сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

3226/2-81

29/6-81

P4-81-228

Л.А.Малов

О ПРИМЕНЕНИИ МЕТОДА СИЛОВЫХ ФУНКЦИЙ К РЕШЕНИЮ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

1981

1. ВВЕДЕНИЕ

Решение многих физических проблем сводится к задаче нахождения собственных значений и собственных векторов, т.е. к решению системы однородных линейных уравнений:

$$(\hat{A} - \lambda \hat{I})\vec{X} = 0, \qquad /1/$$

где единичная матрица $\hat{I} = \|\delta_{ij}\|$ и $\hat{A} = \|a_{ij}\|$ - матрицы размерности $n \times n$. Например, в задачах ядерной физики собственные значения λ_i могут описывать энергетический спектр состояний системы, а собственные векторы $\vec{X}$ - волновые функции этих состояний. Найдя решения задачи /1/, можно определить любые характеристики данной физической системы, вероятности переходов, сечения различных реакций и т.д.

Общие методы решения /1/ хорошо известны /см.,напр.,[1,2] /, и при небольшой размерности n ее решение легко осуществимо практически. Однако во многих реальных случаях размерность n может оказаться очень большой /$\sim 10^2 \div 10^6$/, и тогда при решении этой проблемы возникают технические трудности. В настоящее время разработаны способы численного решения как общей проблемы /нахождение всех решений системы/, так и частной /нахождение отдельных выделенных решений/. Существуют прямые и итерационные методы ее решения, которые подробно описаны[3,4]. Однако, как отмечается, например, в[4], в настоящее время нет простых методов нахождения собственных значений и собственных векторов матриц больших размерностей. Большие трудности встречаются с неустойчивостью решений, связанной с плохой обусловленностью матриц.

В большинстве физических задач нахождение собственных векторов $\vec{X}$, собственных значений λ_i можно считать лишь промежуточным этапом, поскольку собственные векторы, например, в квантовой механике не являются наблюдаемыми величинами, и все физические характеристики должны быть выражены через них. При этом во многих реальных физических задачах точное нахождение каждого собственного значения и собственного вектора не представляет физического интереса, а иногда является излишним, если учесть структуру конечных выражений. Помимо основной трудности нахождения λ_i и $\vec{X}$, в некоторых случаях проблему представляет даже хранение и поиск огромной информации обо всех этих вели-

© 1981 Объединенный институт ядерных исследований Дубна

чинах. Представляется заманчивым пропустить этот промежуточный этап и получить сразу же конечный результат для физических величин, усредненных по некоторому интервалу, где распределены собственные значения λ_i .

Общие свойства однородной системы /1/ позволяют обойти проблему нахождения собственных значений и собственных векторов и тем самым существенно упростить решение физической проблемы, сводя ее к вычислению функции при произвольных значениях аргумента.

2. НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА ОДНОРОДНОЙ СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Для достижения поставленной цели воспользуемся некоторыми известными свойствами характеристического /секулярного/ уравнения, обеспечивающего существование нетривиального решения системы /1/:

$$\det(\hat{A}-\lambda\hat{I}) \equiv |\hat{A}-\lambda\hat{I}| = 0. \qquad /2/$$

Если ранг системы /1/ равен $n-1$, то ее решение можно определить условием /2,5/:

$$X_1 : X_2 : X_3 \ldots : X_n = |\hat{A}_{i1}-\lambda\hat{I}| : |\hat{A}_{i2}-\lambda\hat{I}| : |\hat{A}_{i3}-\lambda\hat{I}| \ldots : |\hat{A}_{in}-\lambda\hat{I}|, \qquad /3/$$

где $\hat{A}_{ij}$ - алгебраическое дополнение элемента a_{ij} матрицы $\hat{A}$ /причем i выбрано так, что хотя бы одно из $\hat{A}_{ij}$ отлично от нуля/. Это значит, что все отношения X_j/X_i определены однозначно; решения /3/, получающиеся при различных таких значениях i, тождественны, т.е. для симметричной матрицы:

$$\frac{X_j}{X_i} = \frac{|\hat{A}_{ij}-\lambda\hat{I}|}{|\hat{A}_{ii}-\lambda\hat{I}|} = \frac{|\hat{A}_{kj}-\lambda\hat{I}|}{|A_{ki}-\lambda\hat{I}|} = \frac{|\hat{A}_{jj}-\lambda\hat{I}|}{|\hat{A}_{ij}-\lambda\hat{I}|}. \qquad /4/$$

Если воспользоваться дополнительным условием нормировки для векторов $\vec{X}$:

$$1 = \sum_j (X_j)^2 = (X_i)^2 \sum_j \left(\frac{X_j}{X_i}\right)^2 \qquad /5/$$

и значениями /4/ X_j/X_i, то можно определить нормировочный множитель

$$(X_i)^2 = \left[\sum_j \left(\frac{X_j}{X_i}\right)^2\right]^{-1} = \left[\sum_j \frac{|\hat{A}_{jj}-\lambda\hat{I}|}{|\hat{A}_{ii}-\lambda\hat{I}|}\right]^{-1} = \frac{|\hat{A}_{ii}-\lambda\hat{I}|}{\sum_j |\hat{A}_{jj}-\lambda\hat{I}|}. \qquad /6/$$

Известно также /4/, что

$$\frac{d}{d\lambda}|\hat{A}-\lambda\hat{I}| = -\sum_j |\hat{A}_{jj}-\lambda\hat{I}|, \qquad /7/$$

