



**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁRSKA PRÁCA

Samuel Mičo

Analýza zvyškových korelácií medzi jadrovými hmotnosťami po použití Garvey-Kelsonových relácií

Ústav časticovej a jadrovej fyziky

Vedúci bakalárskej práce: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D.

Študijný program: Fyzika

Študijný odbor: FOF

Praha 2021

Prehlasujem, že som túto bakalársku prácu vypracoval samostatne a výhradne s použitím citovaných prameňov, literatúry a ďalších odborných zdrojov. Táto práca nebola využitá k získaniu iného alebo rovnakého titulu.

Beriem na vedomie, že sa na moju prácu vzťahujú práva a povinnosti vyplývajúce zo zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platnom znení, najmä skutočnosť, že Univerzita Karlova má právo na uzavretie licenčnej zmluvy o použití tejto práce ako školského diela podľa §60 odst. 1 autorského zákona.

V dňa

Podpis autora

Pod'akovanie.

Rád by som pod'akoval za odborné vedenie mojej bakalárskej práce s osobným a trpezlivým prístupom môjmu vedúcemu práce Mgr. Pavlovi Stránskemu, Ph.D.

Ďalej by som rád pod'akoval Martine Vitkovičovej za neoceniteľné rady a trpezlivosť pri programovaní a za neustálu podporu, mojím rodičom a bratovi za ich povzbudivé slová a v neposlednom rade môjmu dedkovi za to, že ma uviedol na túto zázračnú cestu fyzikálneho poznania.

Názov práce: Analýza zvyškových korelácií medzi jadrovými hmotnosťami po použití Garvey-Kelsonových relácií

Autor: Samuel Mičo

Katedra: Ústav časticovej a jadrovej fyziky

Vedúci bakalárskej práce: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D., Ústav časticovej a jadrovej fyziky

Abstrakt: Táto práca sa venuje analýze zvyškových korelácií medzi odchýlkami jadrových hmotností od Garvey-Kelsonových relácií, čo sú lokálne algebraické vzťahy dávajúce do súvislosti hmotnosti susedných nuklidov. Vlastnosti korelačnej matice určené z odchýlok od Garvey-Kelsonových relácií a z nej vypočítané spektrálne korelácie sú v súlade s už skôr formulovanou hypotézou, že odchýlky sa dajú do veľkej miery chápať ako štatisticky nezávislé fluktuácie. Preto sa hmotnosti nuklidov nedajú popísať globálnou funkciou protónového a neutrónového čísla s presnosťou vyššou ako je veľkosť odchýlok, t.j. s presnosťou lepšou než je rádovo 100 keV. Analýza hlavných komponentov ukazuje, že najväčšie zvyškové korelácie sa vyskytujú (i) v oblasti magických čísel a (ii) medzi silno deformovanými ťažkými jadrami.

Kľúčové slová: Garvey-Kelsonove relácie, jadrové hmotnosti, korelácie

Title: Analysis of residual correlations in nuclear masses after application of Garvey-Kelson relations

Author: Samuel Mičo

Department: Institute of Particle and Nuclear Physics

Supervisor: Mgr. Pavel Stránský, Ph.D., Institute of Particle and Nuclear Physics

Abstract: This thesis is focused on the analysis of residual correlations between deviations of nuclear masses from Garvey-Kelson relations, which are local algebraic relations connecting masses of neighbouring nuclei. Properties of the correlation matrix determined by the deviations from Garvey-Kelson relations and by the calculated spectral correlations are consistent with the hypothesis formulated beforehand, that it is possible to understand the deviations as statistically independent fluctuations in a good agreement. Therefore, the masses of nuclei cannot be described by a global function of the number of protons and neutrons with an accuracy greater than the size of the deviations, i.e. with an accuracy better than an order of 100 keV. Principal component analysis shows that the largest residual correlations are located (i) in the area of magic numbers and (ii) between strongly deformed heavy nuclei.

Keywords: Garvey-Kelson relations, nuclear masses, correlations

Obsah

Úvod	2
1 Teória	4
1.1 Garvey-Kelsonove relácie	4
1.1.1 Motivácia k vytvoreniu Garvey-Kelsonových relácií	4
1.1.2 Odvodenie Garvey-Kelsonových relácií	6
1.1.3 Rozšírenie základných Garvey-Kelsonových relácií	7
1.1.4 Odchýlky od Garvey-Kelsonových relácií	9
1.2 Korelačná matica	9
1.3 Autokorelačná matica	10
1.4 Analýza hlavných komponentov (PCA)	10
1.5 Teória kvantového chaosu	12
2 Spracovanie dát a diskusia výsledkov	15
2.1 Počítanie a diskusia GK relácií	15
2.2 Autokorelácia	16
2.2.1 Grafická analýza a diskusia	17
2.3 Korelácia	19
2.3.1 Korelačná matica	19
2.3.2 Grafická analýza a diskusia	24
2.4 Analýza hlavných komponentov (PCA)	27
2.4.1 Grafická analýza a diskusia	29
2.5 Spektrálna analýza korelačnej matice	32
Záver	45
Literatúra	46

Úvod

Poznávanie a vysvetľovanie neznámych a záhadných javov v prírode bolo hnacou silou vedy od jej počiatku. Či už to bolo poznanie toho ako vzniká svetlo v slnku, alebo ako získavať energiu z jadrových procesov. Či sú to javy na škálach planét, alebo na mikroskopickej úrovni jadier atómov.

Táto práca sa zameriava na jeden z mikroskopických objektov, ktorý je súčasťou základných stavebných blokov reality, atómov. V atómovom centre sa nachádza atómové jadro. Správny popis jadra je esenciálny k pochopeniu mnohých javov, a to nie len na mikroskopickej úrovni. Ak chceme popísať jadro správne, nemôže nám chýbať jeho fundamentálna vlastnosť, ktorou je hmotnosť. Presné popísanie hmotnosti jadra je dôležité napríklad v jadrovej astrofyzike. Buď k pochopeniu jadrových procesov vo vnútri hviezd, alebo k popísaniu relatívnych početností izotopov vo vesmíre.

Hmotnosti jadier atómov sa popisujú globálne alebo lokálne. Globálnym popisom môže byť napríklad popis jadra ako nabitej kvapky, na ktorom je založený tzv. *kvapkový model* jadra. Taktiež známym globálnym modelom jadra je tzv. *orbitálový model* jadra, ktorý je založený na analógii k orbitálovému modelu atómu, kde sú jednotlivé častice umiestnené na vrstvách. Dnešné najpresnejšie globálne modely jadra vychádzajú z týchto, alebo z komplexnejších modelov a ďalej ich rozvíjajú podľa zákonitostí, ktoré platia na kvantovej úrovni. Tieto modely následne dokážu predpovedať hmotnosti jadier zo znalostí ich protónových a neutrónových čísiel.

