

ЧИСЛЕННАЯ ДИАГОНАЛИЗАЦИЯ ГАМИЛЬТониАНА В МОДЕЛИ НИЛЬССОНА С ПОМОЩЬЮ ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА

А.Н.Водин, Л.П.Корда, В.Ю.Корда

*ННЦ “Харьковский физико-технический институт”, Харьков, Ук-
раина*

Изменчивость формы атомных ядер - важное свойство ядерной материи. Установлено, что большинство ядер деформированы как в основном, так и в возбужденных состояниях. Исследования влияния деформации ядер в различных состояниях на наблюдаемые величины постоянно находятся в центре внимания [1].

Одним из наиболее простых, но физически содержательных подходов к систематизации уровней энергии деформированных ядер является модель Нильссона, в которой нуклоны находятся в самосогласованном поле, описываемом осцилляторным потенциалом с осевой симметрией.

Ключевой момент в расчетах одночастичных состояний в этой модели - диагонализация матрицы гамильтониана в базисе одночастичных волновых функций сферически симметричного осцилляторного потенциала.

Полное решение задачи на собственные функции и собственные значения эрмитовой матрицы может быть получено одним из наиболее развитых и эффективных методов - методом Якоби (плоских вращений). Суть метода состоит в последовательном преобразовании исходной матрицы

$H = H_0$ к более простому виду путем умножения ее на матрицу плоского вращения U . В результате порождается последовательность H_0, H_1, H_2, \dots , в которой $H_k = U_k H_{k-1} U_k^{-1}$, а U_k выбирается такой, чтобы матрица H_k не содержала максимальный по модулю недиагональный элемент матрицы H_{k-1} . Если $H_k = \left\| h_{ij}^{(k)} \right\|$, $\left| h_{pq}^{(k-1)} \right| = \max_{i \neq j} \left| h_{ij}^{(k-1)} \right|$, $U_k = \left\| u_{ij}^{(k)} \right\|$, то для вещественной матрицы H имеем

$$u_{pp}^{(k)} = u_{qq}^{(k)} = \cos \varphi, \quad u_{pq}^{(k)} = -u_{qp}^{(k)} = \sin \varphi,$$

$$\operatorname{tg} 2\varphi = \frac{2h_{pq}^{(k-1)}}{h_{pp}^{(k-1)} - h_{qq}^{(k-1)}}, \quad |\varphi| \leq \pi / 4. \quad (1)$$

Последовательность матриц H_k асимптотически сходится к диагональной. При этом диагональные элементы матрицы H_k оказываются приближенными собственными значениями H , а строки матрицы $U^k = U_1 U_2 \dots U_k$ - приближенными собственными векторами. Основной процедурой, требующей много машинного времени является операция поиска наибольшего по модулю внедиагонального элемента диагонализуемой матрицы. Поэтому на практике прибегают к различным методам ускорения или оптимизации этого процесса.

С другой стороны, полное решение задачи на собственные функции и собственные значения эрмитовской матрицы обеспечивается с помощью унитарного преобразования, описывающего n -мерный поворот (n -размерность матрицы), который, используя обобщенные углы Эйлера [2], можно представить в виде:

$$g = g^{(n-1)} \dots g^{(1)}, \quad g^{(k)} = g_1(\theta_1^k) \dots g_k(\theta_k^k),$$

$$g_j(\theta_j^k) \Rightarrow \begin{cases} x_j' = x_j \cdot \cos(\theta_j^k) + x_{j+1} \cdot \sin(\theta_j^k) \\ x_{j+1}' = -x_j \cdot \sin(\theta_j^k) + x_{j+1} \cdot \cos(\theta_j^k) \end{cases}, \quad (2)$$

$$1 \leq k \leq n-1, \quad 1 \leq j \leq k, \quad 0 \leq \theta_1^1, \theta_1^2, \dots < 2\pi, \quad 0 \leq \theta_2^1, \theta_2^2, \dots, \theta_3^1, \theta_3^2, \dots < \pi. \quad (3)$$

В такой постановке задачу можно рассматривать как проблему поиска оптимального набора $n(n-1)/2$ величин углов Эйлера, минимизирующих сумму абсолютных значений недиагональных элементов диагонализуемой матрицы в повернутом базисе. Для решения этой проблемы мы применили генетический алгоритм [3], варьирующий оптимизируемые параметры независимо и параллельно и обладающий экспоненциальной сходимостью.