откуда получаем:

$$(X_i)^2 = -\frac{|\hat{A}_{ii} - \lambda\hat{I}|}{d/d\lambda\,|\hat{A} - \lambda\hat{I}|}, \qquad /8/$$

или, учитывая /2/:

$$(X_i)^2 = -\left[\frac{d}{d\lambda}\left(\frac{|\hat{A} - \lambda\hat{I}|}{|\hat{A}_{ii} - \lambda\hat{I}|}\right)\right]^{-1}. \qquad /9/$$

Соотношение /8/-/9/ между производной от секулярного уравнения /2/ и нормировочным множителем собственных векторов /5/ строго было доказано другим способом в /6/ и использовано при развитии метода силовых функций /6-8/. В /9/ оно ранее неявно использовалось при решении частной задачи о распределении силы одночастичного состояния по уровням системы. Со временем метод силовых функций был применен к решению многих задач ядерной физики для деформированных и сферических четно-четных и нечетных ядер при исследовании их структуры и сечений ядерных реакций. Подобный метод развивался и использовался в /10,11/ при исследовании реакций квазиупругого рассеяния на легких ядрах с возбуждением дырочных состояний. В /10/ анализировалась связь метода спектральной функции с формализмом функции Грина, а в /12/ - метода силовых функций с методом функции отклика /13/.

3. МЕТОД СИЛОВЫХ ФУНКЦИЙ

Рассмотрим применение метода силовых функций в общем виде, отвлекаясь на время от специфики конкретных задач. При решении физических задач во многих случаях на завершающем этапе необходимо вычислить некоторые выражения, билинейные по X_i, описывающие переход из определенного начального состояния системы λ_0 /например, основного/ в произвольное состояние, соответствующее собственному значению λ:

$$B_\lambda \equiv B_{\lambda_0 \to \lambda} = \sum_{i_0 j_0 \in ij} X_{i_0}(\lambda) X_{j_0}(\lambda) F_{i_0 j_0}(\lambda_0). \qquad /10/$$

Здесь величина $F_{i_0 j_0}(\lambda_0)$ не зависит от λ и определяется начальным состоянием λ_0 и матричными элементами, соответствующими конкретному физическому процессу. Зависимость /10/ от λ_0 в рассматриваемом случае не принципиальна, и в дальнейшем ее явно не фиксируем. Очевидно, что если задача /1/ нахождения λ и $\vec{X}$ решена, то вычисление B_λ не представляет принципиальных трудностей, и для систем /1/ невысокой размерности оно осуществляется непосредственно. Однако при наличии большого числа состояний λ_i в интересующей нас области собственных значений, нахождение всего набора B_{λ_i} и анализ этих величин представляет технические трудности. Поэтому можно сформулировать задачу нахождения силовой функции, зависящей от непрерывного параматра ω и определяемой следующим образом:

$$b(\omega) = \sum_i B_{\lambda_i}\, \rho(\omega-\lambda_i), \qquad /11/$$

где весовая функция берется в виде функции Лоренца:

$$\rho(x) = \rho_L(x) = \frac{1}{2\pi}\,\frac{\Delta}{x^2 + (\Delta/2)^2}, \qquad /12/$$

нормированной на единицу:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\,dx = 1. \qquad /13/$$

Величину $b(\omega)$ можно рассматривать как значение B_λ, усредненное с весом $\rho(\omega-\lambda)$. Воспользовавшись /4/, /8/ и /10/, можно преобразовать /11/ к виду:

$$b(\omega) = -\sum_\lambda \sum_{i_0 j_0} \frac{|\hat{A}_{i_0 j_0} - \lambda\hat{I}|}{\frac{d}{d\lambda}|\hat{A} - \lambda\hat{I}|} F_{i_0 j_0}\rho_L(\omega-\lambda) \equiv \sum_\lambda \frac{P(\lambda)\rho_L(\omega-\lambda)}{\frac{d}{d\lambda}|\hat{A}-\lambda\hat{I}|} = \frac{1}{2\pi i}\oint_{C_\lambda} \frac{P(z)\rho_L(\omega-z)}{|\hat{A} - z\hat{I}|}dz, \qquad /14/$$

где введено обозначение $P(\lambda) \equiv \sum_{i_0 j_0} |\hat{A}_{i_0 j_0} - \lambda\hat{I}| F_{i_0 j_0}$. Здесь была использована теорема о вычетах и $b(\omega)$ представлена в виде интеграла вдоль контура C_λ, содержащего внутри особые точки подынтегральной функции $z = \lambda_i$ типа простых полюсов, являющиеся корнями уравнения /2/. Учитывая структуру подынтегральной функции в /14/, по теореме Коши можно перейти к контурным интегралам вокруг остальных особых точек этой функции /см. рис. 1/:

$$b(\omega) = -\frac{1}{2\pi i}\oint_{C_\lambda} = \frac{1}{2\pi i}\oint_{C_{1,2}} + \frac{1}{2\pi i}\oint_{C_p} + \frac{1}{2\pi i}\oint_{C_\infty}. \qquad /15/$$

Здесь $z = p_j$ - особые точки функции $P(z)$, $z_{1,2} = \omega \pm i\Delta/2$ - полюсы $\rho_L(\omega - z)$, а C_p, $C_{1,2}$ - соответствующие контуры обхода, C_∞ - контур на бесконечности. В частном случае, имеющем большой практический интерес [6,7], когда $P(z)$ не имеет особенностей /следовательно, $\oint_{C_p} = 0$ /, и вычет подынтегральной функции относительно бесконечно удаленной точки равен нулю, находя вычеты относительно $z_{1,2}$ в явном виде, получаем:

$$b(\omega) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\,\frac{P(z)}{|\hat{A} - z\hat{I}|}\Big|_{z=\omega+i\Delta/2}. \qquad /16/$$

