

计算物理学作业 3

1. 完成所有题目。作业截止日期面议。
2. 请提交一个 PDF 格式的作业解答, 其中可以描述相应的解题步骤, 必要的图表等 (建议用 LaTeX 进行排版)
3. 请提交程序的源文件 (格式: python/fortran/c,c++), 并请提交一个源文件的说明文档 (任意可读格式), 主要说明源程序如何编译、输入输出格式等方面的事宜。请保证它们能够顺利编译通过, 同时运行后产生你的解答中的结果。
4. 所有文件打包后发送到课程的公邮。压缩包的文件名和邮件题目请取为“学号 + 姓名 + 作业 1” (如果多于一个人, 请写“所有学号 + 所有姓名 + 作业 1”)。

1. **Householder 与 Givens 在 QR 分解中的比较** 本题中我们试图比较一下利用 Householder 方法和 Givens 转动在进行矩阵的 QR 分解方面的有效性。为此我们考虑一个任意的矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 我们希望运用两种方法进行其 QR 分解。即寻找一个正交矩阵 Q 和一个上三角矩阵 R 使得 $A = QR$ 。

- (a) 对于一个任意的 (即一般不是稀疏的) 矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, 对于 $n \gg 1$, 利用 Householder 和 Givens 各分别需要多少次的计算才能获得其 QR 分解 (只需要给出领头阶的贡献)?
- (b) 写一个程序, 利用 Householder 变换求出任意一个实矩阵的 QR 分解。输入: 矩阵 A (以及它的大小 n), 输出相应的矩阵 Q 和 R ;
- (c) 同上问, 只不过利用 Givens 转动。
- (d) 为了实际测试两种方法的运行速度, 请随机产生 20 个 6×6 的随机矩阵, 它们的矩阵元可以取为在 $(-1, +1)$ 之间均匀分布的实数, 将这些矩阵喂给上面你写的程序, 给出两种方法获得的时间, 列表比较一下哪个方法更快。

2. **幂次法求矩阵最大模的本征值和本征矢** 本题中我们考虑利用幂次法 (power method) 来求一个矩阵 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ 的本征值的问题。同时将它运用到一个具体的实例: 一维原子链的振动。

考虑一个一维的原子链的经典振动问题。假定我们有 N 个原子, 每个都具有质量 m , 均匀相间排列在 x 轴上。相邻两个原子间有相同的弹簧 (倔强系数均为 k) 相连。为了简化讨论我们取 $k/m = 1$ 。整个原子链上的原子可以在其平衡位置附近做小振动。如果我们将第 i 个原子偏离平衡位置的位移记为 $x_i(t)$, 那么这些原子满足的经典运动方程为:

$$\ddot{x}_i - [x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i] = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (1)$$

当然为了明确起见，我们还必须加上合适的边界条件。为了方便我们取周期性边界条件，即 $x_{i+N}(t) \equiv x_i(t)$ 。因此，物理上这 N 个粒子实际上是连城一个圆环。于是上述方程可以写为矩阵方程，

$$\ddot{x} = -A \cdot x, \quad \text{多了个负号?} \quad (2)$$

其中 A 是一个矩阵，其矩阵元为： $(A)_{ij} = \delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j} - 2\delta_{ij}$ 。而 $x(t) = (x_1(t), \dots, x_N(t))^T \in \mathbb{C}^N$ 则是解矢量。我们将尝试 $x(t) = xe^{-i\omega t}$ 的解从而振幅 x 原则上可以是任意的复矢量，真实的物理的解被认为是这个复矢量解的实部： $x_{\text{phy}}(t) = \text{Re}(x(t))$ 。
振幅的分量可以不同？

(a) 考虑一个一维的原子链的经典振动解，尝试 $x(t) = xe^{-i\omega t}$ ，说明振幅 $x \in \mathbb{C}^N$ 实际上满足一个本征方程： $A \cdot x = \lambda x$ 。事实上本征值 $\lambda = \omega^2$ 。

(b) 是的，这个题目可以轻易地解析求解。但现在我们假装不知道这点。请写一个利用下面介绍的幂次法求解上述本征值问题的程序。求出体系最大的本征频率的平方 ω_{max}^2 。这对应于最大的 λ 。

