计算物理 2018 秋季第三次作业

*

2018 年 12 月 23 日

1 Householder 与 Givens 在 QR 分解中的比较

1.1 问题 (a)

下面对计算过程进行分析。Householder **变换**，步骤如下：

- 对于 n 阶实矩阵 $A = \{a_1, a_2, ..., a_n\} := A^{(0)}$，对每一个列向量构造 Householder 变换 $P^{(0)}$，使得 $P^{(0)}a_1 = (||a_1||, 0, 0, ..., 0)^T$。
- 接下来把这个 $P^{(0)}$ 作用到 $A^{(0)}$ 上，得到 $A^{(1)} = P^{(0)}A^{(0)}$，$A^{(1)}$ 的第一列除了第一行其他均为 0;
- 如此迭代下去, 每次 $A^{(i)} = P^{(i-1)}A^{(i-1)}$ 得到的是 $A^{(i)}$，第 i 列从第 i+1 行到第 n 行元素均为 0。
- 最终得到 $A^{(n-1)}$，将会是一个上三角矩阵 R。将上述 n-1 个 Householder 矩阵相乘得到矩阵 Q。

要考虑计算次数的最高阶贡献。因此，以下讨论对低阶项进行简化。

计算每次计算 Householder 矩阵需要先计算一个 $w^{(k)}$ 的欧式模，需要首先计算一个 $x^{(n-k)}$ 的模，需要进行 $n-k$ 次乘法和 $n-k-1$ 次加法以及 1 次开方，总共计算量为 $2(n-k)$。由 x 到 w 的计算是一个 O(1) 的计算量，故这里予以忽略（不会对最高阶系数结果造成影响）。

接下来每次计算都要对每个列向量乘 Householder 矩阵，但实际上只有每个列向量的后 n-k 个元素会发生变化，所以其实只有后 n-k 个列向量需要参与计算。每次计算有一个列向量的点乘，n-k 次乘法和 n-k-1 次加法；逐元素的数乘 n-k 个，减法 n-k 个。总共计算量为 4(n-k)-1 次。

故得到 R 矩阵的计算量为

$$\sum_{k=0}^{n-1}(2(n-k)) + (n-k)(4(n-k)-1) = n(n+1)(\frac{2}{3}(2n+1)+\frac{1}{2}) = O(\frac{4}{3}n^3) \tag{1}$$

得到 Q 矩阵的计算量可以类似的计算。$Q^T = P^{(n-2)}P^{(n-1)}\cdots P^{(0)}$，构造 $P^{(0)}$ 需要 $2n^2$ 次，之后每次变换都需要对所有 n 列进行变换。

故得到 R 矩阵的计算量为

$$2^n + \sum_{k=1}^{n-1} n(4(n-k)-1) = O(2n^3) \tag{2}$$

Householder 总的计算量为 $O(\frac{10}{3}n^3)$。

Givens **旋转**。步骤如下：

- 选择 Givens 转动矩阵 $G_{2,1} = G(1,2,\theta)$，使得 $a_{1,1}sin\theta + a_{2,1}cos\theta = 0$，这样作用后 $G_{2,1}A$ 的第二行第一列元素为 0。同理构造 $G_{3,1}, G_{4,1}, \cdots, G_{n,1}$，依次作用可以得到 $A^{(1)}$ 的第 1 列第 1+1 到第 n 行都为 0.
- 接下来构造 $G_{3,2}, G_{4,2}, ..., G_{n,2}$ 依次作用到 $A^{(1)}$ 得到 $A^{(2)}$，使得其第 2 列第 2+1 到第 n 行都为 0。注意到，对于 $G_{i,j}$，第 1 列的第 i，j 行都是 0，作用后依然都是 0（按照 $G_{i,j}$ 的定义可以容易得到）。所以第 1 列第 1+1 到第 n 行都是 0.
- 以此类推，可以得到 $R = Q^TA = (Gn, n-1G_{n,n-2}, ..., G_{2,1})A$。