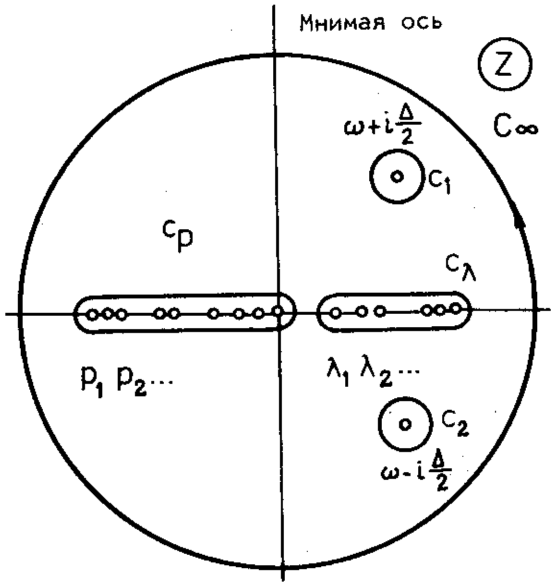

Рис.1. Контуры интегрирования в комплексной плоскости z.

В общем случае дополнительно ищутся вычеты относительно особых точек $z=p_j$, ∞, тогда выражение для $b(\omega)$ приобретает более сложный вид. Заметим, однако, что в реальных расчетах нахождение полюсов $P(z)$ и тем более - вычетов относительно известных полюсов, задача обычно более легкая по сравнению с решением секулярного уравнения /2/ высокого порядка.

Для факторизованной функции $F_{i_0 j_0} \equiv f_{i_0} f_{j_0}$ числитель в /16/ преобразуется к окаймленному определителю, в результате получаем:

$$b(\omega) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Im}\left.\frac{\begin{vmatrix} 0 & -f_{j_0} \\ f_{i_0} & \|\hat{A}-z\hat{I}\| \end{vmatrix}}{|\hat{A}-z\hat{I}|}\right|_{z=\omega+i\frac{\Delta}{2}} . \qquad /17/$$

Таким образом, для нахождения силовой функции /11/ не требуется вычисления собственных значений и собственных векторов системы уравнений /1/, хотя при определении $b(\omega)$ по формулам /16/-/17/ в общем виде остается проблема вычисления определителей высокого порядка. Используя, однако, специфику структуры матрицы /1/, во многих случаях удается преобразовать указанные определители к определителям невысокого порядка /иногда первого/, и задача предельно упрощается [6,7].

4. СРАВНЕНИЕ СИЛОВЫХ ФУНКЦИЙ, ПОЛУЧЕННЫХ С РАЗЛИЧНЫМИ ФУНКЦИЯМИ УСРЕДНЕНИЯ

Обсудим вопрос о выборе весовой функции $\rho(\omega-\lambda)$ в виде /12/. Этот выбор определяется, во-первых, тем, что предельным значением функции Лоренца при $\Delta \to 0$ является δ-функция Дирака, т.е. $\lim\limits_{\Delta\to 0} \rho_L(x) = \delta(x)$. Отсюда видно, что $\lim\limits_{\Delta\to 0} b(\omega) = \sum\limits_i B_{\lambda_i} \delta(\omega-\lambda_i)$, и силовая функция $b(\omega)$ отлична от 0 лишь при $\omega = \lambda_i$ и описывает распределение физических величин $B_\lambda = \int\limits_{\lambda-\epsilon}^{\lambda+\epsilon} \lim\limits_{\Delta\to 0} b(\omega)\, d\omega \;\; (\epsilon \to 0)$, т.е. соответствует точному решению /1/. Вторая причина выбора $\rho(\omega-\lambda)$ в виде /12/ заключается в том, что функция Лоренца имеет всего два простых полюса $z_{1,2} = \omega \pm i\frac{\Delta}{2}$, поэтому выражение для силовой функции принимает очень простой вид /16/-/17/.

По физическому смыслу вычисление силовой функции /11/ означает нахождение усредненного с весом $\rho(\omega-\lambda)$ значения величины B. Формально усреднение проводится в бесконечном интервале, но если учитывать быстрое спадание весовой функции /12/ при $|\omega-\lambda| \to \infty$, то практически интервал усреднения - порядка Δ.

В некоторых случаях для усреднения физических величин используются другие весовые функции $\rho_F(x)$:

$$\rho_R(x) = \begin{cases} 0, & |x| > \Delta \\ \dfrac{1}{2\Delta}, & |x| \le \Delta, \end{cases} \qquad /12.1/$$

$$\rho_G(x) = \frac{2}{\Delta\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{x^2}{2(\Delta/2)^2}\right], \qquad /12.2/$$

$$\rho_S(x) = \frac{1}{\pi}\,\frac{\sin\dfrac{x}{\Delta/2}}{x}. \qquad /12.3/$$

Вид функций /12/-/12.3/ представлен на рис.2. Разумеется, любое усреднение искажает представление истинного распределения физических величин B_λ по собственным значениям λ.

Исследуем зависимость результатов расчета силовых функций /11/ от функций усреднения /12/-/12.3/, интервала усреднения Δ, и сравним их с точным распределением B_λ /без усреднения/. Сделаем это вначале на частных примерах.

