

ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИ-ВЗВЕШЕННЫХ МОМЕНТОВ ДЛЯ ПРИБЛИЖЕНИЯ СЛУЧАЙНЫХ ФАЗ

В.А.Кузьмин

На основе спектрального разложения вещественной симметричной матрицы предложен метод вычисления энергетически-взвешенных моментов распределения силы переходов по энергиям возбуждений, определенного в приближении случайных фаз (ПСФ). Показано, что определенные линейные комбинации моментов можно выразить через произведения матриц, входящих в уравнение ПСФ. Полученные результаты используются для выделения двухквaziчастичных состояний, наиболее важных для данного типа переходов и для данных остаточных взаимодействий.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Evaluation of the Energy-Weighted Moments in the Random Phase Approximation

V.A.Kuzmin

Based on spectral decomposition of the real symmetrical matrix we present method for evaluating the energy-weighted moments of the transition strength distribution over the excitation energies defined in the random phase approximation (RPA). It is shown that certain linear combinations of these moments can be expressed through the product of the RPA matrices. The obtained results are used to select two-quasi-particle states that are most important for given transitions and residual interactions.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Интегральные характеристики распределений силы переходов по энергиям возбуждений выражаются через их энергетически-взвешенные моменты ^{1/2}:

$$S_k = \sum_i \omega_i^k | \langle i | B | 0 \rangle |^2, \quad (1)$$

где $\omega_i = E_i - E_0$ — разность энергии возбужденного $|i\rangle$ и основного $|0\rangle$ состояний рассматриваемой системы; B — оператор перехода. Кроме того, по вкладу отдельных базисных состояний пространства, на котором определены волновые функции $|0\rangle$ и $|i\rangle$, в энергетически-взвешенные моменты можно выделить наиболее существенные для данной задачи базисные состояния.

Это значительно уменьшает размерности матриц, появляющихся при построении собственных функций гамильтониана системы.

В настоящем сообщении предлагается метод вычисления энергетически-взвешенных моментов для приближения случайных фаз (ПСФ), основанный на спектральном разложении симметричных вещественных матриц. В ПСФ амплитуды переходов из основного на возбужденные однофононные состояния под действием одночастичного оператора перехода B^- (и эрмитово-сопряженного к нему оператора B^+) можно записать в виде

$$b_i^{(\pm)} = \frac{1}{2} (d_q^+ g_q^i + d_q^- w_q^i), \quad (2)$$

где $d_q^{(\pm)}$ — матричный элемент перехода из состояния квазичастичного вакуума в двухквазичастичное состояние, симметризованный (+) и антисимметризованный (-) по индексам одноквазичастичных состояний; g_q^i и w_q^i — сумма и разность фононных амплитуд ψ_q^i и ϕ_q^i ; q — индекс двухквазичастичного состояния. В формуле (2) опущен знак суммирования по q : здесь и ниже подразумевается суммирование по каждой паре совпадающих индексов. Например, для гамов-теллеровских переходов ^{12/}

$$b_i^{(\pm)} = \langle i | \sum_{j=1}^A \sum_{\mu=1}^3 \sigma_{\mu}^{(\pm)}(j) t_j^{\pm} | 0 \rangle = \frac{1}{2} \langle j_n | | \sigma t^{(+)} | | j_p \rangle [u_{j_n j_p}^{(+)} g_{j_n j_p}^i \pm u_{j_n j_p}^{(-)} w_{j_n j_p}^i], \quad u_{j_n j_p}^{(\pm)} = u_{j_n} v_{j_p} \pm u_{j_p} v_{j_n},$$

здесь индексы j_n (j_p) обозначают одночастичные уровни нейтронной (протонной) системы, а u_j и v_j — коэффициенты специализированного преобразования Боголюбова.

Энергии возбуждения однофононных состояний ω_i и фононные амплитуды g_q^i и w_q^i определяются из однородной системы линейных уравнений

$$\begin{pmatrix} R^{(+)} & 0 \\ 0 & R^{(-)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{g}^i \\ \vec{w}^i \end{pmatrix} = \omega_i \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{g}^i \\ \vec{w}^i \end{pmatrix}. \quad (3)$$

Заглавные латинские буквы обозначают матрицы, размерность которых равна числу учитываемых двухквазичастичных состояний. I и 0 — единичная и нулевая матрицы. В работе ^{13/} показано, что к виду (3) можно привести любую систему уравнений метода ПСФ с вещественными матричными элементами. Согласно теории пучков квадратичных форм ^{14/}, если матрица, стоящая в левой части (3) положительно определена, то ω_i — вещественные числа, и существуют ненулевые g_q^i и w_q^i , удовлетворяющие (3). В даль-

нейшем мы будем предполагать положительную определенность матриц $R^{(+)}$ и $R^{(-)}$.