Na druhej strane sa dá popísať hmotnosť jadra aj lokálne. Znamená to využitie znalosti susedných hmotností jadier. Na tomto princípe sú založené tzv. *Garvey-Kelsonove relácie* [1, 2]. Sú vlastne algoritmom, ako predpovedať neznámu hmotnosť jadra s použitím známych hmotností jadier s ním susediacich. Garvey-Kelsonove relácie predstavujú jednoduché vzťahy medzi blízkymi jadrami, ktoré vychádzajú z jediného predpokladu, že sa poloha jednočasticových energií pohybujúcich sa v strednom poli jadra príliš nezmení pri zmene protónového alebo neutrónového čísla.

K tomu, aby sme mohli presne predpovedať hmotnosti jadier potrebujeme vedieť, aké veľké odchýlky od už experimentálne nameraných hmotností bude daný model vykazovať. Teda nás zaujíma aká je presnosť danej predikcie. Tieto presnosti boli podrobne analyzované pre niekoľko globálnych modelov jadier [3], ale z širšia boli aj porovnávané presnosti niekoľkých globálnych modelov a Garvey-Kelsonových relácií [4, 5]. Dokonca bolo ukázané, že dosahujú rádovo podobné presnosti [5].

Taktiež bolo naznačené, že korelácie medzi odchýlkami od Garvey-Kelsonových relácií sú veľmi slabé a vykazujú vlastnosti šumu. Pre niekoľko globálnych modelov bolo ukázané, že korelácie stredných kvadratických odchýlok týchto modelov

môžu byť asociované s chaotickým pohybom v kvantovej mechanike [3].

V tejto práci sa budeme podrobnejšie zameriavať na analýzu zvyškových korelácií po použití Garvey-Kelsonových relácií, teda sa nebudeme venovať globálnym modelom, keďže tie už boli študované [3]. Budeme teda počítať odchýlky od lokálneho modelu jadrových hmotností, od Garvey-Kelsonových relácií a následne ich analyzovať.

Pri analýze budeme používať podobné metódy ako v [3], ale taktiež odlišné štatistické metódy ako sú autokorelačné matice, korelačné matice a analýza hlavných komponentov. Zvlášť budeme analyzovať aj spektrálne korelácie, ktoré sa používajú v charakterizácii kvantového chaotického systému.

Časť 1

Teória

1.1 Garvey-Kelsonove relácie

Jadrá atómov, a špeciálne ich hmotnosti, popisujeme rôznymi metódami. Hmotnostná formula je vzťah, ktorý dokáže predpovedať hmotnosť jadra, pričom predpokladáme znalosť iba počtu protónov a neutrónov. Na popísanie jadrových hmotností sa dá pozeráť buď ako na celú jadrovú tabuľku, čo robí napríklad práve najznámejší kvapkový model jadra (Bethe-Weizsäckerova hmotnostná formula), alebo aj na jednotlivé jadrá a ich najbližších susedov, kde sa pozeráme na vzťahy len medzi niekoľkými susednými jadrami. Práve tento druhý prístup využívajú tzv. Garvey-Kelsonove relácie. Sú pomenované po dvoch autoroch článku z roku 1966 [1], v ktorom Garvey a Kelson predstavujú vtedy nové vzťahy medzi jadrovými hmotnosťami. Pri tomto druhom prístupe ale požadujeme okrem znalosti počtu protónov a neutrónov aj znalosť hmotností okolitých jadier.

Jadrové modely sú zväčša celkom zložitými súbormi vzťahov. Garvey-Kelsonove relácie, popisujúce jadro hoci iba lokálne, sú veľmi jednoduché, ale napriek tomu užitočné.

Hmotnosť jadra (N, Z) , ktoré má počet neutrónov N a počet protónov Z budeme značiť $M(N, Z)$. Potom v najjednoduchšej podobe sú Garvey-Kelsonove relácie popísané vzťahom, ktorý Garvey s Kelsonom odvodili v [1] ako:

$$\begin{aligned} M(N + 2, Z - 2) - M(N, Z) + M(N, Z - 1) - M(N + 1, Z - 2) \\ + M(N + 1, Z) - M(N + 2, Z - 1) = 0. \end{aligned} \quad (1.1)$$

Relácie (1.1) určite úplne nenahradia hmotnostnú formulu, pretože nedokážu predpovedať hmotnosti "z ničoho". Ich užitočnosť ale spočíva v jednoduchosti a väčšej presnosti robiť predpovede o hmotnostiach na základe znalosti hmotností v okolí jadra, ktorého hmotnosť chceme určiť.

1.1.1 Motivácia k vytvoreniu Garvey-Kelsonových relácií

Jedným z cieľov jadrovej fyziky bolo, a aj stále je, získať čo najpresnejší popis jadra. Na dostatočný popis jadra potrebujeme znalosť väzobných energií a teda hmotností jadier, keďže hmotnosť jadra v základnom stave je základná veličina popisujúca atómové jadro. Preto bola vynaložená veľká snaha získať formuly, ktoré by nám hmotnosti všetkých jadier čo najpresnejšie predpovedali. V súčasnej

dobe sú známe rôzne formuly vychádzajúce z odlišných teoretických predpokladov: od semi-empirickej, ktorá nemá veľa parametrov, k fenomenologickým variantám, ktoré používajú veľké množstvá parametrov. Avšak z fundamentálneho pohľadu tieto pokusy nedosiahli veľké kvantitatívne úspechy, pretože exaktná teória pre takýto konečný problém mnohých telies je obtiažne riešiteľná.

Základným rozdelením techník na výpočet neznámych hmotností jadier by mohlo byť na globálne a lokálne techniky. Globálne modely obvykle využívajú znalosti už zmeraných hmotností k nafitovaniu parametrov (ktorých sú často desiatky) a potom predpovedajú neznáme jadrá. Lokálne vzťahy sa snažia predpovedať nové hmotnosti na základe známych hmotností jadier v blízkom okolí. Najjednoduchším globálnym pohľadom na atómové jadro je určite *Kvapkový model jadra* a s ním spojená semi-empirická Bethe–Weizsäckerova formula. Kvapkový model ale oproti dnešným modernejším modelom zaostáva najmä svojou presnosťou, čo je spôsobené tým, že neberie dostatočne do úvahy kvantovo-mechanické efekty [6]. Tento model bol však postupne rozširovaný do tvaru, ktorý obstojí aj medzi úplne mikroskopickými modelmi. Medzi aktuálne najpresnejšie globálne modely patria:

1. *FRDM* (angl.: finite range droplet model), ktorý vychádza z kvapkového modelu a berie do úvahy mikroskopické orbitálové korekcie (angl.: microscopic shell corrections) [5]
2. Modely založené na *Hartree-Fock-Bogoliubovej* (HFB) teórii [5, 3]
3. Modely vychádzajúce z orbitálového modelu jadra. Napríklad *Duflo-Zucker* [5, 3]

Ukazuje sa, že všetky spomínané globálne modely vykazujú podobnú presnosť a to v ráde 400-700 keV.

