

文章编号: 1007-4627(2013)04-0398-05

# 随机矩阵的本征值外推性质

沈佳杰

(中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800)

**摘要:** 外推近似方法在原子核壳模型上取得了一些成功, 然而人们对于其原理知道得比较少。这里主要研究并讨论了随机两体系综和高斯正交系综最小本征值。利用截断空间的外推解释了高斯正交系综下的外推公式以及随机两体系综下本征值外推收敛的鲁棒性, 即对于壳模型有效相互作用而言, 用外推法预言最低本征值收敛性很好。

**关键词:** 高斯正交系综; 随机两体系综; 本征值; 外推方法

**中图分类号:** O571.2    **文献标志码:** A    **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.30.04.398

## 1 引言

本征值问题是现代科学的一个基础性问题, 很多问题需要做矩阵对角化。随着计算机技术的发展, 人们基于不同的条件和目标发展了本征值的各种数值计算方法。例如, Jacobi 算法和 lanczos 算法<sup>[1]</sup>等。原子核壳模型是一种特殊的主对角占优矩阵, 因此人们期望找到一种针对原子核壳模型理论优化的本征值近似计算方法。

在原子核结构理论中, 人们往往更加关注低激发态能谱, 壳模型理论是考虑这一类问题的最基本的出发点。然而, 中重原子核壳模型的组态空间随着价核子数和单粒子轨道数的呈几何级数增加, 很多中重原子核的组态空间更是远远大于  $10^{10}$ , 哈密顿矩阵的对角化超出了当今的计算能力。人们基于物理考虑引入各种空间截断和经验的近似方法。例如, 配对近似理论<sup>[2-8]</sup>、角动量投影方法<sup>[9]</sup>、东京研究组的外推法<sup>[10]</sup>以及本征值经验公式方法<sup>[11-16]</sup>等。

近年我们根据哈密顿矩阵元分布的几何特征, 使用外推方法对壳模型的空间截断做了一系列的研究<sup>[17-20]</sup>, 然而对于这一方法的物理机制不是非常清楚。希望通过随机矩阵简化复杂的壳模型哈密顿量为外推方法的内在机制寻找一些有益的线索。本文主要讨论高斯正交系综<sup>[21]</sup>以及随机两体系综<sup>[22]</sup>下本征值的外推现象。

## 2 组态近似方法在高斯正交系综上的应用

由于高斯正交系综所有的矩阵元都是独立分布的随机数, 因此矩阵元的分布完全不存在任何几何图像。根据魏格纳半圆定理

$$\rho(x) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{4-x^2},$$

其中:  $x = E - \bar{E}/\sigma$ , 可以得到最小本征值为<sup>[14]</sup>

$$E_{\min} = \left[ 2 - \left( \frac{9}{16} \pi^2 \right)^{1/3} D^{-2/3} \right] \sigma. \quad (1)$$

由于这些高斯正交系综的非对角元的宽度为 1, 那么非对角元的宽度应当为  $\sqrt{2}$ , 因此有

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{ij} H_{ij}^2}{D} - \bar{H}_{ii}^2 = \frac{D^2}{D} - \left( \frac{\sqrt{2}D}{D} \right)^2 = D - 1. \quad (2)$$

由式(1)和(2), 可以得到最小本征值关于维数的关系:

$$E_{\min} = \left[ 2 - \left( \frac{9}{16} \pi^2 \right)^{1/3} D^{-2/3} \right] \sqrt{D-1} \approx -2\sqrt{D}. \quad (3)$$

图 1 展示了不同维数下, 高斯正交系综本征值在对角元由小到大排序后的外推关系, 即截断空间最低

收稿日期: 2013-02-01; 修改日期: 2013-04-04

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11225524, 11145005)

作者简介: 沈佳杰(1985-), 男, 上海人, 博士, 从事原子核结构及反应堆物理研究; E-mail: shenjiajie@sinap.ac.cn.

