1 记号

记 I_n 为 n 阶单位矩阵, O 为零矩阵, 上标 T 表示转置, H 表示共轭转置, $\bar{z}$ 表示复数 z 的共轭, $\mathrm{diag}\{\cdots\}$ 表示对角矩阵, δ_{kj} 为 Kronecker 符号.

若 $f:\mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{R}$, 记 $(\mathbb{R}^M)^{\otimes N} \cong \mathbb{R}^{\overbrace{M\times\cdots\times M}^{N个}}$ 为 $\mathbb{R}^N$ 上的 M 阶张量空间, $\mathbf{n}=(n_1,\cdots,n_N)^T$,

$$\begin{aligned}\mathbf{n}_{k\pm} :=&(n_1,\cdots,n_k\pm 1,\cdots,n_N)^T\\ =&(n_1,\cdots,n_k,\cdots,n_N)^T \pm (0,\cdots,0,\underset{\text{kth}}{1},0\cdots,0)^T,\end{aligned} \tag{1}$$

$$f_{k\pm}(\mathbf{n}) := f(\mathbf{n}_{k\pm}). \tag{2}$$

$\mathbb{R}^N$ 上的离散 Laplace 算子 Δ 可看作是 $(\mathbb{R}^M)^{\otimes N}$ 上的一个卷积核 Δ. 若 $\mathbf{X}=(f(\mathbf{k}))_{\mathbf{k}\in\mathbb{R}^N,\ \#\mathbf{k}=M^N} \in (\mathbb{R}^M)^{\otimes N}$, 则 $\mathbf{X}$ 作用离散 Laplace 算子后的 $\mathbf{k}$ 分量为

$$(\Delta\mathbf{X})(\mathbf{k}) = (\mathbf{X}*\Delta)(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^{N}(f_{i+}(\mathbf{k})+f_{i-}(\mathbf{k})) - 2Nf(\mathbf{k}), \tag{3}$$

其中 $*$ 是卷积运算.

2 循环矩阵的特征值分解

n 阶循环矩阵

$$A=\begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-2} & a_{n-1}\\ a_{n-1} & a_0 & a_1 & \cdots & a_{n-3} & a_{n-2}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots\\ a_2 & a_3 & a_4 & \cdots & a_0 & a_1\\ a_1 & a_2 & a_3 & \cdots & a_{n-1} & a_0 \end{bmatrix} \tag{4}$$

可由基本循环矩阵

$$J=\begin{bmatrix} & 1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \\ 1 & & & & \end{bmatrix}_{n\times n} \tag{5}$$

表示为

$$A=a_0I_n+a_1J+a_2J^2+\cdots+a_{n-1}J^{n-1}. \tag{6}$$

这是因为

$$J^k=\begin{bmatrix} O & I_{n-k} \\ I_k & O \end{bmatrix},\qquad k=0,1,2,\cdots,n-1. \tag{7}$$

令

$$g(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_{n-1}x^{n-1}, \tag{8}$$

则 $A=g(J)$.

J 的特征多项式 $\Delta_J(\lambda)=|\lambda I_n-J|=\lambda^n-1$, 所以 J 的特征值 $\lambda_k=\omega_k=e^{i2\pi k/n}$, $k=0,1,2,\cdots,n-1$.

ω_k 对应的特征向量 $\alpha_k=(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T$ 满足

$$\omega_k(x_1,x_2,\cdots,x_n)^T=(x_2,x_3,\cdots,x_1)^T,$$

即

$$\frac{x_2}{x_1}=\frac{x_3}{x_2}=\cdots=\frac{x_n}{x_{n-1}}=\frac{x_1}{x_n}=\omega_k$$

或者

$$x_m=x_1\omega_k^{m-1},\qquad m=1,2,\cdots,n,$$

取 $x_1=1$, 可得 J 的特征值 ω_k 对应的特征向量 $\alpha_k=(1,\omega_k,\omega_k^2,\cdots,\omega_k^{n-1})^T$, $k=0,1,2,\cdots,n-1$.