Detailne nebudeme rozoberať tieto modely, keďže nie sú predmetom tejto bakalárskej práce a využívajú veľmi pokročilé teoretické znalosti presahujúce bakalárske štúdium fyziky. Sú tu ale spomenuté kvôli motivácii k zavedeniu lokálnej techniky s podobnou presnosťou: Garvey-Kelsonových relácií.

Lokálna technika určujúca jadrové hmotnosti využívajúca vzťahy, ktoré existujú medzi jadrovými hmotnosťami je napríklad práve tá, ktorú používajú Garvey s Kelsonom pri tvorbe Garvey-Kelsonových relácií. Ďalej taktiež uvidíme, že táto technika dosahuje podobnú presnosť ako dnešné globálne fity.

Ako sa spomína v článku od Garveyho et al. z roku 1969 [2], pracovať na podobných vzťahoch medzi jadrami začal už Jänecke (1965) a raná práca Garvey a Kelsona z roku 1966 [1] bola rozšírením a zovšeobecnením Jäneckovej práce. Súbor hmotnostných relácií od Garveyho a Kelsona je všeobecnejším, presnejším a lepšie použiteľným, než ten Jäneckeho.

Ukázalo sa, že vytvorené Garvey-Kelsonove hmotnostné relácie sú konzistentné s viacerými dobre známymi modelmi nezávislých častíc (angl.: independent-particle model of nucleus) a teda nevytvárajú nový obraz o jadre. Ich hlavnou hodnotou je, že nevyžadujú veľa predpokladov o štruktúre jadra a používajú už známe experimentálne namerané hmotnosti k predpovediam ešte nameraných hmotností. K praktickému použitiu GK (Garvey-Kelsonových) relácií je znalosť týchto hmotností, ktoré sú ďaleko od údolia stability (neutrónovo bohatá oblasť),

veľmi dôležitá. Napríklad k pochopeniu jadrovej syntézy typu r (angl.: r -process) alebo jadrového štiepenia.

1.1.2 Odvodenie Garvey-Kelsonových relácií

Na odvodenie GK relácií použijeme prístup, ktorý podrobne opisujú Garvey et al. v [2]. Jadrové systémy sú všeobecne určené Hamiltoniánom, ktorý popisuje fundamentálne interakcie medzi nukleónmi. Pomocou tohoto Hamiltoniánu je možné vypočítať metódou *ab initio* (z prvých princípov) spektrum iba pre najľahšie jadrá. Pre ťažšie jadrá je *ab initio* prístup zatiaľ nedostupný kvôli veľkej výpočtovej náročnosti, ktorá rastie exponenciálne s počtom nukleónov. Sú ale dostupné rôzne jadrové modely založené napríklad na teórii stredného poľa.

Základným východiskom pre GK relácie je pohľad na jadro ako systém nukleónov. Ak zoberieme do úvahy obraz nezávislej častice, nukleóny sa pohybujú v konzistentnom jednočasticovom poli, v tzv. *strednom poli*. Potom spomínaným základným východiskom GK relácii je, že sa stredné pole, teda jednočasticové hladiny a reziduálne interakcie medzi nukleónmi v týchto hladinách, mení pomaly s počtom nukleónov [1].

K odvodeniu vzťahov medzi susednými jadrami budeme pristupovať konštrukciou rovnice rozdielov medzi jadrami:

$$\sum_{i=1}^{\alpha} C_i M(N_i, Z_i) = 0, \quad (1.2)$$

kde C_i je koeficient, ktorý obmedzíme vzťahom $|C_i| = 1$. Z (1.2) vidíme, že požadujeme aby súčet nejakej podmnožiny jadrových hmotností bol približne nulový. Toho dosiahneme správnou voľbou lineárnej kombinácie, aby sa všetky interakcie medzi nukleónmi do prvého rádu vyrušili. Aby sme toto docielili, musí sa teda vyrušiť aspoň počet neutrón-neutrónových ($n-n$), protón-protónových ($p-p$) a neutrón-protónových ($n-p$) interakcií. Počet $n-n$ a $p-p$ interakcií sa vyruší z požiadavky, že jeden daný počet protónov alebo neutrónov sa objaví v dvoch rôznych jadrách v rovnici (1.2) s vhodným znamienkom. Napríklad: $C_i Z_i = -C_j Z_j$ a podobne. Táto podmienka nám implikuje obmedzenie, že α musí byť párne číslo. Netriviálne rovnice získame len pre $\alpha \geq 6$. Ukážme si rovnicu pre $\alpha = 6$:

$$M(N_1, Z_1) + M(N_2, Z_2) + M(N_3, Z_3) - M(N_3, Z_1) - M(N_1, Z_2) - M(N_2, Z_3) \cong 0. \quad (1.3)$$

Je zjavné, že sa vo výraze (1.3) vyruší počet $n-n$ a $p-p$ interakcií. Ďalej vieme, že počet interakcií $n-p$ bude NZ , a teda potrebujeme pridať k podmienke (1.2) aj podmienku:

$$\sum_{i=1}^{\alpha} C_i N_i Z_i = 0. \quad (1.4)$$

Potom sa vďaka podmienke (1.4) vyruší aj počet $n-p$ interakcií.

Definujme si ešte $\Delta Z_i = Z_1 - Z_i$ a $\Delta N_i = N_2 - N_i$. Z doterajších podmienok dostaneme rovnosť: $\Delta Z_2 \Delta N_1 = \Delta Z_3 \Delta N_3$

Triviálne identity dostaneme pre $\Delta Z_2 = \Delta Z_3$ a $\Delta N_1 = \Delta N_3$. Berieme teda $\Delta Z_2 \neq \Delta Z_3$ a $\Delta N_1 \neq \Delta N_3$. Preto bude v tomto prípade najjednoduchšou voľbou na dosiahnutie rovnosti ak sa súčiny $\Delta Z_2 \Delta N_1$ a $\Delta Z_3 \Delta N_3$ budú rovnať ± 1 . A tak dostávame pre voľbu $\Delta Z_2 \Delta N_1 = \Delta Z_3 \Delta N_3 = -1$ rovnicu, ktorá bola napísaná Garveym a Kelsonom už v roku 1966 [1]:

$$M(N+2, Z-2) - M(N, Z) + M(N, Z-1) - M(N+1, Z-2) + M(N+1, Z) - M(N+2, Z-1) = 0. \quad (1.5)$$

Voľba $\Delta Z_2 \Delta N_1 = \Delta Z_3 \Delta N_3 = 1$ zas na druhej strane dáva:

$$M(N+2, Z) - M(N, Z-2) + M(N+1, Z-2) - M(N+2, Z-1) + M(N, Z-1) - M(N+1, Z) = 0. \quad (1.6)$$

Tieto dve relácie pozostávajúce z troch párov rozdielov hmotností sú najčastejšie používanými a boli odvodené v [2]. Relácia (1.5) by mala byť používaná len v situácii, kedy $N \geq Z$, aby sme sa vyhli prekročeniu línie kedy $N = Z$. Toto požadujeme z dôvodu, že pri prekročení tejto línie dochádza k nesprávnemu vyrušeniu závislosti izospinu na reziduálnych interakciách. Taktiež požadujeme aby v prípade kedy $N = Z$, N nebolo nepárne. Pre také jadrá nám totiž Wignerov efekt bráni v presnosti lepšej ako 1 MeV [5].