На рис.3, носящем методический характер, приведены силовые функции некоторой величины B_λ, распределенной приблизительно эквидистантно на интервале [3,17]. Силовые функции рассчитаны при усреднении по /12/-/12.3/ с $\Delta=1$ и сравниваются с точным распределением этой величины и гистограммой для нее. Видно,

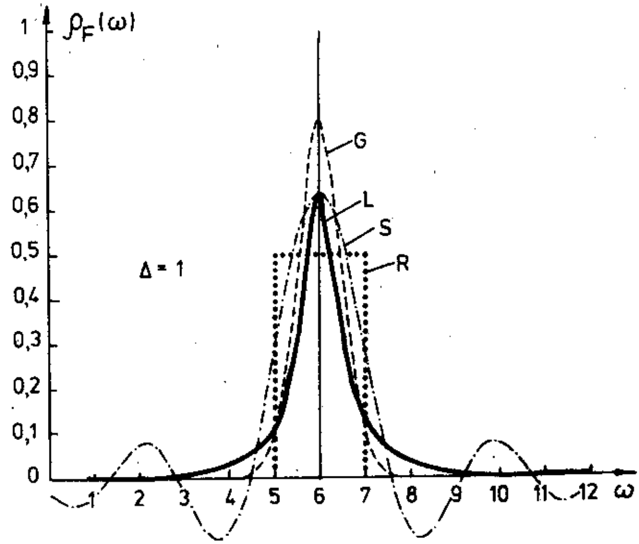

Рис.2. Функции усреднения /безразмерные единицы/, $\Delta = 1$. Обозначения: L – функция Лоренца /12/, R – прямоугольная /12.1/, G – функция Гаусса /12.2/, S – синусоида /12.3/.

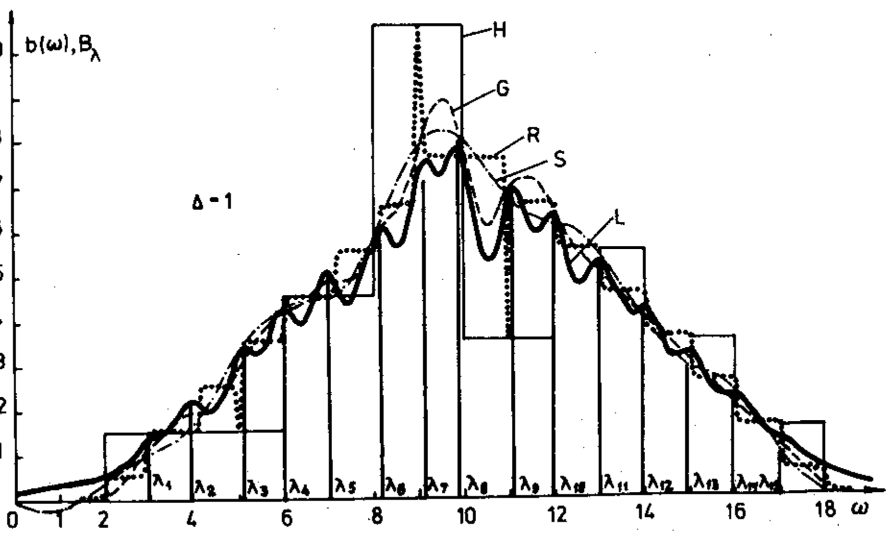

Рис.3. Величина B_λ и ее силовые функции с усреднением по /12/–/12.3/ /безразмерные единицы/, $\Delta = 1$. Обозначения те же, что на рис.2, H – гистограмма.

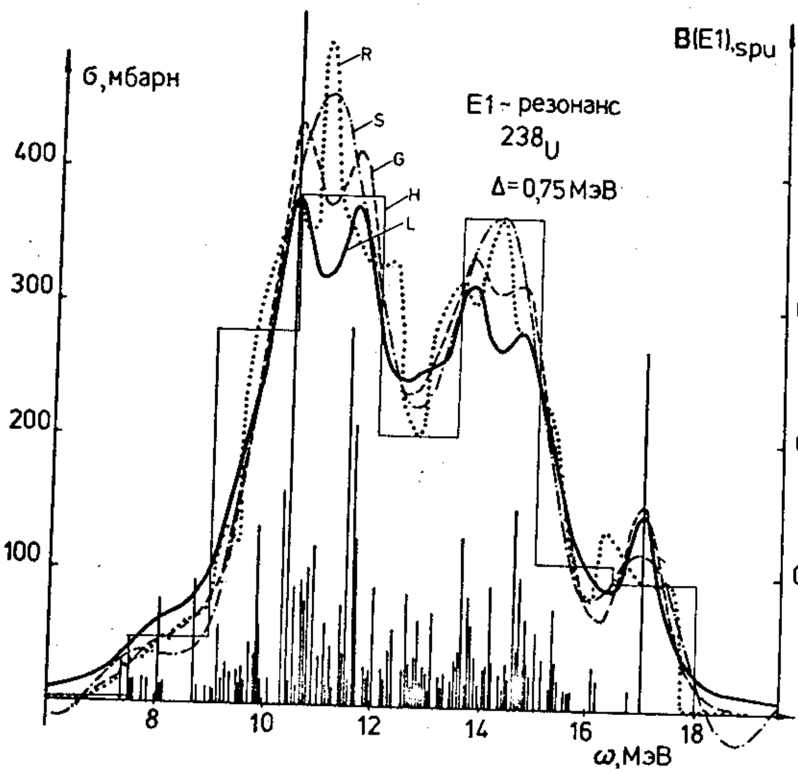

Рис.4. Приведенные вероятности B(E1) дипольного гигантского резонанса /правая шкала, одночастичные единицы/ и силовые функции сечения дипольного фотопоглощения $\sigma(\omega)$ /левая шкала, мб/ в ^{238}U с усреднением по /12/-/12.3/ $\Delta = 0,75$ МэВ. Обозначения те же, что на рис.2,3.