【幂次法】：我们从任意一个单位矢量 $q^{(0)} \in \mathbb{C}^N$ 出发，我们从 $k = 1, 2, \dots$ 开始构造迭代，

$$\begin{aligned} z^{(k)} &= A \cdot q^{(k-1)}, \quad q^{(k)} = z^{(k)} / \|z^{(k)}\|, \\ \nu^{(k)} &= [q^{(k)}]^\dagger A q^{(k)}. \end{aligned} \quad (3)$$

现在假定矩阵 A 是可对角化的，从而它的本征值构成一组完备的基。我们约定矩阵 A 的本征值排列如下， $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_N$ 。相应的本征矢记为 v_1, \dots, v_N 。它们可以构成正交归一完备的一组基矢。将初始的矢量 $q^{(0)}$ 按照本征矢进行展开。证明只要初始的矢量 $q^{(0)}$ 在 v_1 方向的投影不恒等于零，上述的幂次法迭代最终会获得相应的本征值和本征矢，即：

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \nu^{(k)} = \lambda_1, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} q^{(k)} = v_1. \quad (4)$$

最后，对于 $N = 10$ 的情形，利用你的程序给出相应的本征值以及本征矢。

3. 关联函数的拟合与数据分析 请根据下载的数据文件 (它来自一个真实的格点 QCD 的 Monte Carlo 数值模拟)，通过拟合确定粲偶素的质量及误差。¹ 数据文件为 "correlation-function.dat"，可以按照通常的文本处理软件 (比如写字板) 打开。²

【这是什么 0】：在格点场论中我们感兴趣所谓的虚时关联函数 (或格林函数) $C(t)$ ，这是一个实函数，它的量子力学表达式为： $C(t) = \langle O(t) O(0)^\dagger \rangle$ ，其中 t 称为时间间隔，可以取一系列分立的数值 $t = 0, 1, \dots, N_t - 1$ ，其中 N_t 为虚时方向的时间片的

¹ 【注意】，由于已经采用了格点单位制 (就是自然单位制加上取格距 a 为长度单位)，因此本题目中所有物理量 (质量、时间等等) 都是无量纲的纯数。

² 如果你在这个目录里面没有发现这个文件，请稍安勿躁。随后会上载的。

数目； $O(t)$ 以及 $O^\dagger(t)$ 是互为厄米共轭的两个算符；³ $\langle \cdot \rangle$ 表示对某个特定的概率分布 (就是与 QCD 对应的规范场组态分布) 的期望值。

【文件的格式】：数据文件中包含的是函数 $C(t)$ 在统计独立的 N 个测量中给出的数值。每一次测量，我们称之为一个特定的组态。对于这个特例，组态的数目 $N = 200$ ，时间片的数目 $N_t = 64$ ，这些信息都包含在文件的第一行中。从第二行直到文件的最后，第一、第二、第三列的数据分别是 t ， $C(t)$ 的实部，以及 $C(t)$ 的虚部。⁴ 换句话说，文件从第二行到最后，包含了 $N = 200$ 个 block，每个 block 对应于一次测量；在每一个 block 之内，我们测量了 $N_t = 64$ 个物理量 $C(t)$ 。我们将第 i 次测量的在时间片 t 上的函数值记为 $C_{\text{raw}}^{(i)}(t)$ ，其中 $i = 1, \dots, N$ 标记不同的测量， $t = 0, 1, \dots, 63$ 则标记不同的时间片 t 。

都是0

【这是什么 1】：这个函数 $C(t)$ 测量的是格点量子色动力学中 $J^{PC} = 0^{-+}$ 粲偶素的关联函数。理论上我们知道，它的形式一定为：

$$C(t) = \sum_{n=0} A_n \left(e^{-E_n t} + e^{-E_n (N_t - t)} \right) = \sum_{n=0} A_n e^{-E_n N_t / 2} \cosh \left[E_n \left(\frac{N_t}{2} - t \right) \right], \quad (5)$$