因为 $A = g(J)$, 所以 A 的特征值为 $g(\omega_k)$, 对应的特征向量为 α_k, $k = 0, 1, 2, \cdots, n-1$, 因此 A 有特征值分解 $A = P\Lambda P^{-1}$, 其中 $P = (\alpha_0, \alpha_1, \cdots, \alpha_{n-1})$, $\Lambda = \mathrm{diag}\{g(\omega_0), g(\omega_1), \cdots, g(\omega_{n-1})\}$.

注意到, $P = F^H$, F 是离散 Fourier 变换矩阵, 并且

$$\begin{aligned}\alpha_k^H \alpha_j &= \sum_{m=0}^{n-1} \bar{\omega}_k^m \omega_j^m \\ &= \sum_{m=0}^{n-1} e^{-i2\pi km/n} e^{i2\pi jm/n} \\ &= \sum_{m=0}^{n-1} e^{i2\pi(j-k)m/n} \\ &= n\delta_{jk},\end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix} g(\omega_0) \\ g(\omega_1) \\ \vdots \\ g(\omega_{n-1}) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} a_0 + a_1\omega_0 + \cdots + a_{n-1}\omega_0^{n-1} \\ a_0 + a_1\omega_1 + \cdots + a_{n-1}\omega_1^{n-1} \\ \vdots \\ a_0 + a_1\omega_{n-1} + \cdots + a_{n-1}\omega_{n-1}^{n-1} \end{bmatrix} \\ &= P^T \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_{n-1} \end{bmatrix} \\ &= F^H \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_{n-1} \end{bmatrix},\end{aligned} \tag{10}$$

所以 $PP^H = nI_n$, 进而 $A = F^H \Lambda F/n$.

3 循环嵌入法

本部分的离散傅里叶变换及其逆变换与通常意义下的相反.

设 $Y(x)$ 是均值为 0 的平稳 Gauss 过程, 则对于任意的两个点 x, y, 存在相关函数 $r(\cdot)$ 使得协方差 $\mathbb{E}[Y(x)Y(y)] = r(|x-y|)$, 现在生成随机向量 $y = (Y(x_0), \cdots, Y(x_m))^T \sim \mathcal{N}(0, R)$, 其中协方差矩阵 $R = (R_{pq})_{(m+1)\times(m+1)} = (r(|x_p - x_q|))_{(m+1)\times(m+1)}$.

设 $\Omega = \{x_0, \cdots, x_m\}$ 是均匀的节点, 那么协方差矩阵 R 是一个半正定的对称 Toeplitz 矩阵, 于是 R 可由首行向量 $r = (r_0, r_1, \cdots, r_m)$ 唯一确定, 其中 $r_k = r(|x_0 - x_k|)$.

实际上, R 显然是对称的. 另外由于 Ω 是均匀的, 所以 $R_{p+1,q+1} = r(|x_{p+1} - x_{q+1}|) = r(|x_p - x_q|) = R_{pq}$, 即 R 是 Toeplitz 矩阵. 最后, 对于任意的 $u \in \mathbb{R}^{m+1}$,

$$\begin{aligned} u^T R u &= u^T \mathbb{E}[yy^T] u \\ &= \mathbb{E}[u^T y y^T u] \\ &= \mathbb{E}[(y^T u)^T (y^T u)] \\ &= Var(y^T u) \geqslant 0, \end{aligned} \tag{11}$$

这里用到了正态分布的线性性 $y^T u \sim \mathcal{N}(0, Var(y^T u))$, 所以 R 是半正定的.

为了生成 y, 需要将协方差矩阵 R 嵌入到一个对称 Toeplitz 矩阵中使其变成一个循环矩阵. 设 S 是一个 $(2M)\times(2M)$ 的对称 Toeplitz 矩阵, 其首行向量 $s = (s_0, \cdots, s_{2M-1})$ 定义为

$$s_k = r_k, \qquad k = 0, \cdots, m, \tag{12}$$

$$s_{2M-k} = r_k, \qquad k = 1, \cdots, m-1, \tag{13}$$

如果 $M > m$, $s_{m+1}, \cdots, s_{2M-m}$ 可取任意适合的值 (下面要求 S 半正定以满足 Gauss 过程的协方差矩阵的要求), 那么由上述方法 R 嵌入得到的 S 是

一个循环矩阵, 并且沿主对角线的任意一个 $(m+1)\times(m+1)$ 块都等于 R.

