens也可以比Householder快但是当尺寸比较大时，领头阶贡献的数量级远大于幂次小于3的项，因此计算复杂度主要依赖于领头阶系数的大小，故Householder比Givens快。

2 幂次法求矩阵最大模的本征值和本征矢

2.1 经典振动解

已知矩阵方程$\ddot{x} = -A \cdot x$，带入试探解$x(t) = xe^{-i\omega t}$：

$$A \cdot x = -\ddot{x} = -(-\omega^2)x = \omega^2 x = \lambda x$$

因此振幅x满足一个本征方程。

2.2 幂次法求解

假设矩阵A可对角化，则只要初始矢量$q(0)$在v_1方向投影不恒为0，则可以由A的正交归一完备基展开

$$q^{(0)} = \sum_{i=1}^{N} c_i v_i$$

在迭代过程中，可以给出$q^{(k)}$的表达式，其中$\lambda_1 > \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_N$：

$$q^{(k)} = \frac{A^k q^{(0)}}{\|A^k q^{(0)}\|} = \frac{\sum_{i=1}^{N} c_i \lambda_i^k v_i}{(\sum_{i=1}^{N} |c_i \lambda_i^k|^2)^{1/2}}$$

只要$c_1 \neq 0$，不妨取$c_1 > 0$，则有下列极限：

$$\lim_{k\to\infty} q^{(k)} = \lim_{k\to\infty} \frac{\sum_{i=1}^{N} c_i \lambda_i^k v_i}{(\sum_{i=1}^{N} |c_i \lambda_i^k|^2)^{1/2}} = \lim_{k\to\infty} \frac{\sum_{i=1}^{N} c_i \lambda_i^k v_i}{|c_1 \lambda_1^k| \sqrt{1 + o(1/|\lambda_1|^{2k})}} = v_1$$

另一方面考虑$\nu^{(k)}$：

$$\begin{aligned}
\lim_{k\to\infty} \nu^{(k)} &= \lim_{k\to\infty} (q^{(k)})^\dagger A q^{(k)} = \lim_{k\to\infty} (q^{(k)})^\dagger q^{(k+1)} \frac{\|A^{k+1} q^{(0)}\|}{\|A^k q^{(0)}\|} \\
&= \lim_{k\to\infty} (q^{(k)})^\dagger q^{(k+1)} \frac{|c_1 \lambda_1^{k+1}| \sqrt{1 + o(1/|\lambda_1|^{2k+2})}}{|c_1 \lambda_1^k| \sqrt{1 + o(1/|\lambda_1|^{2k})}} \\
&= \|v_1\|^2 \lambda_1 = \lambda_1
\end{aligned}$$

综上，只要初始矢量$q^{(0)}$在v_1方向投影不恒为0，幂次法迭代最终会得到相应的本征值和本征矢，即：

$$\lim_{k\to\infty} \nu^{(k)} = \lambda_1 \qquad \lim_{k\to\infty} q^{(k)} = v_1$$

对于$N = 10$的情况，迭代1000次，求出最大本征值和相应的本征矢如下：

$$\begin{aligned}
&\omega_{max}^2 = \lambda_1 = 4.00000 \\
&v_1 = [0.316228, -0.316228, 0.316228, -0.316228, 0.316228, \\
&\quad -0.316228, 0.316228, -0.316228, 0.316228, -0.316228]
\end{aligned}$$