Следуя /3/, умножим первое из уравнений (3) на $R^{(-)}$ и, учитывая второе из уравнений (3), получим

$$R^{(-)} R^{(+)} \vec{g}^i - \omega_i^2 \vec{g}^i = 0. \quad (4)$$

Так как $R^{(+)}$ положительно-определенная матрица, то существует единственная симметричная положительно-определенная матрица F , такая, что /5/

$$F F = R^{(+)}.$$

Приведем линейное, невырожденное преобразование векторов \vec{g}^i :

$$\vec{y} = F \vec{g}^i.$$

Тогда (4) можно переписать в виде

$$F R^{(-)} F \vec{y}^i - \omega_i^2 \vec{y}^i = 0,$$

где $F R^{(-)} F$ — вещественная симметричная матрица, собственные векторы которой образуют полную ортонормированную систему /4/. Из векторов \vec{y}^i можно построить матрицы спектральных проекторов /5/

$$E_{q,q'}^i = y_q^i y_{q'}^i,$$

со свойствами

$$E^i E^j = \delta_{i,j} E^j,$$

$$\sum_i E^i = I, \quad (5)$$

$$\sum_i \omega_i^{2k} E^i = (F R^{(-)} F)^k.$$

Фононные амплитуды \vec{g}^i и \vec{w}^i , нормированные условием

$$\frac{1}{2} (g_q^i w_q^{i'} + g_q^{i'} w_q^i) = \delta_{i,i'},$$

связаны с векторами \vec{y}^i соотношениями

$$\vec{g}^i = \sqrt{\omega_i} F^{-1} \vec{y}^i, \quad \vec{w}^i = \frac{1}{\sqrt{\omega_i}} F \vec{y}^i, \quad (6)$$

где F^{-1} — матрица, обратная к F .

Энергетически-взвешенные моменты можно выразить через степени матрицы $FR^{(-)}F$:

$$\begin{aligned}
 S_k^{(\pm)} &= \omega_i^k b_i^{(\pm)2} = \\
 &= \frac{1}{4} \{ \vec{d}^{(+)\text{T}} F^{-1} \omega_i^{k+1} E^i F^{-1} \vec{d}^{(+)} \pm 2 \vec{d}^{(+)\text{T}} F^{-1} \omega_i^k E^i F \vec{d}^{(-)} + \\
 &+ \vec{d}^{(-)\text{T}} F \omega_i^{k-1} E^i F \vec{d}^{(-)} \} = \\
 &= \frac{1}{4} \{ \vec{d}^{(+)\text{T}} F^{-1} (FR^{(-)} F)^{\frac{k+1}{2}} F^{-1} \vec{d}^{(+)} \pm 2 \vec{d}^{(+)\text{T}} F^{-1} (FR^{(-)} F)^{\frac{k}{2}} F \vec{d}^{(-)} + \\
 &+ \vec{d}^{(-)\text{T}} F (FR^{(-)} F)^{\frac{k-1}{2}} F \vec{d}^{(-)} \}.
 \end{aligned}$$

Здесь $\vec{d}^{(\pm)\text{T}}$ обозначают транспонированные векторы двухквази-частичных амплитуд $\vec{d}^{(\pm)}$. Так как вычисление полуцелых степеней матриц требует не меньше арифметических действий, чем их диагонализация, то удобнее вычислять линейные комбинации энергетически-взвешенных моментов типа

$$S_k = S_k^- - (-1)^k S_k^+, \quad (7)$$

в которые входят только целые степени матрицы $FR^{(-)}F$. Матрицы F, F^{-1} появляются в (7) только как произведения $F \cdot F$ и $F \cdot F^{-1}$, равные $R^{(+)}$ и I соответственно. Поэтому для вычисления (7) не надо предварительно определять F . Например,

$$\begin{aligned}
 S_0 &= S_0^- - S_0^+ = - \vec{d}^{(+)\text{T}} \vec{d}^{(-)}, \\
 S_1 &= S_1^- + S_1^+ = \frac{1}{2} (\vec{d}^{(+)\text{T}} R^{(-)} \vec{d}^{(+)} + \vec{d}^{(-)\text{T}} R^{(+)} \vec{d}^{(-)}).
 \end{aligned}$$

