

计算物理第三次作业

刘茁

1500011438

1. Householder 与Givens 在QR 分解中的比较

本题代码见question1文件夹

(a)

使用Householder

- Householder矩阵为

$$P_{(k)} = \begin{bmatrix} 1_k & 0 \\ 0 & R_{n-k} \end{bmatrix}, R_{n-k} = I_{n-k} - 2 \frac{w^{(k)} (w^{(k)})^T}{\|w^{(k)}\|_2^2}$$

其中, $w^{(k)}$ 由下式决定

$$w^{(k)} = x^{(n-k)} \pm \left\| x^{(n-k)} \right\|_2 e_1^{(n-k)}$$

- 计算向量 $w^{(k)}$, 要求 $x^{(n-k)}$ 的欧式模, 计算量为 $(n-k)$ 次。

计算 $P_{(k)}$ 要进行一次矢量点乘运算和一次除法, 因此 $P_{(k)}$ 变换的计算量为 $2 \times (n-k) + 1$ 次

每次迭代时, 前 $k-1$ 列无需计算, 因此每次利用Householder变换进行迭代需要进行 $(n-k+1) \times (2 \times (n-k) + 1)$ 次运算; 保留到领头阶, 总共的运算次数为

$$\sum_{k=0}^{n-2} (n-k+1) \times (2 \times (n-k) + 1) \approx \frac{2}{3} n^3$$

- Q 的计算为

$$Q^T = P_{(n-2)} P_{(n-1)} \cdots P_{(0)}$$

构建P总共需要约 n^2 次计算, 之后每一次计算都要对全部 n 列进行, 总的计算次数为

$$2n^2 + \sum_{k=1}^{n-2} n \times (2 \times (n-k) + 1) \approx n^3$$

- 因此总的计算次数为(保留到最高阶)

$$\frac{5}{3} n^3$$

使用Givens

- 记转动矩阵 $G_{2,1} = G(1, 2, \theta)$, givens变换得到上三角矩阵的过程应该可以记为

$$(G_{n,n-1} G_{n,n-2} G_{n-1,n-2} \cdots G_{2,1}) A = Q^T A = R$$

- 在对第 j 列的对角元以下的元素进行消元时, 仅需计算从第 j 列到第 n 列的旋转, 每次旋转的计算次数为 $2 + 2 \times 2 \times (n-j+1)$ (对靠右的两条元素进行运算)

那么, 对于矩阵R的计算, 总共的运算次数为:

$$\sum_{j=1}^{n-1} (n-j) \times (2 + 2 \times 2 \times (n-j+1)) \approx \frac{4}{3} n^3$$

- Q的计算为

$$Q^T = G_{n,n-1} G_{n,n-2} G_{n-1,n-2} \cdots G_{2,1}$$

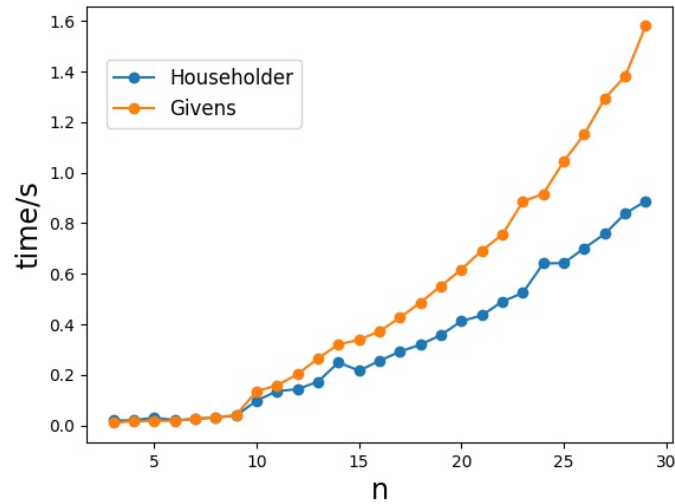
其中 $G_{i,j}$ 仅需对第 $j+1$ 到第 n 列进行计算, 每次计算次数也是 $2 + 2 \times 2 \times (n-j+1)$, 因此总计算次数和矩阵R的计算次数相同, 也是 $\frac{4}{3} n^3$ 次

- 因此总的计算次数为

$$\frac{8}{3} n^3$$

(d)

- 编写程序 run_time.py 来比较运行时间。
- 这里我不仅仅比较了 $n = 6$ 的情况 (n 表示方阵维度)，我取了 $n=3 \sim 50$ 的情况，结果如下图所示，具体结果见附件。



- 可以看出，在维度较大时，Householder方法会显著地快于Givens变换，尽管运行的绝对时间没有意义，但是两种方法运行时间的比例与我们之前的讨论是一致的。在维度较小时，由于运行总时间很小，并不能很有效地比较我们之前讨论保留到 n 的最高阶的情况。