由于 S 是一个循环矩阵, 那么存在特征分解 $S=(1/(2M))F\Sigma F^H$, 其中 $F=(\exp(2\pi ipq/(2M)))_{0\leqslant p,q\leqslant 2M-1}$ 是离散 Fourier 变换矩阵, Σ 是对角线向量为 $\tilde{s}=Fs$ 的对角矩阵, 由此可见, S 半正定当且仅当 $\tilde{s}$ 中的元素非负.

下面假定 S 是一个半正定矩阵.

令 $\epsilon=\epsilon_1+i\epsilon_2$ 是一个复随机向量, 其中 ϵ_1, ϵ_2 是实 $2M$ 维的服从均值为 0 的正态分布的随机向量, 且 $\mathbb{E}[\epsilon_k\epsilon_j^T]=\delta_{kj}I_{2M}$, 则我们有如下结论, 向量 $e=F(\Sigma/(2M))^{1/2}\epsilon$ 的实部与虚部独立并且均服从于 $\mathcal{N}(0,S)$, 于是 e 的实部和虚部的任意连续 $(m+1)$ 长的子向量独立且服从于 $\mathcal{N}(0,R)$.

事实上, 记

$$\begin{aligned}F&=(\exp 2\pi ipq/(2M))_{pq}\\&=(\cos(2\pi pq/(2M)))_{pq}+i(\sin(2\pi pq/(2M)))_{pq}\\&=:A+iB,\end{aligned}\tag{14}$$

$$D:=(\Sigma/(2M))^{1/2},\tag{15}$$

则

$$\begin{aligned}S&=(A+iB)D^2(A-iB)\\&=(AD^2A+BD^2B)+i(BD^2A-AD^2B)\\&=AD^2A+BD^2B,\qquad S\text{ 实矩阵}\end{aligned}\tag{16}$$

$$\begin{aligned}e&=FD\epsilon\\&=(A+iB)D(\epsilon_1+i\epsilon_2)\\&=(AD\epsilon_1-BD\epsilon_2)+i(AD\epsilon_2+BD\epsilon_1).\end{aligned}\tag{17}$$

即

$$BD^2A=AD^2B,\tag{18}$$

e 的实部是

$$Re := Re(e) = AD\epsilon_1 - BD\epsilon_2, \tag{19}$$

虚部是

$$Im := Im(e) = AD\epsilon_2 + BD\epsilon_1. \tag{20}$$

于是,

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}[ReRe^T] \\
&= \mathbb{E}[(AD\epsilon_1 - BD\epsilon_2)(\epsilon_1^T DA - \epsilon_2^T DB)] \\
&= AD\mathbb{E}[\epsilon_1\epsilon_1^T]DA + BD\mathbb{E}[\epsilon_2\epsilon_2^T]DB - AD\mathbb{E}[\epsilon_1\epsilon_2^T]DB - BD\mathbb{E}[\epsilon_2\epsilon_1^T]DA \\
&= AD^2A + BD^2B \\
&= S.
\end{aligned} \tag{21}$$

同理,

$$\mathbb{E}[ImIm^T] = S. \tag{22}$$

$$\begin{aligned}
&\mathbb{E}[ReIm^T] \\
&= \mathbb{E}[(AD\epsilon_1 - BD\epsilon_2)(\epsilon_2^T DA + \epsilon_1^T DB)] \\
&= AD\mathbb{E}[\epsilon_1\epsilon_2^T]DA - BD\mathbb{E}[\epsilon_2\epsilon_1^T]DB + AD\mathbb{E}[\epsilon_1\epsilon_1^T]DB - BD\mathbb{E}[\epsilon_2\epsilon_2^T]DA \\
&= AD^2B - BD^2A \\
&= O.
\end{aligned} \tag{23}$$

循环嵌入法生成 $m+1$ 维随机向量 $y \sim \mathcal{N}(0, R)$ 的步骤如下:

1. 将协方差矩阵 R 嵌入到一个半正定的对称 Toeplitz 矩阵中得到一个 $(2M)\times(2M)$ 的循环矩阵 S, 使得 $s_k = r_k$, $k = 0, \cdots, m$, $s_{2M-k} = r_k$, $k = 1, \cdots, m-1$, 其中 r 和 s 分别为 R 和 S 的首行向量.