<http://www.npr.ac.cn>

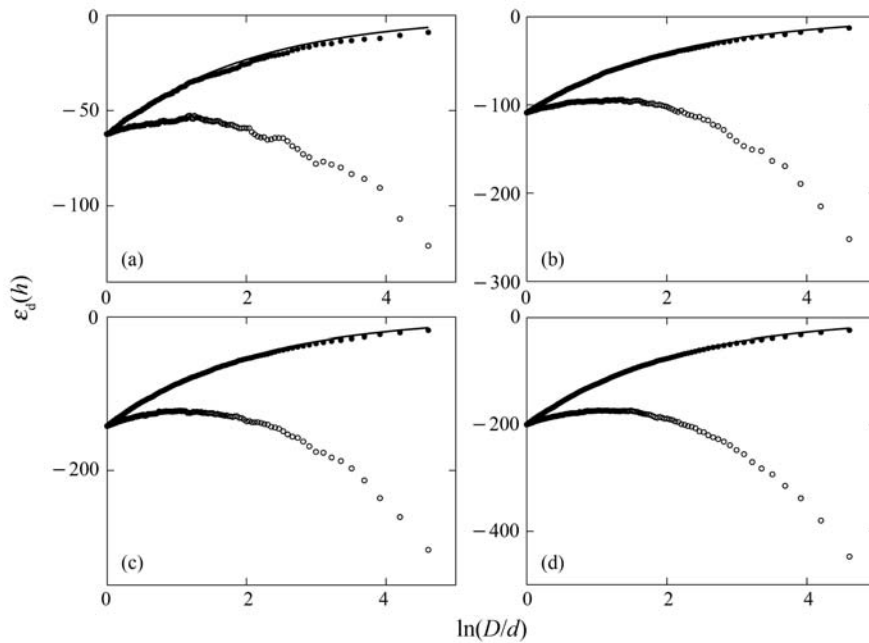


图 1 不同维数下, 高斯正交系综本征值在对角元排序后的外推关系

本征值  $\epsilon_d(h)$  与截断空间维数 ( $d$ ) 的关系, 其中未微扰的结果用 (●) 表示, 本征值二级微扰<sup>[19]</sup>以后的结果用 (○) 表示, 实线表示公式 (3)。其中, (a) 对应维数为 1000 的高斯正交系综矩阵; (b) 对应维数为 3000 的高斯正交系综矩阵; (c) 对应维数为 5000 的高斯正交系综矩阵; (d) 对应维数为 10000 的高斯正交系综矩阵。这些高斯正交系综的非对角元的宽度为 1。可

以发现高斯正交系综的本征值外推性质类似于二分之一次方的幂函数。

由于高斯正交系综矩阵并非主对角占优矩阵, 因此即使截断空间下主对角元并非高斯分布, 对结果影响也不大。如果在高斯正交系综矩阵的对角元乘一个系数  $\alpha$ , 人为地使随机矩阵变为主对角占优矩阵, 那么情况是否会改变呢? 图 2 给出了对角元乘以不同系