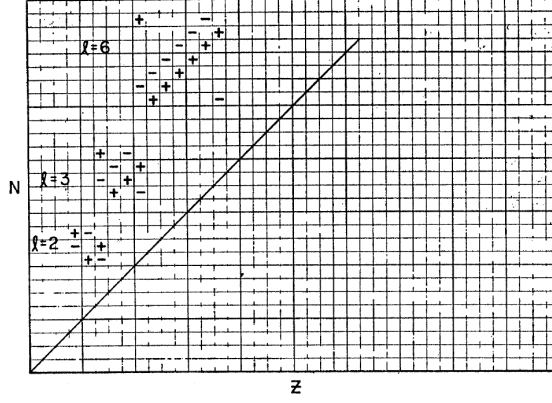
1.1.3 Rozšírenie základných Garvey-Kelsonových relácií

Pri odvodzovaní základných Garvey-Kelsonových relácií (1.5) a (1.6) sa ukázalo, že minimálny počet členov v rovnici je $\alpha = 6$. S takýmto počtom členov sme odvodili aj rovnice (1.5) a (1.6). Garvey a Kelson ale ukázali už v [1], že existuje rekurentný vzťah generujúci nové relácie, ktoré obsahujú viacero členov $M(N, Z)$, resp. rozsah N a Z je väčší ako v rovnici (1.5) alebo (1.6). Toto spomínajú aj v [2] a pracujú hlavne so všeobecnejším vzťahom:

$$M(N+l, Z-l) - M(N, Z) + \sum_{i=1}^l [M(N-1+i, Z-l+i) - M(N+i, Z-l-1+i)] = 0, \quad (1.7)$$

kde sú už ale všetky jadrá obmedzené na oblasť $N \geq Z$ a žiadna hmotnosť nemôže byť z jadra (N, Z) , kde N aj Z by boli nepárne s izospinom $T_3 = 0$ (T_3 je tretia zložka izospinu). Pre dané hodnoty l dostaneme rôzne Garvey-Kelsonove relácie. Toto môžeme vidieť na Obr. 1.1, kde pre $l = 2$ dostávame základné Garvey-Kelsonove relácie v tvare (1.5).

Na tejto idei ďalej budovali v rokoch 2007 a 2008 J.Barea et al. v článkoch [4] a [5]. Toto rozšírenie spočíva najmä v konštrukcii najrozsiahlejších možných Garvey-Kelsonových relácií. Dospejú k nim algoritmom, ktorý opisujú v [4], kde pristupujú postupnou konštrukciou všetkých možných Garvey-Kelsonových relácií pre jedno dané jadro (N, Z) . Prichádzajú k tomu, že každá GK relácia môže byť aplikovaná najviac 6-krát menením pozície (N, Z) okolo 6 korelovaných jadier. Teda sa dá použiť maximum 12 GK relácií korelujúcich maximálne 21 jadier. Počet odhadov (GK relácií) použitých na vytvorenie novej relácie budeme označovať v súlade s článkami [4] a [5], a teda ako n .



Obr. 1.1: Graf tvaru Garvey-Kelsonových relácií z rovnice (1.7) pre $l = 2, 3$, a 6 . Vhodné znamienka k príslušným hmotnostiam sú graficky znázornené na príslušných miestach. Prevzaté z [2].

V článku [5] autori ukazujú na základe vypočítaných stredných kvadratických odchýlok, ktoré budeme značiť RMSD (Root-mean-square deviation) a sú vypísané v Tab. 1.1, že predpovede hmotností učené GK reláciami sú presnejšie s rastúcim počtom odhadov, teda s rastúcim n . V Tab. 1.1 toto vidíme ako menšie hodnoty RMSD pre väčšie n . Konkrétne to vyzerá tak, že najpresnejšie odhady hmotností jadier dostaneme z GK relácie, ktorá je vytvorená z 12 odhadov, teda $n = 12$. Tvar tejto GK relácie (z [5]), ktorá obsahuje 21 rôznych hmotností jadier je nasledovný:

$$\begin{aligned}
& M(N - 2, Z + 2) + M(N - 2, Z - 2) \\
& + M(N + 2, Z + 2) + M(N + 2, Z - 2) \\
& - 2M(N + 2, Z - 1) - 2M(N + 2, Z + 1) \\
& - 2M(N - 2, Z - 1) - 2M(N - 2, Z + 1) \\
& - 2M(N - 1, Z - 2) - 2M(N + 1, Z - 2) \\
& - 2M(N - 1, Z + 2) - 2M(N + 1, Z + 2) \\
& + 2M(N + 2, Z) + 2M(N - 2, Z) \\
& + 2M(N, Z - 2) + 2M(N, Z + 2) \\
& + 4M(N + 1, Z) + 4M(N - 1, Z) \\
& + 4M(N, Z - 1) + 4M(N, Z + 1) \\
& - 12M(N, Z) = 0.
\end{aligned} \tag{1.8}$$

Pri vyhodnocovaní odchýlok od GK relácie (1.8), musíme byť opatrný. Môžeme si všimnúť, že (1.2) s obmedzením $|C_i| = 1$ v prípade GK relácie (1.8) neplatí. Toto je dôsledok toho, že GK relácia (1.8) je vytvorená z 12 odhadov hmotnosti $M(N, Z)$ pomocou 12 GK relácií (1.5) a preto pozorujeme koeficient pred hmotnosťou $M(N, Z)$ $C_i = 12$. Z toho hľadiska môžeme povedať, že relácia (1.8) je všeobecnejšia ako relácia (1.2) s obmedzením $|C_i| = 1$. Prakticky sa toto ošetrí spriemerovaním a teda, že vydelíme výslednú hodnotu 12.

	$n \geq 1$	$n \geq 4$	$n \geq 7$	$n = 12$
$A \geq 16$	182	152	123	87
$A \geq 60$	115	98	86	76

Tab. 1.1: RMS odchýlky od hmotností (v keV) vypočítané s GK reláciami pre rôzne n . Prevzaté z [5].