其中 E_n ， $n = 0, 1, \dots$ 是具有粲偶素量子数的不同量子态的、分立的能级，它们是按照单调递增的顺序排好的： $E_0 < E_1 < \dots$ ，其中最低的能量 $E_0 \equiv m$ 就是粲偶素的质量，也就是我们这个题目中需要寻找的主要对象。本题中我们假定 $m N_t \gg 1$ 。由于在虚时方向的周期性边条件，函数 $C(t)$ 关于 $t = N_t / 2$ 应当是对称的，即 $C(t) = C(N_t - t)$ 。为此，我们首先构建对称化的函数的值，令

$$C^{(i)}(0) = C^{(i)}(N_t) = C_{\text{raw}}^{(i)}(0) \quad (6)$$

$$C^{(i)}(t) = C^{(i)}(N_t - t) = \frac{1}{2} \left(C_{\text{raw}}^{(i)}(t) + C_{\text{raw}}^{(i)}(N_t/2 - t) \right), \quad t = 1, 2, \dots, N_t/2. \quad (7)$$

这样一来，对于每一次测量我们就得到 $N_t/2 + 1 = 33$ 个测量值，并且 $C^{(i)}(t)$ 已经自动满足 $C^{(i)}(t) = C^{(i)}(N_t - t)$ 。

【要做什么】：本题以下各问的主要目的是通过对关联函数 $C(t)$ 的误差的正确估计，以及对不同时间片上测量的统计关联的考虑，利用拟合的方法获得粲偶素的质量 (包括其中心值和误差)。

(a) 首先利用样本平均值来估计函数 $C(t)$ 的中心值：

$$\bar{C}(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N C^{(i)}(t), \quad t = 0, \dots, N_t/2. \quad (8)$$

其中 $C^{(i)}(t)$ 是 (对称化操作后的) 第 t 个时间片上第 i 次测量获得的数值。忽略不同次测量之间的统计关联 (serial correlation)，估计出每个时间片 t 上的这个函数的误差 $\Delta C(t)$ 。注意，随着时间片 t 的增加，函数 $C(t)$ 的信噪比逐渐变差。给出相对误差 $\Delta C(t)/\bar{C}(t)$ 作为 t 的函数 (用百分误差表示)。

³ 可以认为 $O^\dagger(t)$ 是在时间片 t 处产生一个粲偶素的算符，相应的 $O(t)$ 是湮灭一个粲偶素的算符

⁴ 应当为零，但是由于 roundoff 误差并不为零，但这一列数据基本上可以忽略。

- (b) 我们的目的是希望抽取公式 (5) 中的聚偶素的质量 m 并合理估计其误差。一种办法是注意到函数的表达式中在 $1 \ll t \ll N_t/2$ 的时候可以近似利用单指数衰减来近似: $C(t) \sim e^{-mt}$ 。为此我们可以构建所谓的有效质量函数,

$$m_{\text{eff}}(t) = \ln \mathcal{R}(t) = \ln \frac{C(t)}{C(t+1)} \approx \ln \frac{\bar{C}(t)}{\bar{C}(t+1)}, t = 0, 1, \dots, t_0 \quad (9)$$

在前面的时间片, 由于有高激发态 (即 $n > 0$ 的态) 的污染, 因此 $m_{\text{eff}}(t)$ 并不是常数; 但对于比较大的时间片 $t \gg 1$, 这时关联函数将由一个指数函数所主导, 因此 $m_{\text{eff}}(t)$ 会趋于一个常数, 即 m , 这就是我们所说的平台区域; 在这个区域中, 我们将试图通过拟合找到最佳的平台值 m ; 但如果时间片过大, 则由于关联函数的信噪比变差, 我们将无法有效地确定质量。因此对于给定的数据, 对每一个时间片 $t = 0, \dots, t_0$ (其中 t_0 基本上是误差超过其信号的时间片), 我们可以构建一个有效质量函数 $m_{\text{eff}}(t) = \ln \frac{\bar{C}(t)}{\bar{C}(t+1)}$, 利用 Jackknife 的方法 (即每次剔除其中一个组态的方法) 估计其误差 $\Delta m_{\text{eff}}(t)$ 。以 t 为横轴, 以 $m_{\text{eff}}(t)$ 为纵轴, 用散点图的形式画出这些有效质量的数值及其误差。⁵