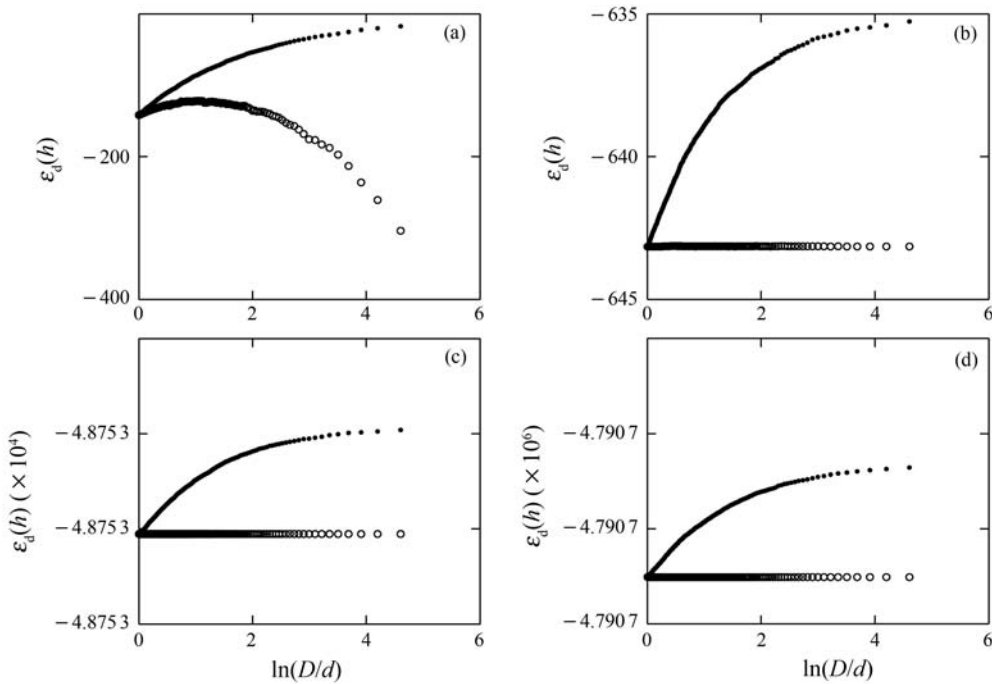


图 2 对角元乘以不同系数  $\alpha$  下, 高斯正交系综本征值在对角元排序后的外推关系

数  $\alpha$  下, 高斯正交系综 ( $D = 5000$ ) 本征值在对角元排序以后的外推关系, 未微扰的结果用 (●) 表示, 本征值二级微扰以后的结果用 (○) 表示。其中, (a) 对应  $\alpha = 1$ ; (b) 对应  $\alpha = 100$ ; (c) 对应  $\alpha = 10000$ ; (d) 对应  $\alpha = 1000000$ 。这些高斯正交系综的非对角元的宽度为 1。可以看到在没有使用微扰之前外推关系是不变的, 这是因为可以把随机矩阵看作是一个对角阵加上一个高斯正交系综矩阵, 但是本征值在经过微扰以后会立即趋于精确的最小本征值。这从一个侧面证明了结合微扰和外推的方法是非常适用于主对角占优矩阵的。

### 3 组态近似方法在随机两体系综上的应用

随机两体系综是随机两体相互作用下的原子核壳模型哈密顿量, 因此其结果相对于高斯正交系综会更接近于真实原子核。由于相互作用是随机的, 因此是一个检验外推方法是否依赖于相互作用及其程度的平台。我们发现, 外推曲线的平滑程度以及收敛速度

与两体矩阵元的分布宽度有一定的关系。图 3 给出了不同宽度的随机两体矩阵元下, 壳模型基矢按照哈密顿量对角元排序后进行组态截断后子空间的基态波函数与精确求解壳模型得到的基态波函数之间的重叠数, 未微扰的结果使用 (●) 表示, 波函数一级微扰以后的结果使用 (○) 表示。其中, (a), (a') 和 (a'') 表示  $^{28}\text{Si}$  在角动量为  $I^\pi = 0^+$  状态下, 相互作用取宽度为 1, 2, 5 的高斯随机数, 单粒子能级取 USDB 值; (b), (b') 和 (b'') 表示  $^{45}\text{Ti}$  在角动量为  $I^\pi = 0^+$  状态下, 相互作用取宽度为 1, 2, 5 的高斯随机数, 单粒子能级取 GXPF1 值的计算结果。宽度较小的两体矩阵元可以给出较快收敛的外推关系, 反之就不行。统计得到  $sd$  壳下 USDB 两体矩阵元分布宽度为 1.83, 而 Yukawa 两体矩阵元宽度为 2.1958;  $pf$  壳下 GXPF1 两体矩阵元分布宽度为 0.8996, 而 Gaussian 两体矩阵元分布宽度为 2.2307。因此 USDB 的两体矩阵元分布宽度确实小于 Yukawa 相的两体矩阵元分布宽度; GXPF1 的两体矩阵元分布宽度也小于 Gaussian 的两体矩阵元分布宽度。