2. 幂次法求矩阵最大模的本征值和本征矢

(a)

- 原子满足的经典运动方程为

$$\ddot{x}_i - [x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i] = 0$$

- 假设解满足

$$x_i(t) = x_i e^{-i\omega t}$$

则有

$$-\omega^2 x_i - [x_{i-1} + x_{i+1} - 2x_i] = 0$$

注意到

$$(-A)_{ij} = \delta_{i-1,j} + \delta_{i+1,j} - 2\delta_{i,j}$$

于是有

$$Ax = \lambda x$$

其中 $\lambda = \omega^2$

(b)

- A 的本征值为 $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots \geq \lambda_N$ ，对应的本征矢为 $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots, \mathbf{v}_N$ 。
- 将 $\mathbf{q}^{(0)}$ 用本征矢展开

$$\mathbf{q}^{(0)} = \sum_{i=1}^N a_i \mathbf{v}_i$$

第 k 阶的公式很容易总结得到

$$\mathbf{q}^{(k)} = \frac{\mathbf{z}^{(k)}}{\|\mathbf{z}^{(k)}\|} = \frac{A \cdot \mathbf{q}^{(k-1)}}{\|\mathbf{z}^{(k)}\|} = C \sum_{i=1}^N a_i \lambda_i^k \mathbf{v}_i$$

其中C是归一化常数。

- $k \rightarrow \infty$ 时,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{q}^{(k)} = C \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_1^k \sum_{i=1}^N a_i \mathbf{v}_i \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k = C \lim_{k \rightarrow \infty} a_1 \lambda_1^k \mathbf{v}_1$$

这是由于

$$\left| \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right| < 1, \forall i \neq 1$$

最后只剩下 \mathbf{v}_1 这个方向, 根据归一化的特性, 于是有

$$\begin{aligned} \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{q}^{(k)} &= \mathbf{v}_1 \\ \lim_{k \rightarrow \infty} \nu^{(k)} &= \lim_{k \rightarrow \infty} [\mathbf{q}^{(k)}]^\dagger A \mathbf{q}^{(k)} = \mathbf{v}_1^\dagger A \mathbf{v}_1 = \lambda_1 \end{aligned}$$

- 编写程序 power_method.py 求解结果
 - 最大本征值 $\lambda_1 = 4.0$
 - 对应本征矢
 $[-0.31622777, 0.31622777, -0.31622777, 0.31622777, -0.31622777, 0.31622777, -0.31622777, 0.31622777, -0.31622777, 0.31622777]$

3. 关联函数的拟合和数据分析

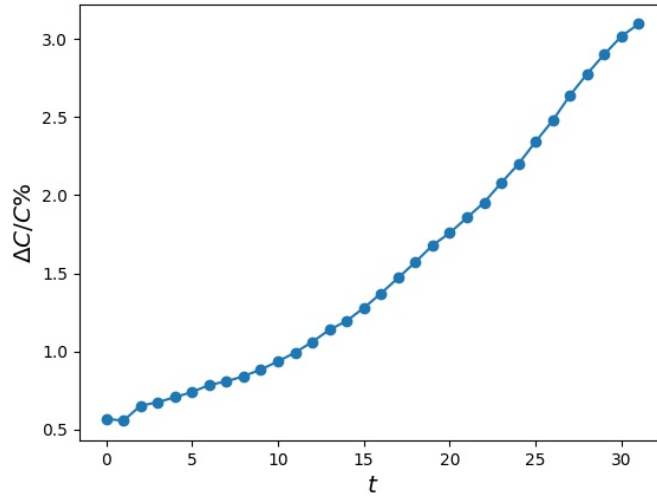
本题代码见question3文件夹

(a)

- 我这里利用标准差来估计误差

$$\Delta C(t) = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (C^{(i)}(t) - \overline{C}(t))^2}$$

误差结果如下图所示, 具体的数据见附件



(b)(c)

- 利用JackKnife 方法来计算 m_{eff} 及其误差, 将其用散点图画出, 具体的数据见附件。
- 需要注意的是, 我在画图时舍弃了**第一个点**($t = 0$), 这是因为:
 - 第一, 我们的关注点在中间的平台区和靠近 $N_t/2$ 的区域, 时间片靠近0的地方并不是我们所关注的。
 - 第二, 也是最重要的, 第一个点所计算出来的C值比第二个时间片还小, 这意味着在(b)中 m_{eff} 将小于0, 在(d)中将无法计算出 m_{eff} 。这个点的数值与其他点非常不符合, 不仅非常影响画图的美观性, 有效性更待考证, 因此在后面, 我将舍弃所有与 $t = 0$ 有关的数据点 (第一个点)。
- 接着我利用下式来寻找 $\chi^2/d.o.f$ 最小的 t_{min}, t_{max}

$$\arg \min_{t_{\min}, t_{\max}} \frac{1}{t_{\max} - t_{\min}} \sum_{t=t_{\min}}^{t_{\max}} \left(\frac{m_{eff}(t) - m}{\Delta m_{eff}(t)} \right)^2$$