- (c) 有没有观察到在中间有一段所有的点都趋于一个常数? 为了确定这个常数及其误差, 我们需要一个单参数拟合。利用上问得到的有效质量及其误差, 忽略 ratio 的各个时间片之间的统计关联, 那么一个合适的 χ^2 的表达式为:

$$\chi^2 = \sum_{t=t_{\min}}^{t_{\max}} \left(\frac{m_{\text{eff}}(t) - m}{\Delta m_{\text{eff}}(t)} \right)^2, \quad (10)$$

其中 t_{\min} , t_{\max} 分别为拟合的起始点和结束点。对 χ^2 的有贡献的点一共有 $t_{\max} - t_{\min} + 1$ 个, 而自由度数目为 $d = t_{\max} - t_{\min}$ 。按照每个自由度的 χ^2 最小进行拟合 (但要求最少有连续 4 个点, 让计算机扫描确定起始和终止的时间片) 给出相应的拟合值 m 并给出其误差估计。将这个拟合值 (包括相应的拟合区间 $[t_{\min}, t_{\max}]$) 及其误差与上问的数据点们画在一起吧。你的最小 $\chi^2/d.o.f$ 相应的 p -value 是多少? chi2越小, p值越大

- (d) 上面我们讨论的 ratio 方法只适用于平台搜寻区间比较靠前 (远离 $N_t/2$) 的情形, 这时公式 (5) 中第二项的贡献可以忽略。但是如果你最终寻找平台的区间比较接近 $N_t/2$, 那么上述 ratio 的方法就不可行了。这时应当构建一个新的 ratio:

$$\tilde{\mathcal{R}}(t) = \frac{C(t+1) + C(t-1)}{2C(t)}, t = 1, 2, \dots, N_t/2 - 1. \quad (11)$$

考察公式 (5) 可以发现, 在只有一个能级 $E_0 = m$ 贡献的时候, 这个 ratio 的值应当为 $\cosh m$ 。所以我们可以定义新的有效质量 $\tilde{m}_{\text{eff}}(t)$ 为:

$$\tilde{m}_{\text{eff}}(t) = \cosh^{-1}(\tilde{\mathcal{R}}(t)). \quad (12)$$

⁵特别注意, 按照公式 (9), 有效质量 $m_{\text{eff}}(t)$ 的中心值直接联系着关联函数 (即平均值) 的比值, 而不是比值的平均值。在利用 Jackknife 的计算 $\Delta m_{\text{eff}}(t)$ 时, 你可以每次剔除掉一个组态, 比如说第 i 个组态, 然后按照公式 (9) 计算剔除了第 i 个组态后其他所有组态给出的有效质量 $m_{\text{eff}}^{(i)}(t)$, 然后根据它对于不同 i 的弥散程度来估计误差 $\Delta m_{\text{eff}}(t)$ 。

这个公式可以一直工作到接近 $N_t/2$ 。然后可以重复上面 b) 和 c) 中的步骤进行拟合，这样得到的 m 及其误差各有何变化？

- (e) 虽然不同次测量之间的关联可以忽略，但是同一次测量的不同物理量之间却有着很强的关联。特别是对于相邻的时间片的关联函数来说更是如此。具体来说，利用数据估计出不同时间片之间函数 $C(t)$ 的协方差矩阵：

$$C_{t,t'} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(C^{(i)}(t) - \bar{C}(t) \right) \left(C^{(i)}(t') - \bar{C}(t') \right) \quad (13)$$

其中 $t, t' = 0, 1, \dots, N_t/2$ 。这是一个对称正定实矩阵，其对角元 $C_{t,t}$ 就与 a) 问中估计的 $C(t)$ 的误差相关。一个归一化的衡量其相关性的量是相关系数矩阵 $\rho_{t,t'}$ ：

$$\rho_{t,t'} = C_{t,t'} / \sqrt{C_{t,t} C_{t',t'}} . \quad (14)$$

请利用 $N_B = 1000$ 个 bootstrap sample 来估计 $\rho_{3,4}$ 和 $\rho_{3,5}$ 的中心值及误差。