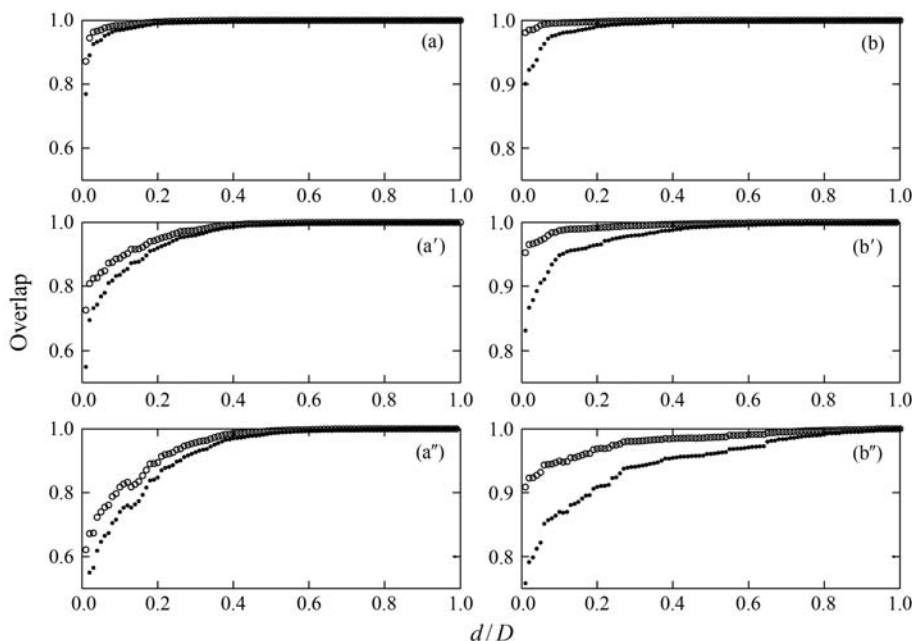


图 3 不同宽度的随机两体矩阵元下, 壳模型基矢按照哈密顿量对角元排序后进行组态截断后子空间的基态波函数与精确求解壳模型得到的基态波函数之间的重叠

那么是否只要矩阵元宽度较小, 就可以给出比较好的外推曲线呢? 我们将 USDB 两体矩阵元和 GXPF1 两体矩阵元分别随机化排列, 即随机调整两体矩阵元在两体矩阵中的位置, 这样可以得到分布与真实相

相互作用完全相同的随机相互作用。通过考察这种随机相互作用下波函数的重叠数与截断空间维数的关系, 间接获得组态近似方法和两体矩阵元的某些项的相关性。图 4 给出了随机相互作用下, 壳模型基矢按

照哈密顿量对角元排序后进行组态截断后子空间的基态波函数与精确求解壳模型得到的基态波函数之间的重叠, 未微扰的结果使用(●)表示, 波函数一级微扰以后的结果使用(o)表示。其中, (a)和(b)表示 $^{28}\text{Si}$ 在与USDB同分布的随机两体矩阵元下角动量为 $I^\pi = 0^+$ 和 $I^\pi = 2^+$ 状态下的计算结果; (c)和(d)表

示 $^{45}\text{Ti}$ 在与GXPF1同分布的随机两体矩阵元下角动量为 $I^\pi = 0^+$ 和 $I^\pi = 2^+$ 状态下的计算结果。我们发现波函数的重叠数很差, 甚至当截断空间较小时有可能接近于0。这说明了外推关系可能和某些特殊的两体矩阵元有关, 说明了真实相互作用更倾向于给出光滑且快速收敛的本征能量外推曲线。