2. 通过快速傅里叶变换计算 $\tilde{s} = Fs$, 组成向量 $(\tilde{s}/(2M))^{1/2}$.

3. 生成 $2M$ 维向量 $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$, 其中实随机向量 ϵ_1 和 ϵ_2 独立且都服从于 $\mathcal{N}(0, I_{2M})$.

4. 计算 $\tilde{e} = (\tilde{e}_k) = \epsilon_k(\tilde{s}_k/(2M))^{1/2}$.

5. 使用快速傅里叶变换计算 $e = F\tilde{e}$, 则其实部和虚部的任意连续 $m+1$ 长的子向量独立且服从于 $\mathcal{N}(0, R)$.

6. 回到 3 进行循环生成不同的 y.

4 协方差

因为

$$\mathbf{Y} = \Delta\mathbf{B}, \qquad \mathbf{B} \in (\mathbb{R}^M)^{\otimes N}, \tag{24}$$

所以协方差

$$\begin{aligned}
\mathbf{C} &= \mathbb{E}[\mathbf{Y}(\mathbf{n})(Y(\mathbf{n}+\mathbf{k}))_{\mathbf{k}}] \\
&= \mathbb{E}[\mathbf{Y}(\mathbf{n})(B(\mathbf{n}+\mathbf{k}))_{\mathbf{k}} * \Delta] \\
&= \mathbb{E}[(\mathbf{Y}(\mathbf{n})B(\mathbf{n}+\mathbf{k}))_{\mathbf{k}}] * \Delta \\
&= \mathbb{E}[((\mathbf{B} * \Delta)(\mathbf{n})B(\mathbf{n}+\mathbf{k}))_{\mathbf{k}}] * \Delta \\
&= (\mathbb{E}[(\mathbf{B} * \Delta)(\mathbf{n})B(\mathbf{n}+\mathbf{k})])_{\mathbf{k}} * \Delta \\
&= \left(\mathbb{E}\left[\left(\sum_{i=1}^{N}(B_{i+}(\mathbf{n}) + B_{i-}(\mathbf{n})) - 2NB(\mathbf{n})\right) B(\mathbf{n}+\mathbf{k})\right]\right)_{\mathbf{k}} * \Delta.
\end{aligned} \tag{25}$$

而

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[B(\mathbf{n}+\mathbf{k})\sum_{i=1}^{N}B_{i+}(\mathbf{n})\right] &= \sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}[B(\mathbf{n}+\mathbf{k})B_{i+}(\mathbf{n})] \\
&= \sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}[B(\mathbf{n}+\mathbf{k})B(\mathbf{n}_{i+})] \\
&= \frac{\sigma^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(||\mathbf{n}+\mathbf{k}||^{2H}+||\mathbf{n}_{i+}||^{2H}-||\mathbf{n}+\mathbf{k}-\mathbf{n}_{i+}||^{2H}\right) \\
&= \frac{\sigma^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(||\mathbf{n}+\mathbf{k}||^{2H}+||\mathbf{n}_{i+}||^{2H}-||\mathbf{k}_{i-}||^{2H}\right)
\end{aligned} \tag{26}$$

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\left[B(\mathbf{n}+\mathbf{k})\sum_{i=1}^{N}B_{i-}(\mathbf{n})\right] &= \sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}[B(\mathbf{n}+\mathbf{k})B_{i-}(\mathbf{n})] \\
&= \sum_{i=1}^{N}\mathbb{E}[B(\mathbf{n}+\mathbf{k})B(\mathbf{n}_{i-})] \\
&= \frac{\sigma^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(||\mathbf{n}+\mathbf{k}||^{2H}+||\mathbf{n}_{i-}||^{2H}-||\mathbf{n}+\mathbf{k}-\mathbf{n}_{i-}||^{2H}\right) \\
&= \frac{\sigma^2}{2}\sum_{i=1}^{N}\left(||\mathbf{n}+\mathbf{k}||^{2H}+||\mathbf{n}_{i-}||^{2H}-||\mathbf{k}_{i+}||^{2H}\right)
\end{aligned} \tag{27}$$

$$\mathbb{E}\left[B(\mathbf{n}+\mathbf{k})B(\mathbf{n})\right] = \frac{\sigma^2}{2}\left(||\mathbf{n}+\mathbf{k}||^{2H}+||\mathbf{n}||^{2H}-||\mathbf{k}||^{2H}\right) \tag{28}$$