Генетические алгоритмы уже были успешно применены для решения таких различных и сложных проблем как интегрирование дифференциальных уравнений [4], задача Томсона о нахождении конфигурации минимальной энергии N точечных зарядов на единичной сфере [5], оптимизация термодинамического анализа фазовых переходов в ферроэлектриках [6], построения волновых функций легких экзотических ядер [7,8], оптимизации параметров зависящего от энергии оптического потенциала в упругом рассеянии тяжелых ионов ядрами [9], анализ спектров квантовых систем [10], оптимизация кинематики ядерно-физических экспериментов [11], и т. д.

Схема применения генетического алгоритма проста. Каждый из оптимизируемых углов Эйлера представляется двоичным кодом. Популяция состоит из фиксированного числа наборов этих параметров. В начальный момент времени все параметры задаются случайным образом в указанных

интервалах (3). Затем для каждого набора вычисляется матрица унитарного преобразования (2), которое применяется к диагонализуемой матрице и определяется сумма абсолютных величин внедиагональных элементов преобразованной матрицы. Далее из популяции выбираются два набора углов. Выбор осуществляется случайно: чем меньше сумма модулей величин недиагональных элементов, тем больше вероятность быть выбранным. Избранные наборы копируются, при этом с некоторой вероятностью двоичные разряды их кодов инвертируются (мутация), после чего происходит обмен связными последовательностями двоичных разрядов между наборами (кроссовер). Для полученных таким образом наборов углов вычисляется сумма модулей недиагональных элементов преобразованной исходной матрицы. Если величина данной суммы оказывается меньше, чем наибольшая величина этой суммы в популяции, то данный набор замещает набор, соответствующий наибольшей сумме в популяции. Следующая пара наборов выбирается таким же образом и процесс продолжается, пока не будет достигнута требуемая точность диагонализации. При этом, снова диагональные элементы матрицы H_k оказываются приближенными собственными значениями H , а строки матрицы g - приближенными собственными векторами.

Сравнительный анализ разработанного нами подхода и традиционно применяемых методов (например, Якоби) показывает, что чем выше размерность диагонализуемой матрицы, тем более эффективным оказывается генетический подход.

2. Н.Я. Виленкин. Специальные функции и теория представлений групп. М.: Наука. Гл. Ред. Физ.-мат. лит., 1991.-576с.
3. J.H. Holland. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press, Ann Arbor, 1975.
4. Diver D. // *J. of Phys. A: Math. and Gen.*- 1993.- V.26.- P. 3503- 3513.
5. Morris J. R., Deaven D. M., Ho K. M. // *Phys. Rev. B.*- 1996.- V.53. No4.- P. R1740- R1743.
6. Berezovsky S. V., Korda V. Yu, Klepikov V. F. // *Phys. Rev. B.*- 2001.- V.64. No6.- P. 3.1- 3.7.
7. Winkler C., Hofmann H. M. // *Phys. Rev. C.*- 1997.- V.55. No2.- P. 684- 687.
8. Winkler C., Hofmann H. M. // *Phys. Rev. C.*- 1997.- V.55. No2.- P. 688- 698.
9. Michaelian K. // *Revista Mexicana de Fisica.*- 1996.- V.42 (suppl.1).- P. 203- 215.
10. Korda V. Yu. // *Вісник Харківського національного університету*, -2001. -№510. -С. 41-43.
11. Ireland D. G. // *J. of Phys. G: Nuclear and Particle Physics.*- 2000.- V.26, No. 2.- P.157-166.

NUMERICAL DIAGONALIZATION OF NILSSON-MODEL
HAMILTONIAN WITH THE USE OF A GENETIC ALGORITHM

A.N. Vodin¹, L.P. Korda¹, V.Yu. Korda²

¹*NSC “Kharkov Institute of Physics and Technology”, Kharkov, Ukraine*

*²STC of Electrophysics, National Academy of Sciences of Ukraine, Kharkov,
Ukraine*

The new approach based on a genetic algorithm is presented to diagonalize the Hamiltonian matrix of the Nilsson-model for the deformed axially symmetric nucleus. The unitary transformation which diagonalizes the Hermitian matrix is determined by the multi-dimensional Euler angles. The algorithm developed searches for the set of these angles minimizing the sum of non-diagonal elements of the transformed Hermitian matrix. The tests witness that the larger the matrix size the more effective the genetic approach becomes comparing to the traditional diagonalization methods.