每次 Givens 矩阵作用上的时候，都只需要考虑第 j 到 n 列，因为第 1 到 j-1 列元素都为 0，不会发生改变。故每次作用计算次数为 $(3 \times 2(n-j+1)$，计算第 j 列的时候要进行 (n-j) 次计算。故计算 R 需要的计算次数为

$$\sum_{j=1}^{n}(n-j) \times (3 \times 2(n-j+1)) = O(2n^3) \tag{3}$$

计算 Q 需要的次数与上相同。每次作用第 j 列都只需要对第 j 到第 n 列进行计算。故也是 $O(2n^3)$。

故 Givens 总共需要运算次数 $O(4n^3)$。

1.2 问题 (b)

代码见附件。

1.3 问题 (c)

代码见附件。

1.4 问题 (d)

注意到这里两种 QR 方法作比较，显然是 Householder 需要的时间更短。注意到这里两种方法需要的时间之比与上述理论分析不一样，主要原因有:1. 计算机执行乘除法和加法

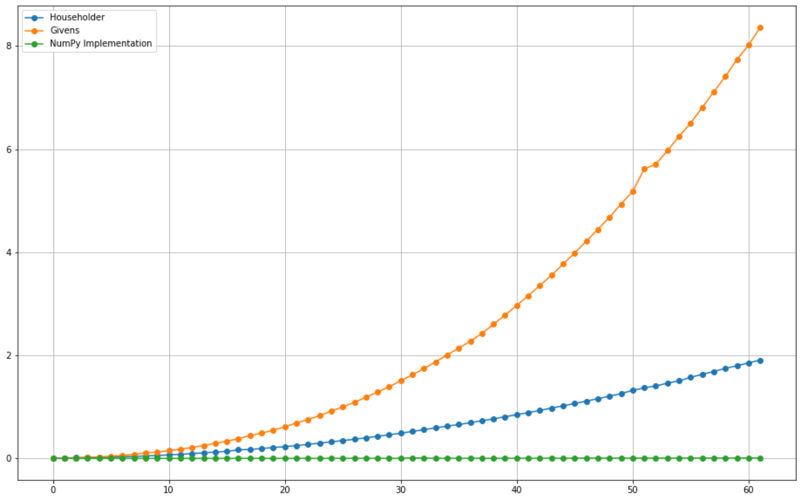

图 1: 两种 QR 算法需要的时间的对比

的时间是不一样的，上述理论分析将二者视作时间消耗相同的运算；2. 上述理论分析没有体现最高阶项以外的项；3. 具体实现的过程中不同的代码风格经过编译器（或解释器）优化的程度不一样。而显然，一些现有的科学计算库（例如 Python 的 NumPy）中有效率更高的实现，这里效率的提升可能涉及根据计算机缓存、以及并行算法等优化，与本题分析无关。

2 幂次法求矩阵最大模的本征值和本征矢

2.1 问题 (a)

去 $x(t) = xe^{-i\omega t}$ 带入经典运动方程（原题中式 (1)）得到

$$\omega^2 x_i + (x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i) = 0, i = 1, 2, ..., N \tag{4}$$

如果取 $(-A)_{ij} = \delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j} - 2\delta_{ij}$ 可以得到

$$\omega^2 = -Ax \tag{5}$$

也就是本征方程的形式。本征值 $\lambda = \omega^2$

2.2 问题 (b)

下面给出证明，假设 A 的本征值 $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \cdots \geq \lambda_N \geq 0$，分别对应归一化本征矢量 $v_1, v_2, ..., v_N$。那么取任意一个单位矢量 $q^{(0)}$ 用 v_i 展开得到

$$q^{(0)} = \sum_{i=1}^{N} a_i^{(0)} v_i \tag{6}$$

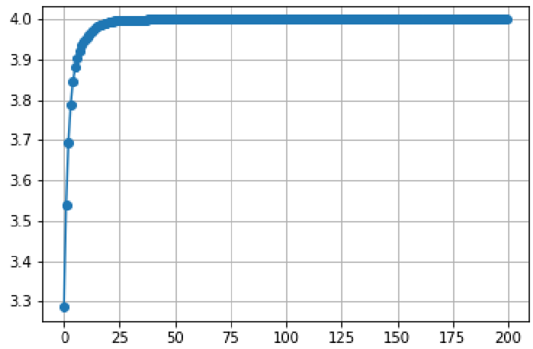

图 2: 幂次法求得的最大本征值收敛情况

那么对迭代的式子进行展开得到

$$q^{(k)}=\sum_{i=1}^{N}a_i^{(k)}v_i=\frac{1}{C'}\sum_{i=1}^{N}a_i^{(k-1)}\lambda_i v_i=\frac{1}{C}\sum_{i=1}^{N}a_i^{(0)}\lambda_i^k v_i \tag{7}$$