что все силовые функции качественно правильно передают распределение величины B_λ по всему интервалу собственных значений λ, включая такие детали этого распределения, как небольшие отклонения от эквидистантности. Из рисунка видно, что представление результатов в виде гистограммы и усреднение по /12.1/ очень чувствительны к краевым эффектам, поэтому их использование оправдано лишь при большой плотности собственных значений λ и при отсутствии сильных флюктуаций B_λ.

На рис.4 представлены величины наиболее сильных приведенных вероятностей $E1$-перехода /для которых $B(E1) \geq 0{,}01$ spu /, рассчитанных в однофононном приближении в рамках квазичастично-фононной модели [7,14]. На этом же рисунке приведены силовые функции для сечения фотопоглощения дипольного гигантского резонанса в ^{238}U, полученные в результате усреднения соответствующих дискретных величин по /12/-/12.3/ с $\Delta = 0{,}75$ МэВ. Из рис.3 и 4 видно, что при выбранном интервале усреднения из всех рассмотренных функций /12/-/12.3/ функции Лоренца и Гаусса наиболее точно позволяют передать распределение физических величин. Результаты для $b(\omega)$ в области максимума распределения различаются на 10-15%. Наибольшее относительное различие имеется на хвостах распределения, как и следовало ожидать, с учетом вида функций усреднения /см. рис.2/. Различие по абсолютной величине будет уменьшаться при $\Delta \to 0$.

Вопрос о выборе интервала усреднения является очень важным, он неоднократно обсуждался [6-7,15]. Очевидно, что интервал усреднения Δ должен быть значительно меньше области локализации /распределения/ физической величины и интервала, на котором проявляются характерные структурные особенности распределения. Ограничение на величину Δ снизу определяется физическими соображениями, связанными с точностью используемой физической теории: интервал усреднения Δ должен быть больше неопределенности в вычислении данной величины в рамках указанной теории. Таким образом, при описании гигантских резонансов в деформированных ядрах в рамках квазичастично-фононной модели получаем следующую приближенную оценку для интервала усреднения: 0,2 МэВ $\leq \Delta \leq$ 2 МэВ.

5. СТАТИСТИЧЕСКИЕ МОМЕНТЫ СИЛОВЫХ ФУНКЦИЙ. СРАВНЕНИЕ СИЛОВЫХ ФУНКЦИЙ С ТОЧНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ

Попытаемся определить математически более строго оптимальную величину интервала усреднения Δ. Кроме того, рассмотрение частных примеров, проведенное в предыдущем разделе настоящей работы, показывает, что необходимо иметь общий математический критерий, позволяющий оценить, насколько результаты расчета силовых функций $b(\omega)$ с различными функциями усреднения близки между собой и как они отличаются от распределения соответствующей величины B_λ, даваемого точным решением задачи. Условно назовем это распределение величины B_λ /без усреднения/ точным.

Сравнение указанных распределений можно проводить, вычисляя для них соответствующие статистические моменты /центральные μ_n или начальные ν_n / и производные от них величины дисперсии σ, асимметрии A и эксцесса E.

По определению /см., напр.,[2,16] /, начальным моментом n -го порядка ν_n называют математическое ожидание величины ω^n; т.е. для дискретной случайной величины:

$$\nu_n = \sum_i \omega_i^n P_i \,, \qquad /18/$$

а для непрерывной:

$$\nu_n = \int_{-\infty}^{\infty} \omega^n P(\omega)\, d\omega \,, \qquad /18.1/$$

где P_i и $P(\omega)$ описывают распределение случайной величины, нормируемое обычно на единицу:

$$\frac{1}{\nu_0}\sum_i P_i = 1; \qquad \frac{1}{\nu_0}\int_{-\infty}^{\infty} P(\omega)\, d\omega = 1. \qquad /19/$$

Тогда, например, для гигантского резонанса $\nu_0 = \sum_i B_{\lambda_i}$, а нормированный первый момент $\nu_1 = \frac{1}{\nu_0}\sum_i \lambda_i B_{\lambda_i}$, дающий среднее значение случайной величины или ее математическое ожидание, описывает положение центра тяжести резонанса. Аналогичное сопоставление можно провести и для моментов силовых функций $b(\omega)$ /11/.

Центральные моменты n-го порядка случайной величины определяются [2,16] следующим образом:

$$\mu_n = \sum_i (\omega_i - \nu_1)^n P_i \,; \quad \mu_n = \int_{-\infty}^{\infty} (\omega - \nu_1)^n P(\omega)\, d\omega \,. \qquad /20/$$

По определению, $\mu_1 = 0$; μ_2 представляет дисперсию σ^2 случайной величины, характеризующую рассеивание случайной величины около ее математического ожидания:

$$\sigma^2 = \mu_2; \qquad /21/$$

μ_3 служит характеристикой скошенности или асимметрии A распределения:

$$A = \mu_3/\sigma^3; \qquad /22/$$

μ_4 характеризует островершинность или плосковершинность распределения /эксцесс/:

$$E = \mu_4/\sigma^4 - 3. \qquad /23/$$

Анализ силовых функций на языке статистических моментов позволяет ввести естественную единицу масштаба для интервала распределения - среднеквадратичное отклонение σ, и сравнивать с этой величиной как интервал усреднения Δ, так и весь рассмат-

Таблица 1

Расчет ν_0^F /в ед. spu МэВ/ в зависимости от Δ с использованием функций усреднения F /12/–/12.3/; $\nu_0^e = 2225$ spu · МэВ; $I = 3\sigma$.