将 (26), (27), (28) 代入 (25), 得

$$
\begin{aligned}
\mathbf{C} = \frac{\sigma^2}{2}\Bigg(&\sum_{i=1}^{N}\left(||\mathbf{n}+\mathbf{k}||^{2H} + ||\mathbf{n}_{i+}||^{2H} - ||\mathbf{k}_{i-}||^{2H}\right) \\
&- 2N\left(||\mathbf{n}+\mathbf{k}||^{2H} + ||\mathbf{n}||^{2H} - ||\mathbf{k}||^{2H}\right) \\
&+ \sum_{i=1}^{N}\left(||\mathbf{n}+\mathbf{k}||^{2H} + ||\mathbf{n}_{i-}||^{2H} - ||\mathbf{k}_{i+}||^{2H}\right)\Bigg)_{\mathbf{k}} * \Delta \\
&= \frac{\sigma^2}{2}\left(\sum_{i=1}^{N}(||\mathbf{n}_{i+}||^{2H} + ||\mathbf{n}_{i-}||^{2H}) - 2N||\mathbf{n}||^{2H}\right)_{\mathbf{k}} * \Delta \\
&- \frac{\sigma^2}{2}\left(\sum_{i=1}^{N}(||\mathbf{k}_{i+}||^{2H} + ||\mathbf{k}_{i-}||^{2H}) - 2N||\mathbf{k}||^{2H}\right)_{\mathbf{k}} * \Delta \\
&= -\frac{\sigma^2}{2}\left(\sum_{i=1}^{N}(||\mathbf{k}_{i+}||^{2H} + ||\mathbf{k}_{i-}||^{2H}) - 2N||\mathbf{k}||^{2H}\right)_{\mathbf{k}} * \Delta \\
&= -\frac{\sigma^2}{2}(||\mathbf{k}||^{2H})_{\mathbf{k}} * \Delta * \Delta.
\end{aligned}
\tag{29}
$$

5 离散 Fourier 变换

对于一维的带有周期边界条件的离散 Poisson 方程, 有

$$
Y = \Delta B = AB, \tag{30}
$$

其中 $B = (B_0, B_1, \cdots, B_{M-1})^T$, 边界 $B_0 = B_M$,

$$
A = \begin{bmatrix}
-2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \\
1 & -2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\
1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -2
\end{bmatrix}
$$

是一个循环矩阵, 则

$$
A = F^{-1}\Lambda F,
$$

其中 F 是标准化的离散 Fourier 变换矩阵,

$$\Lambda = \mathrm{diag}\{g(\omega_0), \cdots, g(\omega_{M-1})\},$$

$g(x) = x^{M-1} + x - 2$, $\omega_k = e^{i2\pi k/M}$, $k = 0, 1, \cdots, M-1$ 为 M 次单位根.

$$\begin{aligned} g(\omega_k) &= \omega_k^{M-1} + \omega_k - 2 \\ &= e^{i2\pi k(M-1)/M} + e^{i2\pi k/M} - 2 \\ &= e^{i2\pi k} e^{-i2\pi k/M} + e^{i2\pi k/M} - 2 \\ &= e^{-i2\pi k/M} + e^{i2\pi k/M} - 2 \\ &= 2\cos(2\pi k/M) - 2 \\ &= -4\sin^2(2\pi k/(2M)). \end{aligned} \tag{31}$$

对方程 (30) 进行离散 Fourier 变换, 得

$$\hat{Y} = FY = FAB = FF^{-1}\Lambda FB = \Lambda\hat{B}, \tag{32}$$

所以分量

$$\hat{Y}_k = -4\sin^2(2\pi k/(2M))\hat{B}_k. \tag{33}$$