其中 C 和 C' 都是归一化常数，也就是说 $C=\sqrt{\sum_{i=1}^{N}(a_i^{(0)}\lambda_i^k)^2}$。下面考虑极限，当 $a_i^{(0)}\neq 0$，而且 $\lambda_1>\lambda_i, i=2,3,\cdots,N$ 严格成立时，有

$$\lim_{k\to\infty}q^{(k)}=\lim_{k\to\infty}\frac{\lambda_1^k}{C}\lim_{k\to\infty}\sum_{i=1}^{N}a_i^{(k)}v_i\left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k=\lim_{k\to\infty}\frac{\lambda_1^k}{C}a_1^{(0)}v_1=v_1 \tag{8}$$

最后一个等式由 C 的表达式可以容易得到。

而 $v=\lim_{k\to\infty}v^{(k)}=\lim_{k\to\infty}\left[q^{(k)}\right]^{\dagger}Aq^{(k)}=[v_1]^{\dagger}Av_1=\lambda_1$。证毕。

使用以上方法，设置每次迭代的 q 的分量与上一次的差值的绝对值不超过 1e-7，得到的结果为本征矢量为 [-0.31622777 0.31622777 -0.31622777 0.31622777 -0.31622777 0.31622777 -0.31622777 0.31622777 -0.31622777 0.31622777]，本征值为 4.000000000000001。具体代码见附件。

3 关联函数的拟合与数据分析

本题的主要解题过程在代码中体现，请参见附件。

3.1 问题 (a)

依照题意进行计算，可以得到相对误差的值随着时间的增加不断增大。最大可以达到大约 3%。

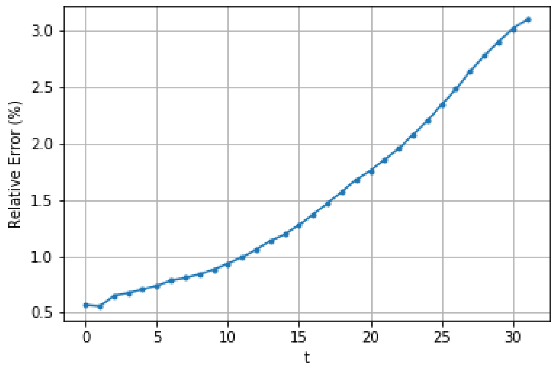

图 3: 相对误差随着时间变化的曲线

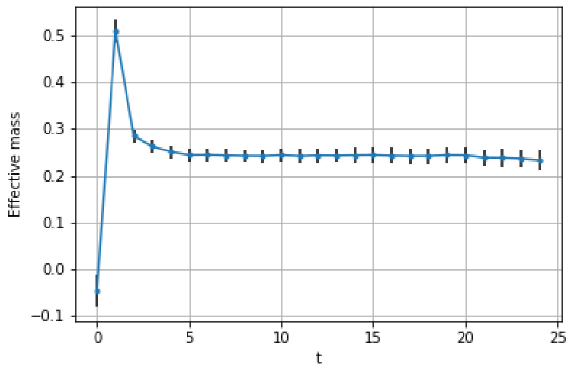

图 4: 有效质量函数 $m_{eff}(t)$

3.2 问题 (b)

在这里得到的图如下。可见每次误差相差不太大。为了显示清楚，图中 Error Bar 的标度与纵轴不一样，实际上的长度应该是图中所画长度的 1/10。

可以看到，在初期由于高激发态的存在，计算得到的结果是不可靠的。这里选择 $t_0 = 25$，t>25 的部分在图中没有体现。

3.3 问题 (c)