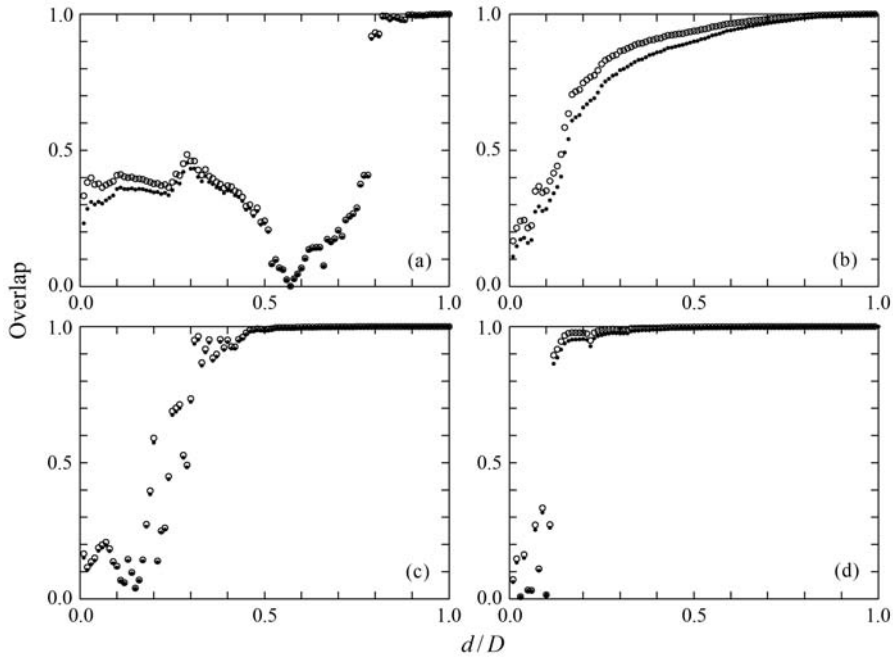


图 4 随机相互作用下, 壳模型基矢按照哈密顿量对角元排序后进行组态截断后子空间的基态波函数与精确求解壳模型得到的基态波函数之间的重叠

## 4 总结

综上所述, 我们研究了随机矩阵的组态近似方法。对于高斯正交系综, 根据魏格纳半圆定理, 可以推导出其本征值与截断空间维数的关系, 高斯正交系综的本征值的截断维数外推性质近似于二分之一次方幂函数。由于高斯正交系综的主对角元分布宽度只是非主对角元分布宽度开平方的 2 倍, 两者差别不大, 因此基矢排序对最后的结果影响不大。作为一个尝试, 人为地在高斯正交系综的主对角元乘一个系数使得高斯正交系综变为一种主对角占优矩阵。结果大为改善, 这表明了外推方法与微扰方法的结合非常适用于主对角占优的哈密顿量。本文对于随机两体系综, 比较了不同宽度的随机两体矩阵元下, 壳模型基矢按照哈密顿量对角元排序后进行组态截断后子空间的基态波函数与精确求解壳模型得到的基态波函数之间的重叠数。发现宽度较小的两体矩阵元可以给出较

好的外推关系, 宽度较大的两体矩阵元的外推关系则较差。通过比较 USDB 与 Yukawa 的两体矩阵元分布宽度以及 GXPF1 与 Gaussian 的两体矩阵元分布宽度, 发现好的真实相互作用的两体矩阵元分布宽度更小。最后考察了与 USDB 与 GXPF1 同分布的随机两体矩阵元下, 壳模型基矢按照哈密顿量对角元排序后进行组态截断后子空间的基态波函数与精确求解壳模型得到的基态波函数之间的重叠数。我们发现组态近似方法不仅和两体矩阵元的分布有关, 还和某些特殊的矩阵元有关。

**致谢** 感谢上海交通大学赵玉民教授和日本武藏大学有马朗人教授的指导。

## 参考文献(References):

- [1] PRESS W H, TEUKOLSKY S A, VETTERLING W T, *et al.* Numerical Recipes in C++: the Art of Scientific Computing[M]. Cam-