1.1.4 Odchýlky od Garvey-Kelsonových relácií

Na pravej strane každej z GK relácií (1.5), (1.6) alebo (1.8) je v ideálnom prípade nula. Keďže ale GK relácie nie sú dokonale presné, na pravej strane nebude presne nula, ale nejaká odchýlka, ktorú budeme značiť ako $P(N, Z)$, kde ako už je zvykom N je počet neutrónov a Z je počet protónov. Teda aplikáciou GK relácií na jadrové hmotnosti získame odchýlky GK relácií, ktoré reprezentujú pravú stranu rovnice (1.5), (1.6) alebo (1.8).

1.2 Korelačná matica

K analýze vzťahov medzi odchýlkami po aplikácii GK relácii je možné využiť tzv. *korelačnú maticu*. Korelačná matica nám dá informácie o koreláciách medzi jednotlivými jadrami v jadrovej tabuľke. Inými slovami, môžeme sa dozvedieť o tom či ešte existujú vzťahy medzi odchýlkami po aplikácii GK relácií.

Môžeme sa na dátové súbory, z ktorých chceme skonštruovať korelačnú maticu pozeráť ako na časové rady, resp. signály v rovnakom čase (tzv. *equal-time correlation matrix*). Podobnú konštrukciu korelačných matíc vykonávajú v [7, 8]. Nech je teda $P_i(k)$ M -dimenzionálny multivariačný dátový súbor dĺžky T , kde $i, j = 1, \dots, M$ a $k = 1, \dots, T$. Potom môžeme počítať korelačnú maticu $\hat{\rho}$ ako:

$$\rho_{i,j} = \frac{1}{T} \sum_{k=1}^T \frac{(P_i(k) - \bar{P}_i)(P_j(k) - \bar{P}_j)}{\sigma_i \sigma_j}, \quad (1.9)$$

kde \bar{P}_i , resp. \bar{P}_j značí strednú hodnotu a σ_i , resp. σ_j značí štandardnú odchýlku (odmocnina z variancie) $P_i(k)$, resp. $P_j(k)$.

To, že v (1.9) vykonávame normalizáciu v tvare:

$$\frac{P_i(k) - \bar{P}_i}{\sigma_i}, \quad (1.10)$$

znamená niekoľko vecí. Ako prvé, hodnoty vstupujúce do korelačnej matice normalizujeme týmto spôsobom preto, aby každá vstupujúca rada mala strednú hodnotu rovnú 0 a rozptyl rovný 1 [9]. Ďalej to znamená, že elementy korelačnej matice $\rho_{i,j}$, nazývané *korelačné koeficienty*, budú medzi -1 a 1 a všetky diagonálne elementy budú rovné 1 [8]. Dôsledkom takejto normalizácie je taktiež aj to, že platí:

$$\text{Tr}(\hat{\rho}) = \sum_i \rho_{i,i} = \sum_i \lambda_i = M, \quad (1.11)$$

kde λ_i sú vlastné hodnoty korelačnej matice $\hat{\rho}$ (viz definícia vlastnej hodnoty neskôr (1.14)) a $\text{Tr}(\hat{\rho})$ je stopa matice $\hat{\rho}$. Znamená to teda, že stopa korelačnej

matice normalizovanej spôsobom (1.10), ktorá sa pri diagonalizácii nezmení je rovná súčtu vlastných hodnôt korelačnej matice a zároveň je rovná dimenzii M korelačnej matice [8]. Dôsledkom (1.11) je, že ak sa jedna vlastná hodnota zmení, musí to byť vykompenzované upravením zvyšných vlastných hodnôt tak, aby bola splnená podmienka (1.11) [8].

Taktiež je potrebné dodať, že normalizácia (1.10) spôsobuje odstránenie informácie o amplitúde a o možnom rozdielne amplitúd medzi dvomi signálmi $P_i(k)$. Korelácie ale potom výhradne odrážajú vzťahy medzi tvarmi a posunutiami (fázami) signálov $P_i(k)$ [8].

Zavedenie a popis konkrétnych vzťahov na výpočet korelačnej matice bude v Časti 2, v odseku 2.3.1, kde korelujeme odchýlky GK relácií buď podľa fixných protónových čísel Z_i , alebo fixných neutrónových čísel N_i . A teda konkrétne $P_i(k)$ bude reprezentovať buď $P(N, Z_i)$, kde ide N od 0 do N_{max} (v tu použitom značení sa teda $T = N_{max}$) alebo $P(N_i, Z)$, kde zas Z ide od 0 do Z_{max} (teda v tomto prípade $T = Z_{max}$). N_{max} , resp. Z_{max} je v danom dátovom súbore odchýlok od GK relácií najväčšie neutrónové, resp. protónové číslo.

1.3 Autokorelačná matica

Autokorelačná matica sa počíta analogicky ako korelačná matica, s výnimkou toho, že násobíme každý element s každým. Elementy autokorelačnej matice sa počítajú vzťahom:

$$C_{\Delta N, \Delta Z} = \frac{1}{C_{max}} \sum_N \sum_Z P(N, Z) P(N + \Delta N, Z + \Delta Z), \quad (1.12)$$

kde sčítame cez všetky N a Z , $P(N, Z)$ sú odchýlky od GK relácií, ΔN , resp. ΔZ sú posunutia neutrónového čísla, resp. protónového čísla a idú od $-N_{max}$ do N_{max} , resp. od $-Z_{max}$ do Z_{max} . C_{max} je normalizačná konštanta, pre ktorú platí, že $C_{max} = C_{0,0}$, teda keď v $C_{\Delta N, \Delta Z}$ je $\Delta N = 0$ a zároveň $\Delta Z = 0$ a neuvažujeme v (1.12) člen $\frac{1}{C_{max}}$ pred sumami. Keďže jedna z vlastností autokorelačnej matice je to, že má maximum v bode $(0, 0)$, tak je jasné, že takouto normalizáciou potom dostaneme autokorelačné koeficienty $C_{\Delta N, \Delta Z}$ v rozmedzí od -1 do 1. Ďalšou vlastnosťou autokorelačnej matice je jej symetria.

Na autokorelačnú maticu sa dá tiež pozeráť ako na korelácie medzi časovými radami v rôznych časoch, teda aj ako na závislú na dvoch časoch. Dokonca sa na ňu dá pozeráť aj ako na korelácie medzi časovými radami s posunutým časom, čo vidieť v (1.12) aj keď nepracujeme doslovne s časom ale s posunutiami o nejaké ΔN , resp. ΔZ .

1.4 Analýza hlavných komponentov (PCA)

Analýza hlavných komponentov (angl.: Principal Component Analysis; skrátene PCA) je štatistická procedúra, ktorá nám dovoľuje určiť hlavné smery v ktorých sa dáta líšia. Je to metóda, ktorá identifikuje vzory v množine dát tým, že vytvorí nové premenné, ktorých je oveľa menej, a tieto nové premenné nazývame *hlavné komponenty* (angl.: *principal components*) [10].