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

令

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial m} = -2 \sum_{t_{\min}}^{t_{\max}} \left(\frac{m_{eff}(t) - m}{\Delta m_{eff}^2(t)} \right) = 0$$

则拟合的结果为

$$m_{eff} = \frac{\sum_{t_{\min}}^{t_{\max}} \frac{m_{eff}(t)}{\Delta m_{eff}^2(t)}}{\sum_{t_{\min}}^{t_{\max}} \frac{1}{\Delta m_{eff}^2(t)}}$$

误差估计为

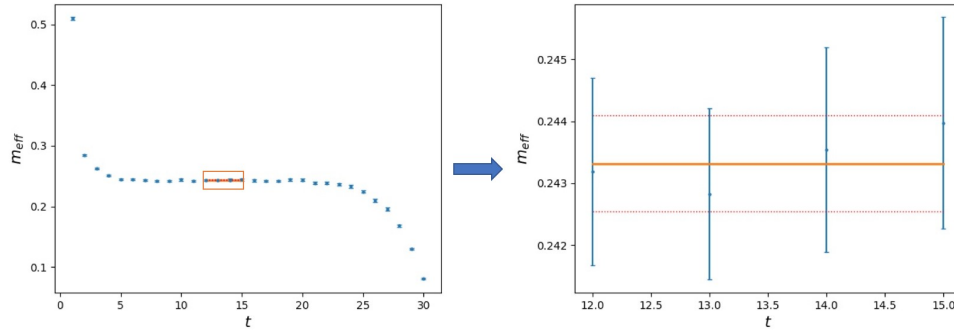
$$\Delta m_{eff} = \sqrt{\frac{1}{\sum_{t_{\min}}^{t_{\max}} \frac{1}{\Delta m_{eff}^2(t)}}}$$

- 拟合的结果为

$$t_{\min} = 12, t_{\max} = 15, dimension = 3$$

$$m_{eff} = 0.2433, \Delta m_{eff} = 0.0008, p - value = 0.3975$$

- 将拟合出的 m_{eff} 值和对应的区间用黄色的线条与之前的图画在一起如下所示。右边的图是左边的图中方框的放大，需要说明的有如下几点
 - 蓝色的数据是用JackKnife计算出来的原始数据，每条蓝色线条中，中间的圆点是 $m_{eff}(t)$ ，线条的两端是以 $\Delta m_{eff}(t)$ 估计的误差范围
 - 橙色的横线是用 χ^2 拟合得到的 m_{eff} 值，它位于对应的 t_{\min}, t_{\max} 区域。
 - 上下的橙色虚线是拟合结果对应误差估计的范围。

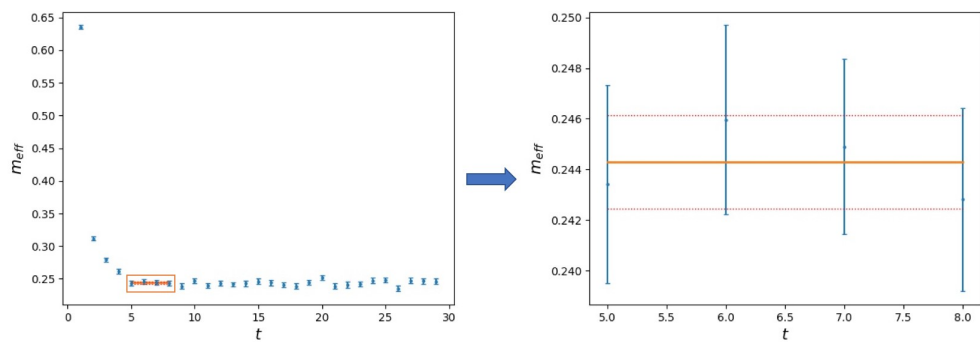


(d)

重复前两问的做法，结果如下，图片解释与前两问相同。

$$t_{\min} = 5, t_{\max} = 8, dimension = 3$$

$$m_{eff} = 0.244, \Delta m_{eff} = 0.002, p - value = 0.01150$$



用这种ratio计算的结果我们可以发现,对于 m_{eff} ,这种方法所计算的值十分稳定,在靠近 $N_t/2$ 的区域 m_{eff} 的值仍然保持基本不变。对于误差,这种方法在计算中间平台区域时误差有所增大,但相对分布十分平均。

(e)

