计算物理作业 Ex03

物理学院 *Bryan*[*] 学号：1500066666

A QR 分解的算法复杂度

这里从理论上给出 QR 分解的算法复杂度。由于我们只关心领头阶的贡献，故下述讨论中均记 $(n - \text{const.}) \sim n$; 例如，对行、列指标的求和有时只有 $(n-1)$ 项，但为简单起见，下面统一写为 $\sum^n$. 此外，假定加减、乘除对运算量的贡献均为 1; 对于现代 CPU 而言，这一假定基本上是成立的[1]。

A.1 Householder 方法

- 逐列循环 $\sum_k^n$:
  - 考察对角元及以下元素，构成子空间矢量 x; 构造 $(n-k+1) \sim (n-k)$ 维 Householder 变换，大致需进行如下操作：
    * 求模方 $\|x\|^2$, 复杂度 $\mathcal{O}\big(2(n-k)\big)$;
    * 据 x 构造变换矢量 v, $\mathcal{O}(1)$;
    * 求 $\|v\|^2$, 利用 $\|x\|^2$, 仅需 $\mathcal{O}(1)$.

    这一步共需计算量 $\mathcal{O}\big(2(n-k)\big)$.
  - 对 $\sim (n-k)$ 维子空间作用 Householder 变换 $H = \mathbb{1} - 2vv^{\mathrm{T}}/\|v\|^2$,
    * 首先看 v^{T}, 作用在 $(n-k)$ 维子空间上，$\mathcal{O}\big(2(n-k)^2\big)$;
    * $H = \mathbb{1} - 2vv^{\mathrm{T}}/\|v\|^2$, 表面上看还需 $\mathcal{O}\big(4(n-k)^2\big)$; 但实际可对每一行 i 先计算系数 $2v_i/\|v\|^2$, 这样计算量可削减为 $\mathcal{O}\big(2(n-k)^2\big)$.

    这一步共 $\mathcal{O}\big(4(n-k)^2\big)$.

  这样便得到了 QR 分解后的 R 矩阵，

$$\text{计算量} \sim \sum_k^n 4\,(n-k)^2 \sim \frac{4}{3}\,n^3 \tag{A.1}$$

  某些参考材料给出 $\mathcal{O}\big(\frac{2}{3}\,n^3\big)$ 的计算量，那是仅考虑了乘法计算的结果[2]。

  事实上，到此为止我们已经完成了 QR 分解，只是没有显式地获得 Q 矩阵；但大部分情况下我们只需知道等价的 Householder 矢量 v 即可，无需显式地写出 Q 矩阵。

---

[*] 邮箱：pls_contact_via_github@fake_email.com

[1] 参见 https://stackoverflow.com/a/39720217.

[2] 参见 https://en.wikipedia.org/wiki/QR_decomposition#Using_Householder_reflections.

- 若要进一步获得显式的 Q 矩阵，只需将 Householder 矩阵累乘即得；注意到 Householder 矩阵作用的子空间维数 $(n-1),(n-2),\dots$ 顺次递减，完全类似，有：

$$\text{计算量} \sim \sum_{k'}^{n} 4\,(k')^2 \sim \frac{4}{3}\,n^3 \tag{A.2}$$

即若要显式地得到 Q, 总计算量为 $\mathcal{O}\big(\frac{8}{3}\,n^3\big)$.

A.2　Givens 方法

- 逐行循环 $\sum_i^n$:
  - 对 $j<i$ 逐列循环 $\sum_j^i$:
    * 构造转动矩阵，$\mathcal{O}(1)$;
    * 作用变换，仅会影响 i,j 两行；且前面的迭代已经保证 $k<j<i$ 时 $R_{ik}=R_{ij}=0$, 故只需 $\mathcal{O}\big(6(n-j)\big)$; 这里的 6 即二维旋转的计算量。
    * 若还需显式求出 Q 矩阵，还需 $\mathcal{O}(6i)$; 注意由于 Givens 变换局限在 $\sim i$ 维子空间内，故只需 $\sim 6i$ 而非 $6n$ 步计算。

    共 $\mathcal{O}\big(6(n-j)\big)+\mathcal{O}(6i)$.

求和可得：

$$\text{计算量} \sim \sum_i^n \sum_j^i \big(6(n-j)+6i\big) \sim \sum_i^n \big((6ni-3i^2)+6i^2\big) \sim 2n^3+2n^3=4n^3 \tag{A.3}$$

Householder 和 Givens 的计算量（领头阶）综合比较如下：

方法	求 R	同时给出显式 Q
Householder	$\frac{4}{3}\,n^3$	$\frac{8}{3}\,n^3$
Givens	$2n^3$	$4n^3$

可见，两种方法的复杂度同阶，Givens 要更高一些；且对任一种方法而言，若要显式地给出 Q, 计算量差不多要翻倍。由此可得，最好的办法是用 Householder 矢量或 Givens 转动参数储存 Q, 需要 Q 作用时再根据参数逐次作用。

B 一维原子链的振动

考虑一维原子链的振动，取周期边条件，有[3]：

$$\ddot{x} = -Ax, \quad (-A)_{ij} = \delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j} - 2\delta_{ij}, \quad x \in \mathbb{C}(t) \tag{B.1}$$

单频振动 $x(t) = x\, e^{-i\omega t}$, 注意到 $\frac{\partial^2}{\partial t^2} e^{-i\omega t} = (-i\omega)^2 e^{-i\omega t} = -\omega^2 e^{-i\omega t}$, 可得:

$$Ax = \lambda x, \quad \lambda = \omega^2, \quad x \in \mathbb{C} \tag{B.2}$$

采用固体物理中的符号约定，记平衡时原子间距为 a, 则上式有平面波解:

$$x_n = e^{inaq}, \quad \lambda = \omega^2 = 4\sin^2\left(\frac{aq}{2}\right) \tag{B.3}$$

其中波矢 $q \in \frac{2\pi}{Na} \cdot \mathbb{Z}$, 由周期性，可限制 $aq \in (-\pi, \pi]$ 或 $[-\pi, \pi)$, 恰给出 N 个模式；进一步，

$$\begin{gathered}
\lambda_{\max} = \begin{cases} 4\sin^2\left(\dfrac{\pi}{2}\right) = 4, & N \text{ 为偶数}, \\ 4\sin^2\left(\dfrac{\pi}{2} - \dfrac{\pi}{2N}\right) = 4\cos^2\left(\dfrac{\pi}{2N}\right), & N \text{ 为奇数}, \end{cases} \\
x_n = \begin{cases} e^{in\pi} = (-1)^n, & N \text{ 为偶数}, \\ (-1)^n \exp\left(-i\pi\,\dfrac{n}{N}\right), & N \text{ 为奇数}, \end{cases}
\end{gathered} \tag{B.4}$$

---

[3]注：A 的分量能写为这一形式，当且仅当 $N \geq 3$. $N = 2$ 时，编号 $i \pm 1$ 原子等同，实际有:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{pmatrix}$$

$N = 1$ 时，模型退化为一个首尾相连的轻弹簧圈，不存在振动模式，$A = \mathbf{0}$.