Tieto hlavné komponenty sa prakticky hľadajú počítaním vlastných hodnôt a vlastných vektorov korelačnej matice daného dátového súboru. Tento proces môže byť prirovnaný k hľadaniu súradnicového systému, v ktorom je korelačná matica diagonálna [10]. Platí, že vlastný vektor prislúchajúci k najväčšej hlavnej hodnote určuje smer, kde je najsilnejšia korelácia [10]. Ďalej vlastný vektor patriaci druhej najväčšej vlastnej hodnote určuje ortogonálny smer s ďalšou najsilnejšou koreláciou a podobne pre menšie vlastné hodnoty a im prislúchajúce vlastné vektory.

Z tohto plynie, že sa dá taktiež povedať, že vlastné hodnoty sú varianciou hlavných komponentov. Teda prvá vlastná hodnota je varianciou prvého hlavného komponentu, druhá vlastná hodnota je varianciou druhého hlavného komponentu a podobne ďalej.

Pozrime sa teraz prakticky ako nájdeme hlavné komponenty korelačnej matice \hat{A} . Vlastné hodnoty matice \hat{A} sú definované ako korene rovnice:

$$\det(\hat{A} - \lambda \hat{I}) = 0, \quad (1.13)$$

kde \hat{I} je jednotková matica. Nech je teda λ vlastná hodnota matice \hat{A} . Potom existuje vektor \vec{v} taký, že platí:

$$\hat{A}\vec{v} = \lambda\vec{v}. \quad (1.14)$$

Potom nazývame vektor \vec{v} vlastným vektorom \hat{A} príslušiaci vlastnej hodnote λ . Pri ďalšej práci s vlastným vektorom \vec{v} chceme kvôli tomu aby rovnica (1.14) dávala jednoznačné riešenie, aby vektor \vec{v} bol normalizovaný. Normalizácia nám teda dáva nasledovnú podmienku na \vec{v} :

$$\vec{v} \cdot \vec{v}^T = 1. \quad (1.15)$$

Nech je ďalej matica \hat{A} maticou typu $n \times n$ s vlastnými vektormi $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n$ a s vlastnými hodnotami $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$. Potom, ak dáme vlastné vektory ako stĺpce matice, z rovnice (1.14) dostávame maticovú rovnosť:

$$\hat{A} \begin{pmatrix} \vec{v}_1 & \vec{v}_2 & \dots & \vec{v}_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{v}_1 & \vec{v}_2 & \dots & \vec{v}_n \end{pmatrix}. \quad (1.16)$$

Môžeme si označiť maticu vlastných vektorov ako:

$$\hat{V} := \begin{pmatrix} \vec{v}_1 & \vec{v}_2 & \dots & \vec{v}_n \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

a taktiež si označíme diagonálnu maticu na pravej strane rovnice (1.16) ako:

$$\hat{\Lambda} := \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

Teda môžeme teraz písať zjednodušene rovnicu (1.16) ako:

$$\hat{A}\hat{V} = \hat{\Lambda}\hat{V}. \quad (1.19)$$

Keďže sme jednotlivé vlastné vektory normalizovali na jednotku a taktiež sú ortogonálne, tak určite platí identita:

$$\hat{V}\hat{V}^\top = \hat{I} = \hat{V}^\top\hat{V}, \quad (1.20)$$

kde \hat{I} je n -dimenzionálna jednotková matica definovaná ako:

$$\hat{I} := \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.21)$$

Teda celkovo dostaneme z (1.19) a s použitím vzťahu (1.18), že platí:

$$\hat{V}^\top\hat{A}\hat{V} = \hat{\Lambda}. \quad (1.22)$$

Z čoho si môžeme použitím (1.20) vyjadriť \hat{A} nasledovne:

$$\hat{A} = \hat{V}\hat{\Lambda}\hat{V}^\top. \quad (1.23)$$

Potom je zjavné, že pre jednotlivé komponenty i budú mať matice \hat{A}_i taký tvar, že v matici $\hat{\Lambda}$ bude nenulový len člen λ_i . Teda ak si zoradíme vlastné hodnoty zostupne, teda λ_1 je najväčšou vlastnou hodnotou, tak napríklad pre prvý hlavný komponent bude mať príslušná matica tvar:

$$\hat{A}_1 = \hat{V} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \hat{V}^\top. \quad (1.24)$$

Pre zovšeobecnenie môžeme takú maticu $\hat{\Lambda}$, kde je jediným nenulovým elementom λ_i označiť ako $\hat{\Lambda}_i$ a pre maticu i -tého hlavného komponentu bude potom platiť:

$$\hat{A}_i = \hat{V}\hat{\Lambda}_i\hat{V}^\top. \quad (1.25)$$

Kvôli platnosti (1.23) a (1.25) bude určite platiť aj vzťah:

$$\hat{A}_m = \sum_{i=1}^m \hat{V}\hat{\Lambda}_i\hat{V}^\top = \sum_{i=1}^m \hat{A}_i, \quad (1.26)$$

kde \hat{A}_i indexuje hlavné komponenty od 1 do nejakého m , pričom platí, že keď m sa bude rovnať počtu vlastných hodnôt \hat{A} , tak $\hat{A}_m = \hat{A}$. Toto je triviálny dôsledok platnosti (1.23). \hat{A}_m môžeme nazývať ako maticu kumulovaných m hlavných komponentov.

1.5 Teória kvantového chaosu

Chaotický systém z pohľadu klasickej fyziky je v najjednoduchšom pohľade spojený s veľkou citlivosťou na počiatočné podmienky daného systému. Taktiež môžeme povedať, že je úzko spätý s nelinearitou klasických pohybových rovníc.

Ukazuje sa, že nie je možné podobným spôsobom charakterizovať chaos v kvantovej mechanike. Kvantová mechanika je lineárna a časový vývoj kvantových systémov je unitárny [11]. S použitím poruchovej teórie sa dá ukázať, že skutočne zmena stavového vektoru nerastie v čase a teda ju nemôžeme použiť k meraniu chaotickosti stavu [11].

Existujú dva základné prístupy ako môžeme analyzovať chaos v kvantovej teórii:

1. Semiklasické kvantovanie
2. Spektrálne korelácie

Kľúčový pre nás bude prístup cez spektrálne korelácie. Štatistické analýzy spektrier kvantových systémov ako prvý použil E. Wigner pri štúdiu neutrónových rezonancií [12]. Energetické spektrum je predsa fundamentálnym objektom v kvantovej mechanike. Prístup cez spektrálne korelácie je teda logickým nástrojom, ktorý skúma špecifické štatistické vlastnosti kvantových hladín. Veľmi dôležitým matematickým nástrojom k skúmaniu korelácií v chaotickom kvantovom spektre je teória náhodných matíc (angl.: *random matrix theory*), ktorú inicioval Wigner a ďalej bola rozvíjaná Dysonom a Mehtom [12]. Teóriu náhodných matíc budeme značiť RMT.