F, функция усреднения \ ,МэВ	0,I	0,25	0,5	0,75	I,0	2,0	4,0
H (гистограмма)	2225	2225	2225	2250	2225	2220	2I40
L	22I0	2200	2I60	2I40	2II0	2020	I9I0
R	2225	2225	2225	2200	2225	2225	2225
G	2225	2225	2225	2225	2225	2225	2223
S	2220	2220	2230	2220	2230	2230	2290

Таблица 2

Расчет ν_1^F /в МэВ/; $\nu_1^e = 12{,}54$ МэВ; $I = 3\sigma$. Обозначения те же, что в табл.1

Δ,МэВ \ F	0,I	0,25	0,5	0,75	I,0	2,0	4,0
H	I2,56	I2,56	I2,53	I2,6	I2,4	I2,I	I2,5
L	I2,54	I2,54	I2,54	I2,54	I2,54	I2,56	I2,6
R	I2,54	I2,54	I2,54	I2,5	I2,54	I2,54	I2,5
G	I2,54	I2,54	I2,54	I2,54	I2,54	I2,54	I2,54
S	I2,53	I2,54	I2,56	I2,52	I2,52	I2,6	I2,4

Таблица 3

Расчет σ^F /в МэВ/; $\sigma^e = 2{,}214$ МэВ; $I = 3\sigma$. Обозначения те же, что в табл.1

Δ,МэВ \ F	0,I	0,25	0,5	0,75	I,0	2,0	4,0
H	2,2	2,2	2,2	2,4	2,4	2,8	4,0
L	2,25	2,3	2,4	2,45	2,5	2,8	3,6
R	2,2I4	2,2I5	2,22	2,25	2,3	2,5	3,2
G	2,2I4	2,22	2,23	2,25	2,3	2,4	3,0
S	2,2I	2,2	2,22	2,2	2,2	2,2	2,3

Таблица 4

Расчет ν_0^L, ν_1^L, σ^L с использованием различных интервалов интегрирования I; $\Delta = 0{,}75$ МэВ

I (σ =2,25 МэВ)	2σ	3σ	4σ	5σ	
ν_0^L, spu·МэВ	2020	2I40	2I60	2I80	ν_0^e =22225 spu·МэВ
ν_1^L, МэВ	I2,55	I2,54	I2,54	I2,54	ν_1^e =I2,54 МэВ
σ^L, МэВ	2,I7	2,45	2,6	2,8	σ^e =2,2I4 МэВ

Таблица 5

"Восстановление" ν_0^e и σ^e по формулам /24/,/24.6/

Δ, МэВ	0,I	0,25	0,5	0,75	I,0	2,0	4,0
ν_0^L, spu·МэВ	22I0	2200	2I60	2I40	2II0	2020	I9I0
ν_0^e, spu·МэВ	2223	222I	2220	22I0	22I0	2200	22I0
σ^L, МэВ	2,25	2,3	2,4	2,45	2,5	2,8	3,6
σ^e, МэВ	2,2	2,2	2,I5	2,I3	2,I2	2,I	2,3
σ^G, МэВ	2,2I4	2,22	2,23	2,25	2,3	2,4	3,0
σ^e, МэВ	2,2I4	2,2I4	2,2I4	2,2I4	2,2I4	2,2I	2,2

Таблица 6

Высшие моменты силовых функций

Моменты / F	μ_2, МэВ^2	μ_3, МэВ^3	μ_4, МэВ^4	μ_5, МэВ^5	μ_6 МэВ^6	μ_7, МэВ^7	A	E
H	4,8	I,9	54	38	850	600	0,I8	−0,69
L	5,3 (4,9)	2,3 (2,3)	80 (50)	53	3300	960	0,I9 (0,2I3)	−0,044 (−0,9)
R	4,9	2,3	56	52	9I0	970	0,2I	−0,67
G	4,904 (4,90I)	2,324 (2,324)	56,2 (56,09)	52	9I0	980	0,2I4 (0,2I4)	−0,664 (−0,665)
S	4,9	2,9	60	I50	I700	I6000	0,3	−0,5
Точное значение	4,90I	2,324	56,09	52,0	908	98I	0,2I4	−0,665

риваемый в численных расчетах интервал I распределения указанной величины B_λ или силовой функции $b(\omega)$. Учитывая структуру силовой функции /11/, возьмем за единицу дисперсии величину $\sigma^2=(\sigma^e)^2+(\Delta/2)^2$, где $(\sigma^e)^2$ - дисперсия величины B_λ /разумеется, дисперсия /11/ не обязательно должна совпадать с вводимой здесь масштабной единицей σ^2, хотя для функции усреднения /12.2/, как увидим далее, это выполняется/.

Известно, что для нормального /гауссового/ распределения произвольной величины справедливо так называемое "правило трех сигм"/12/, гласящее, что отклонение этой величины от математического ожидания по абсолютной величине не превосходит утроенного среднего квадратичного отклонения σ. Вероятность попадания случайной величины за указанный интервал равна 0,0027, и ею можно пренебречь. Поэтому при расчете силовых функций будем, как правило, брать полный интервал распределения симметричным относительно математического ожидания ν_1 и равным $2I$, где $I=3\sigma$.