根据问题 (b) 得到的图，选择 t= 5,6,..,25 作为起始时间进行扫描，考察每次得到的 $\chi^2/d.o.f$，找到最小时对应的 t_{min}, t_{max}，在这里找到的是 $(t_{min}, t_{max}) = (12, 15)$。在这里估计 m 的误差使用的是 1σ 对应的 m 值。**拟合得到的** m **为** 0.243167**，**p-value **为** 0.990235。m 对应 1σ 的置信区间为 (0.241538,0.244753),$\Delta m = 0.003215$。

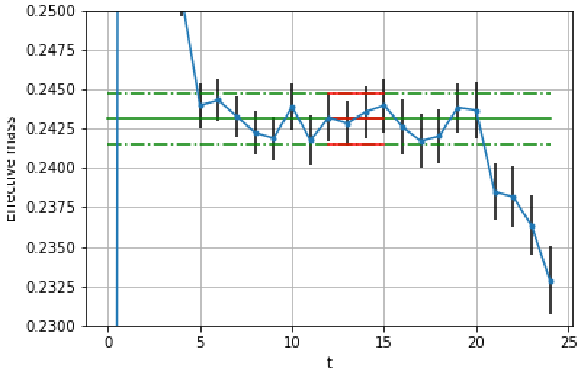

图 5: 有效质量误差

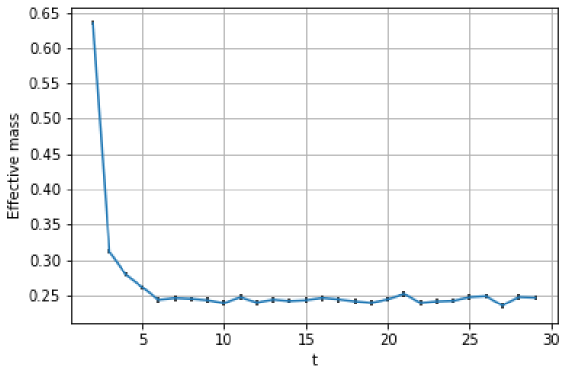

图 6: 有效质量函数 $m_{eff}(t)$

3.4 问题 (d)

按照如上步骤重新进行一次。选择 t= 20,21,...,30 作为起始时间进行扫描，考察每次得到的 $\chi^2/d.o.f$，找到最小时对应的 t_{min}, t_{max}，在这里找到的是 $(t_{min}, t_{max}) = (21, 24)$。在这里估计 m 的误差使用的是 1$\sigma$ 对应的 m 值。**拟合得到的** m **为** 0.240804**,** p-value **为** 0.960539。m 对应 1σ 的置信区间为 (0.236651,0.245111),$\Delta m = 0.008460$。

3.5 问题 (e)

首先进行了 1000 次 bootstrap 采样。然后计算 $\rho_{3,4}$ 和 $\rho_{3,5}$。通过计算发现 $\rho_{3,5}$ 比 $\rho_{3,4}$ 要小一些，说明时间相差越长，关联程度减弱。

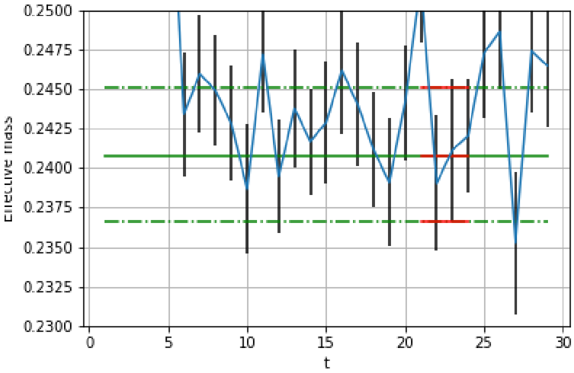

图 7: 有效质量误差

$\rho_{3,5}$	0.957785
$\delta\rho_{3,5}$	0.003362
$\rho_{3,4}$	0.979404
$\delta\rho_{3,4}$	0.003362

表 1: $\rho_{t,t'}$