Для вычисления моментов S_k достаточно операций умножения вектора на матрицу и скалярного произведения векторов, а в случае сепарабельных остаточных взаимодействий — только скалярного произведения векторов. По вкладу двухквазичастичных состояний в нижайшие моменты S_k можно выделить наиболее существенные для данного типа переходов и заданных остаточных сил квазичастичные состояния и тем самым значительно уменьшить размерности матриц, входящих в уравнения (3) и (4), что приведет к заметной экономии вычислительных усилий при решении (4). В таблице приводятся относительные изменения в энергетически-взвешенных моментах S_k ($k = 0, 1, 2, 3, 4$) распределения силы гамов-теллеровских переходов на ${}^{90}\text{Zr}^{1/2}$, вызван-

Влияния органичения двухквазичастичного пространства
на энергетически-взвешенные моменты распределения
гамов-теллеровских переходов на ^{90}Zr

Уровень обрезания	Число учитываемых сост.	Относительные изменения в моментах					Время диа- гонализ. (с)
		$S_0^- - S_0^+$	$S_1^- + S_1^+$	$S_2^- - S_2^+$	$S_3^- + S_3^+$	$S_4^- - S_4^+$	
0^*	84	28,72	594,3	9863,0	$242,4 \cdot 10^3$	$5,12 \cdot 10^5$	
$2 \cdot 10^4$	64	$3 \cdot 10^{-6}$	$-3 \cdot 10^{-6}$	$-1 \cdot 10^{-4}$	$-2 \cdot 10^{-5}$	$-1 \cdot 10^{-4}$	79
$1 \cdot 10^{-3}$	56	$-3 \cdot 10^{-3}$	$8 \cdot 10^{-4}$	$-3 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-4}$	$-2 \cdot 10^{-3}$	53
$2,5 \cdot 10^{-4}$	44	$-9 \cdot 10^{-3}$	$-2,5 \cdot 10^{-3}$	$-7 \cdot 10^{-3}$	$5 \cdot 10^{-3}$	$-2 \cdot 10^{-3}$	25
$5 \cdot 10^{-3}$	27	$-5 \cdot 10^{-3}$	$1,3 \cdot 10^{-2}$	$-3,5 \cdot 10^{-3}$	$3 \cdot 10^{-2}$	$1,5 \cdot 10^{-2}$	6
$1 \cdot 10^{-2}$	21	$-8 \cdot 10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-2}$	$-7 \cdot 10^{-3}$	$6 \cdot 10^{-2}$	$5 \cdot 10^{-2}$	3
$5 \cdot 10^{-2}$	8	$3 \cdot 10^{-2}$	0,15	0,06	0,21	0,17	0,2

* В первой строке указаны величины моментов S_k .

ные уменьшением числа учитываемых двухквазичастичных состояний. Каждый раз отбрасывались те состояния, чей удельный вклад в S_k был меньше величины, помещенной в первую графу таблицы. В последней графе показано время, затраченное на численную диагонализацию матрицы $R^{(-)} R^{(+)}$ на ЭВМ CDC-6500 с помощью программы диагонализации произвольных матриц методом вращений¹⁶⁷. В процессе диагонализации сумма квадратов недиагональных матричных элементов уменьшается обычно в 10^{12} - 10^{14} раз.

Автор выражает признательность профессору В.Г.Соловьеву за поддержку работы и Н.Ю.Шириковой, предоставившей программу диагонализации произвольных вещественных матриц.

ЛИТЕРАТУРА

1. Bohigas O., Lane A.M., Martorell J. — Phys. Rep., 1979, 51, p.268.
2. Kuzmin V.A., Soloviev V.G. — J. Phys. G, Nucl. Phys., 1984, 10, p.1507.
3. Ullah N., Rowe D.J. — Nucl. Phys. A, 1971, 163, p.257.
4. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука, 1967.
5. Парлетт Р. Симметричная проблема собственных значений. М.: Мир, 1983.
6. Eberlein P.J. — J. Soc. Indust. Appl. Math., 1962, 10, p.74.

Рукопись поступила 20 марта 1987 года.