程序运行结果如下

$$\rho_{3,4} = 0.9792$$

$$\Delta\rho_{3,4} = 0.0034$$

$$\rho_{3,5} = 0.9575$$

$$\Delta\rho_{3,5} = 0.0062$$

附件

1.(c)

n	$t_{HouseHolder}/s$	$t_{JackKnife}/s$
3	0.01687	0.01027
4	0.02365	0.01379
5	0.01905	0.01296
6	0.02440	0.02123
7	0.02880	0.02902
8	0.03568	0.03472
9	0.04060	0.03703
10	0.04230	0.05094
11	0.04853	0.06108
12	0.05944	0.08587
13	0.08095	0.09884
14	0.08004	0.10945
15	0.09591	0.13050
16	0.10166	0.16720
17	0.11756	0.16282
18	0.13041	0.18638
19	0.13909	0.20418
20	0.15304	0.22744
21	0.17271	0.25632

n	$t_{HouseHolder}/s$	$t_{JackKnife}/s$
22	0.19017	0.29131
23	0.29401	0.41935
24	0.26909	0.39123
25	0.28030	0.44704
26	0.32226	0.63168
27	0.37022	0.53192
28	0.35106	0.56507
29	0.37268	0.90321

3.(a)

t	$C(t)$	$\Delta C(t)$	$\Delta C(t)/\bar{C}(t)$
1	5.164e+07	293220.28	0.57%
2	5.416e+07	300383.56	0.55%
3	3.253e+07	211750.26	0.65%
4	2.448e+07	164866.08	0.67%
5	1.883e+07	132834.82	0.71%
6	1.465e+07	108226.51	0.74%
7	1.148e+07	89982.56	0.78%
8	8.989e+06	72558.68	0.81%
9	7.048e+06	59215.24	0.84%
10	5.532e+06	48866.58	0.88%
11	4.343e+06	40608.67	0.93%
12	3.403e+06	33751.12	0.99%
13	2.673e+06	28341.57	1.06%
14	2.096e+06	23843.09	1.14%
15	1.644e+06	19639.89	1.19%
16	1.288e+06	16471.12	1.28%
17	1.010e+06	13842.15	1.37%
18	7.921e+05	11651.16	1.47%
19	6.220e+05	9777.13	1.57%
20	4.883e+05	8199.42	1.68%
21	3.826e+05	6728.90	1.76%
22	2.999e+05	5568.07	1.86%
23	2.363e+05	4616.11	1.95%
24	1.862e+05	3872.31	2.08%
25	1.470e+05	3234.64	2.20%
26	1.165e+05	2729.74	2.34%
27	9.307e+04	2308.67	2.48%
28	7.547e+04	1992.72	2.64%
29	6.207e+04	1724.63	2.78%
30	5.248e+04	1523.80	2.90%
31	4.609e+04	1391.94	3.02%

t	$C(t)$	$\Delta C(t)$	$\Delta C(t)/\overline{C}(t)$
32	4.252e+04	1317.28	3.10%

3.(b)

t	$m_{eff}(t)$	$\Delta m_{eff}(t)$
0	-0.04774	0.00338
1	0.50967	0.00236
2	0.28438	0.00139
3	0.26267	0.00143
4	0.25094	0.00136
5	0.24396	0.00141
6	0.24430	0.00132
7	0.24326	0.00131
8	0.24224	0.00134
9	0.24188	0.00140
10	0.24386	0.00148
11	0.24177	0.00155
12	0.24319	0.00152
13	0.24283	0.00138
14	0.24355	0.00165
15	0.24397	0.00171
16	0.24259	0.00173
17	0.24169	0.00171
18	0.24202	0.00171
19	0.24384	0.00156
20	0.24365	0.00179
21	0.23850	0.00176
22	0.23818	0.00196
23	0.23636	0.00188
24	0.23289	0.00213
25	0.22415	0.00203
26	0.20963	0.00225
27	0.19556	0.00201
28	0.16779	0.00210
29	0.12970	0.00184
30	0.08077	0.00177

3.(d)

t	$m_{eff}(t)$	$\Delta m_{eff}(t)$
1	nan	nan
2	0.63519	0.00300
3	0.31168	0.00341
4	0.27921	0.00348

t	$m_{eff}(t)$	$\Delta m_{eff}(t)$
5	0.26145	0.00328
6	0.24341	0.00391
7	0.24596	0.00374
8	0.24489	0.00346
9	0.24281	0.00363
10	0.23867	0.00407
11	0.24718	0.00366
12	0.23947	0.00360
13	0.24377	0.00372
14	0.24168	0.00336
15	0.24287	0.00386
16	0.24617	0.00405
17	0.24402	0.00390
18	0.24117	0.00361
19	0.23908	0.00404
20	0.24414	0.00364
21	0.25173	0.00376
22	0.23902	0.00427
23	0.24114	0.00452
24	0.24204	0.00360
25	0.24724	0.00406
26	0.24864	0.00367
27	0.23525	0.00454
28	0.24741	0.00385
29	0.24646	0.00388
30	0.24614	0.00386