Rozvoj základov kvantového chaosu začal práve s prácou E. Wignera z roku 1955 [13]. Navrhol používanie RMT a formuloval dohad, ktorý sa ukázal byť správnym. Predpokladal, že interakcie v mnohočasticovom kvantovom systéme sú tak zložité, že systém bude mať rovnaké štatistické spektrálne vlastnosti ako spektrum náhodnej matice [14]. Neskôr Wigner odvodil aj pravdepodobnostné rozdelenie vzdialenosti najbližších susedov (tzv. NNSD) náhodných GOE matíc:

$$p_w(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2}. \quad (1.27)$$

Neskôr Bohigas, Gianonni a Schmit formulovali hypotézu, že takýto systém je v klasickej limite chaotický [12].

Čo sú ale GOE náhodné matice a NNSD? GOE je anglická skratka pre Gaussian Orthogonal Ensemble, čo je základný súbor náhodných matíc, ktorý sa používa práve k charakterizovaniu kvantových chaotických systémov. Je to práve kvôli tomu, že spektrum GOE má rovnaké štatistické vlastnosti ako spektrum kvantového chaotického systému. Formálne je GOE definovaný na priestore reálnych symetrických matíc dvomi požiadavkami. Prvou je, že je daný súbor náhodných matíc invariantný voči ortogonálnej transformácii, teda pre každú GOE maticu \hat{Z} transformácia $\hat{Z} \rightarrow \hat{Z}' = \hat{W}^\top \hat{Z} \hat{W}$, kde \hat{W} je ľubovoľná reálna ortogonálna matica (platí $\hat{W} \hat{W}^\top = \hat{I}$), nezmení pravdepodobnosť $P(Z)dZ$ elementov Z_{ij} , teda platí, že:

$$P(Z')dZ' = P(Z)dZ. \quad (1.28)$$

Druhou požiadavkou je to aby elementy GOE boli štatisticky nezávislé.

Okrem súborov matíc GOE existujú ďalšie dva súbory náhodných matíc a to GUE (Gaussian Unitary Ensemble) a GSE (Gaussian Symplectic Ensemble). GUE odpovedá systémom, ktoré nie sú invariantné voči časovej transformácii a GSE zas systémom, ktoré majú poločíselný moment hybnosti.

K objasneniu toho, čo znamená NNSD, v preklade *nearest-neighbour spacing distribution*, potrebujeme zaviesť ďalšie pojmy. Ako prvé si musíme zdefinovať tzv. *hustotu hladín*:

$$\rho(E) = \sum_i \delta(E - E_i), \quad (1.29)$$

kde δ je Diracova delta funkcia a sčítame cez všetky energie E_i , teda hladiny spektra, s ktorým pracujeme. Takto si môžeme spektrum rozdeliť na dve časti:

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \tilde{\rho}(E), \quad (1.30)$$

kde budeme nazývať $\bar{\rho}(E)$ ako *hladkú časť* (angl.: smooth part) a $\tilde{\rho}(E)$ ako *oscilačnú časť* spektra. Obidve časti spektra reprezentujú niečo iné. Hladká časť reprezentuje strednú hustotu hladín okolo energie E a oscilačná časť nám zas hovorí o odchýlkach od priemeru E . Nás bude ďalej zaujímať iba oscilačná časť spektra, pretože iba ona obsahuje informácie o koreláciách.

Keďže nás teda zaujíma iba časť spektra $\tilde{\rho}(E)$, potrebujeme procedúru, ktorá nás zbaví hladkej časti. Táto procedúra sa nazýva *polynomial unfolding*. Prakticky sa to vykonáva tak, že hľadáme polynóm fitujúci E_i .

Po tom, ako získame tú časť spektra, ktorú chceme, potrebujeme spektrum normalizovať, aby sme dostali priemernú hustotu hladín rovnú 1.

Z normalizovaného spektra môžeme nakoniec vypočítať pravdepodobnostné rozdelenie vzdialeností najbližších susedov, teda NNSD tak, že vypočítame vzdialenosti medzi najbližšími hladinami.

V tejto práci ale nebudeme analyzovať priamo súbory matíc GOE. Budeme analyzovať korelačné matice, ktoré sme zaviedli v časti 1.2. Korelačné matice úplne nekorelovaného signálu tvoria tzv. *Wishartov súbor* (angl.: *Wishart ensemble*), skrátene WE. Ak chceme porovnávať empirické výsledky, tak WE je prirodzenou nulovou hypotézou, že vo vstupných dátach nie sú žiadne korelácie [8]. Ak platí, že v limitách $M \rightarrow \infty$ a $T \rightarrow \infty$ zostáva $Q = T/M$ konštantné, tak platí, že pravdepodobnostné rozdelenie vlastných hodnôt Wishartovho súboru má tvar [8]:

$$p_W = \frac{Q}{2\pi\sigma^2} \frac{\sqrt{(\lambda_+ - \lambda)(\lambda_- - \lambda)}}{\lambda}, \quad (1.31)$$

pričom $\sigma^2 = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \sigma_i^2$ značí totálny rozptyl vstupného náhodného signálu a pre λ_{\pm} platí:

$$\lambda_{\pm} = 1 + \frac{1}{Q} \pm 2\sqrt{\frac{1}{Q}}. \quad (1.32)$$

O Wishartovom súbore môžeme taktiež povedať, že jeho NNSD bude mať Wignerove rozdelenie, teda ako (1.27). Je dôležité dodať, že korelácie vo vstupnom signáli spôsobia odchýlku NNSD od Wignerovho rozdelenia.

Celkovo ak pravdepodobnostné rozdelenie vlastných hodnôt korelačnej matice bude súhlasiť s pravdepodobnostným rozdelením (1.31), môžeme korelačnú maticu považovať za Wisharov súbor. A teda NNSD takejto korelačnej matice bude mať tvar Wignerovho rozdelenia, ak je signál, z ktorého je korelačná matica zostrojená, úplne náhodný, teda nekorelovaný. Ak sa bude NNSD korelačnej matice z Wishartovho súboru líšiť od Wignerovho rozdelenia, tak nám to dáva informáciu o koreláciách v pôvodnom signále.

Časť 2

Spracovanie dát a diskusia výsledkov

2.1 Počítanie a diskusia GK relácií

Hlavným cieľom tejto práce je analýza odchýlok od GK relácií $P(N, Z)$ po tom ako na experimentálne získané hodnoty jadrových hmotností aplikujeme GK relácie.