В табл.1-3 представлены результаты вычислений величин σ_0^F ν_1^F и σ^F для рассмотренных в разделе 4 силовых функций сечения дипольного фотопоглощения в ^{238}U /см. также рис.4/, полученные с различными Δ с использованием функций усреднения /12/-/12.3/. Сравнение с точными значениями $\nu_0^e=\sum_i B_{\lambda_i}$, ν_1^e и σ^e показывает, что для описания низших статистических моментов с точностью 5-10% необходимо брать $\Delta\leq\frac{1}{3}\sigma$. При уменьшении требований к точности до 10-30% выбор интервала усреднения определяется условием $\Delta\leq\sigma$.

Табл.4 демонстрирует результаты расчета для этого же случая величин ν_0^L, ν_1^L и σ^L, полученных с усреднением по функции Лоренца /12/ в зависимости от выбранного ограничения на интервал распределения I. Видно, что выбор $I=3\sigma$ соответствует точности расчета этих величин также в пределах 5-10%.

Из табл.1-4 видно, что наилучшие результаты получаются при усреднении с функцией Гаусса.

Заметим, что в реальных расчетах $b(\omega)$ заранее не известна величина σ, поэтому на первый взгляд предлагаемый здесь выбор Δ и I через σ невозможен. Однако на самом деле речь идет лишь о приближенной оценке Δ и I, и из табл.3 /и из анализа табл.1,2,4/ видно, что для такой оценки можно использовать σ^F, близкую с вполне удовлетворительной точностью 10-20% к величине σ.

Зная конкретный вид функций усреднения, можно приближенно определить, как зависят от вида этих функций, величин Δ и I результаты расчета статистических моментов и других характеристик, используемых для анализа $b(\omega)$. Пользуясь малостью величины Δ/I, ограничиваясь первым порядком разложения и предполагая пределы интегрирования симметричными, получаем для моментов силовых функций, вычисленных при усреднении с функциями Лоренца и Гаусса:

$$\nu_0^L \approx \nu_0^e \cdot \frac{1}{\pi}\,\mathrm{arctg}\frac{2I}{\Delta} \approx \nu_0^e \cdot (1 - \frac{\Delta}{\pi I}); \quad \nu_0^G \approx \nu_0^e \cdot \Phi(\frac{2I}{\Delta}); \qquad /24/$$

$$\nu_1^L \approx \nu_1^e; \qquad \nu_1^G \approx \nu_1^e; \qquad /24.1/$$

$$\nu_2^L \equiv \nu_2^e + \delta\nu_2^L \approx \nu_2^e + \frac{I\Delta/\pi}{1 - \Delta/\pi I} - (\frac{\Delta}{2})^2; \; \nu_2^G \equiv \nu_2^e + \delta\nu_2^G \approx \nu_2^e + (\frac{\Delta}{2})^2; \qquad /24.2/$$

$$\mu_2^L \equiv \mu_2^e + \delta\mu_2^L \approx \mu_2^e + \delta\nu_2^L; \qquad \mu_2^G \approx \mu_2^e + (\frac{\Delta}{2})^2; \qquad /24.3/$$

$$\mu_3^L \approx \mu_3^e; \qquad \mu_3^G \approx \mu_3^e; \qquad /24.4/$$

$$\mu_4^L \equiv \mu_4^e + \delta\mu_4^L \approx \mu_4^e + (\frac{\Delta}{2})^2 + \frac{I\Delta/\pi\,(I^2/3 - (\Delta/2)^2)}{1 - \Delta/\pi I} + 6(\mu_2^L - \delta\mu_2^L)\,\delta\mu_2^L; \qquad /24.5/$$

$$\mu_4^G \equiv \mu_4^e + \delta\mu_4^G \approx \mu_4^e + 6(\frac{\Delta}{2})^2 \mu_2^G - 3(\frac{\Delta}{2})^4.$$

Здесь $\Phi(2I/\Delta)$ – интеграл вероятности, $\Phi(2I/\Delta \gtrsim 3) \approx 1$.

Используя /24/-/24.5/, легко получить из вычисленных моментов ν_n^F, μ_n^F для силовых функций значения моментов ν_n^e, μ_n^e, дисперсии $(\sigma^e)^2$, асимметрии A^e и эксцесса E^e для точного распределения величины B_λ. Например, для трех последних величин имеем:

$$\sigma^e = (\mu_2^e)^{1/2} \approx (\mu_2^F - \delta\mu_2^F)^{1/2}, \qquad /24.6/$$

$$A^e = \mu_3^e/(\sigma^e)^3 \approx A^F \cdot [\mu_2^F/(\mu_2^F - \delta\mu_2^F)]^{1/2}, \qquad /24.7/$$

$$E^e = \mu_4^e/(\mu_2^e)^2 - 3 \approx (\mu_4^F - \delta\mu_4^F)/(\mu_2^F - \delta\mu_2^F)^2 - 3. \qquad /24.8/$$

Таким образом, можно приближенно "восстановить" точные значения моментов из моментов для силовых функций $b(\omega)$ /11/, полученных при усреднении с определенной функцией $\rho(\omega-\lambda)$ /12/ - /12.3/.

Из табл.5 видно, что "восстановление" нижайших точных моментов происходит с хорошей точностью даже для $\Delta \gtrsim \sigma$, где /24/- /24.8/ требуют уточнения. Заметим, что для функции Лоренца все статистические моменты с $n \gtrsim 2$ бесконечны. Однако, проводя интегрирование в конечном симметричном интервале $\pm I$ и учитывая зависимость от I, даваемую /24.2/, получаем разумные значения для μ_2^e, ν_2^e и σ^e.