- bridge: Cambridge University Press, 2005.
- [2] LUO Y A, CHEN J Q. *Phys Rev C*, 1998, **58**: 589.
- [3] ZHAO Y M, YOSHINAGA N, YAMAJI S, *et al.* *Phys Rev C*, 2000, **62**: 014304.
- [4] ZHAO Y M, YAMAJI S, YOSHINAGA N, *et al.* *Phys Rev C*, 2000, **62**: 014315.
- [5] JIA L Y, ZHANG H, ZHAO Y M. *Phys Rev C*, 2007, **75**: 034307; *Phys Rev C*, 2007, **76**: 054305.
- [6] XU Z Y, LEI Y, ZHAO Y M, *et al.* *Phys Rev C*, 2009, **79**: 054315.
- [7] JIANG H, SHEN J J, ZHAO Y M, *et al.* *Jour Phys G*, 2011, **38**: 045103.
- [8] LEI Y, XU Z Y, ZHAO Y M, *et al.* *Phys Rev C*, 2010, **82**: 034303.
- [9] HARA K, SUN Y. *Int Jour Mod Phys E*, 1995, **4**: 637.
- [10] SHIMIZU I N, UTSUNO Y, MIZUSAKI T, *et al.* *Phys Rev C*, 2010, **82**: 061305.
- [11] VELÁZQUEZ V, ZUKER A P. *Phys Rev Lett*, 2002, **88**: 072502.
- [12] PAPENBROCK T, WEIDENMÜLLER H A. *Rev Mod Phys*, 2007, **79**: 997.
- [13] PAPENBROCK T, WEIDENMÜLLER H A. *Phys Rev Lett*, 2004, **93**: 132503.
- [14] SHEN J J, ZHAO Y M, ARIMA A, *et al.* *Phys Rev C*, 2008, **77**: 054312.
- [15] SHEN J J, ARIMA A, ZHAO Y M, *et al.* *Phys Rev C*, 2008, **78**: 044305.
- [16] YOSHINAGA N, ARIMA A, SHEN J J, *et al.* *Phys Rev C*, 2009, **79**: 017301.
- [17] SHEN J J, ZHAO Y M. *Sci China Ser G: Phys Mech Astron*, 2009, **52**: 1477.
- [18] SHEN J J, ZHAO Y M, ARIMA A. *Phys Rev C*, 2010, **82**: 014309.
- [19] SHEN J J, ZHAO Y M, ARIMA A, *et al.* *Phys Rev C*, 2011, **83**: 044322.
- [20] SHEN J J, ZHAO Y M, ARIMA A. *Phys Rev C*, 2012, **85**: 064325.
- [21] WIGNER E P. *SIAM Rev*, 1966, **9**: 1.
- [22] MON K K, FRENCH J B. *Ann Phys*, 1975, **95**: 90.

## Property of Extrapolation on Eigenvalues of Random Matrices

SHEN Jiajie<sup>1)</sup>

(*Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China*)

**Abstract:** Although the extrapolation method of diagonalizing the nuclear shell model Hamiltonian is successful, its foundation has not yet been understood very well. In this paper, we study this approach by using random matrices with the focus on gaussian ensemble and two-body random ensemble. We derive the formula of the extrapolation method of diagonalizing the matrices of Gaussian orthogonal ensemble, and discuss the robustness of the extrapolation property by two-body random ensemble. We point out that the extrapolation method of diagonalizing the shell model Hamiltonian works better with the realistic interaction than other interactions.

**Key words:** Gaussian orthogonal ensemble; two-body random ensemble; eigenvalue; extrapolation method

**Received date:** 1 Feb. 2013; **Revised date:** 4 Apr. 2013

**Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(11225524, 11145005)

1) E-mail: shenjiajie@sinap.ac.cn

<http://www.npr.ac.cn>