Более тонкие детали распределения случайной величины передают высшие статистические моменты, которые более чувствительны к интервалу усреднения Δ и ограничению на учитываемый в расчетах интервал распределения I. В табл.6 приведены значения асимметрии A^F, эксцесса E^F и некоторых центральных моментов μ_n^F, рассчитанные для силовых функций сечения фотовозбуждения дипольного гигантского резонанса в ^{238}U с $\Delta=0,1$ МэВ при усреднении по /12/-/12.3/. Эти величины сравниваются с соответствующими величинами, рассчитанными для точного распределения. В скобках приведены значения моментов и производных от них величин, полученные после "восстановления" по формулам /24/-/24.8/. Из табл.6 видно, что для высоких моментов точность их расчета с различными функциями усреднения и последующего "восстановления" заметно снижается, за исключением расчета при усреднении с функцией Гаусса. При увеличении Δ точность понижается еще значительнее. Например, для моментов, полученных при усреднении с функцией Лоренца с $\Delta=0,75$ МэВ, имеем:

$$\mu_2^L=6(4,5)\ ;\ \mu_3^L=2,3(2,3)\ ;\ \mu_4^L=90(24)\ ;\ A^L=0,16(0,24)\ ;\ E^L=-0,4(-1,8)\ ,$$

где в скобках приведены "восстановленные" величины.

Аналогичные результаты получаются для силовых функций распределения, представленного на рис.3.

Проведенное в данном разделе рассмотрение, строго говоря, применимо для описания распределений физических величин, сконцентрированных на определенном конечном интервале /например, гигантских резонансов/ и имеющих один выделенный максимум /в статистике такие распределения называются одномодальными/. В то же время, как показано в /6,7/, метод силовых функций применим для совершенно произвольных распределений. В том случае, если распределение имеет более сложную структуру с несколькими разделенными максимумами /многомодальное распределение/, необходимо рассматривать его состоящим из нескольких групп, вводя понятие внутригрупповой и межгрупповой дисперсий /2,16/, через которые можно определить оптимальные значения интервала усреднения Δ и интервала распределения I. Как показывают расчеты, проведенные для ряда таких более сложных распределений, "восстановление" точных моментов с хорошей точностью удается провести и в подобных случаях. Более подробное обсуждение данных вопросов выходит за рамки настоящего рассмотрения.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, использование метода силовых функций позволяет обойти решение задачи /1/ на собственные значения и собственные векторы и получить с удовлетворительной точностью информацию о распределении физических характеристик, соответствующих точному решению задачи /1/. Анализ силовых функций этих характеристик с помощью статистических моментов дает возможность оценить точность метода силовых функций и позволяет выбрать оптимальные значения для параметра усреднения Δ и интервала распределения I, связав их с величиной дисперсии соответствующей характеристики. Такой анализ позволяет однозначно сопоставить результаты теории и эксперимента при сравнении информации о физических величинах, полученных при усреднении по интервалу их распределения.

В заключение хочу поблагодарить проф. В.Г.Соловьева за внимание к данной работе и полезные обсуждения, а также А.А.Корнейчука, Г.Кырчева, В.К.Лукьянова, И.Н.Михайлова, В.О.Нестеренко, В.В.Пашкевича, С.И.Сердюкову, Ч.Стоянова, А.И.Титова, В.Д.Тонеева, Н.Ю.Ширикову и участников семинара по теории ядра сектора №1 ЛТФ за полезные дискуссии и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ильин В.А., Позняк Э.Г. Линейная алгебра. "Наука",М.,1974.
2. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. "Наука",М.,1977.
3. Фаддеев А.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. Физматгиз, М., 1960; Уилкинсон Дж.Х. Алгебраическая проблема собственных значений. "Наука", М., 1970; Стренг Г. Линейная алгебра и ее применения. "Мир", М., 1980; Воеводин В.В. Вычислительные основы линейной алгебры. "Наука", М., 1977.
4. Беллман Р. Введение в теорию матриц. "Наука", М., 1976.
5. Маделунг Э. Математический аппарат физики. "Наука", М.,1968.
6. Malov L.A., Soloviev V.G. Nucl.Phys., 1976, A270,p.87.
7. Малов Л.А., Нестеренко В.О., Соловьев В.Г. ТМФ, 1977, 32, с.134; Малов Л.А., Соловьев В.Г. ЭЧАЯ, 1980, 11, с.301.
8. Молина Х.Л., Михайлов И.Н., Назмитдинов Р.Г. ТМФ, 1980, 42, с.253.
9. Бор О., Моттельсон Б. Структура атомного ядра. "Мир", М., 1971, т.1.
10. Gross D.H.E. and Lipperheide. Nucl.Phys., 1970, A150, p.449; Fritsch W. et al. Nucl.Phys., 1972, A198, p.515; 1975, A241, p.79.
11. Березовой В.П. и др. Укр.физ.журн., 1976, 21, с.1591; Нагорный С.И., Инопин Е.В. Укр.физ.журн., 1976, 21,с.1894.
12. Кырчев Г. Болг.физ.журн., 1979, 6, с.288.

13. De Forest T., Jr., Walecka J.D. Adv.Phys., 1966, 15,p.1; Bohigas O. et al. Phys.Rep., 1979, 51, p.267.
14. Соловьев В.Г. ЭЧАЯ, 1978, 9, с.580/860/.
15. Струтинский В.М., Пашкевич В.В. Избранные вопросы физики деления, Изд-во МИФИ, М., 1978; Струтинский В.М., Иванюк Ф.А. Изв. АН СССР, сер.физ., 1977, 41, с.114.
16. Иванова В.М. и др. Математическая статистика, под ред. А.М.Длина. "Высшая школа", М., 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 апреля 1981 года.