Odchýlka $P(N, Z)$ nám vlastne hovorí o tom, ako veľmi sa daná GK relácia odchyľuje od nuly. Tieto hodnoty chceme ďalej vykresliť ako kontúrový graf, kde farbou (kontúrami) budeme značiť $P(N, Z)$, horizontálna os bude reprezentovať počet neutrónov N a vertikálna os počet protónov Z daného jadra.

Ako vstupné dáta používame najnovšie namerané hmotnosti jadier AME 2020 (Atomic Mass Evaluation) aktuálne k roku 2020. Textový dátový súbor nameraných jadrových hmotností bol získaný z webovej stránky [15], ale nachádza sa a rozoberajú ho aj v článkoch [16, 17]. Pôvodne mala byť analýza založená na staršej kompilácii jadrových hmotností AME 2016, keďže v čase začiatku práce bola táto kompilácia najaktuálnejšou a články [16, 17] boli publikované až v marci 2021. Porovnaním analýzy týchto dvoch súborov jadrových hmotností neboli zistené žiadne veľké rozdiely.

Aplikujeme teda na dátový súbor jadrových hmotností prvú GK reláciu (1.5). Dostali sme odchýlky $P(N, Z)$ závislé na N a Z a tie boli vykreslené ako kontúrový graf na Obr. 2.1.

Aplikáciou GK relácie (1.6) dostaneme kontúrový graf, ktorý je na Obr. 2.2. Pri aplikácii GK relácie (1.8) si musíme dať väčší pozor. Keďže relácia (1.8) vznikla skombinovaním 12 GK relácií (1.5), výsledná odchýlka musí byť spriemerovaná, teda sa musí vydeliť 12. Pri základnej GK relácii (1.5) bolo povedané, že pre koeficient C_i , ktorý sme videli pri jej konštrukcii v (1.2), platí $|C_i| = 1$. Túto podmienku ale zjavne nespĺňa (1.8), iba jednotlivých 12 odhadov, ktoré boli na jej konštrukciu použité. Aj z tohto potom vidieť, že musíme urobiť priemer výslednej odchýlky vydelením 12.

Po uvedomení si toho ako získame správne odchýlky v prípade aplikácie GK relácie (1.8), môžeme tieto odchýlky tiež zobrazovať ako kontúrový graf. Tento graf môžeme vidieť na Obr. 2.4.

Vo všetkých kontúrových grafoch bude šedá oblasť reprezentovať namerané hodnoty. Vznikajú bud' tým, že nám informácia o hmotnosti pre dané (N, Z)

úplne chýba (nefyzikálne jadro alebo jadro s dosiaľ neznámou hmotnosťou) alebo je informácia odstránená ak jeden alebo viac členov v danej GK relácii chýba. Toto sa prejaví tým, že nenulová oblasť $P(N, Z)$ je znateľne menšia na Obr. 2.4, kde sú zobrazené odchýlky od GK relácie (1.8). Toto nie je prekvapivé, keďže relácia (1.8) obsahuje oveľa viac členov ako GK relácie (1.5) a (1.6), ktoré všetky musia byť nenulové.

Z grafov GK relácií teraz môžeme vidieť, že odchýlka GK relácií je skutočne rádovo okolo 1000 keV a menej (viz Obr. 2.3) a najlepšie výsledky dostávame pre najkomplexnejšie relácie (1.8). Napriek tomu si ale taktiež môžeme všimnúť z Obr. 2.4, že hoci máme väčšiu presnosť, stratili sme väčšie množstvo informácií na krajoch jadrovej tabuľky. Máme teda menšie množstvo odchýlok $P(N, Z)$ pre (1.8). To je ale v súlade s tým ako fungujú GK relácie, teda že ich nemôžeme použiť na miestach kde nemáme informáciu o hmotnosti každého jadra, ktoré sa nachádza v rovnici danej GK relácie.

Na porovnanie, zobrazujeme aj graf odchýlok po aplikácii GK relácie (1.6) s rozsahom $P(N, Z)$ od -1000 do 1000 keV a to na Obr. 2.3.

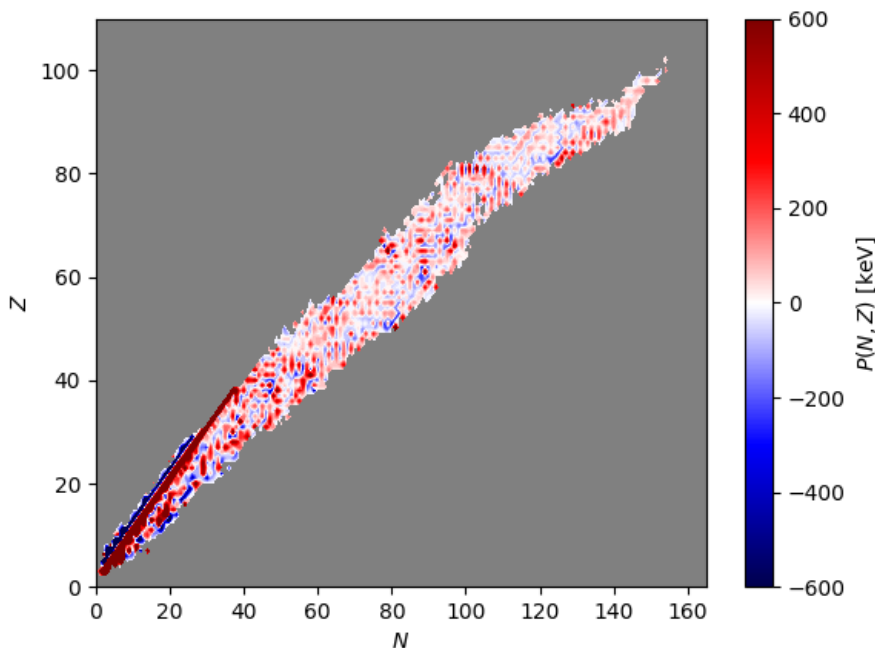
Pozrime sa ešte na odchýlky od GK relácie (1.5) na Obr. 2.1. Približne v oblasti kedy $Z > 40$ a $N > 50$ sú odchýlky $P(N, Z)$ rádovo rovnakej veľkosti. Všimnime si ale hlavne líniu $N = Z$. Táto línia vykazuje veľmi silné korelácie o niekoľko rádov vyššie ako ostatné. Toto ale nie je prekvapivé, keďže bolo zdôraznené v časti 1.1.2, že relácia (1.5) môže byť používaná len v situácii, kedy $N > Z$, aby sme sa vyhli prekročeniu línie $N = Z$. Máme teda experimentálne potvrdené, že GK relácia (1.5) skutočne neplatí v tejto situácii. Rovnaký jav môžeme pozorovať aj v prípade GK relácie (1.8) na Obr. 2.4, keďže relácia (1.8) bola vytvorená kombináciou 12 GK relácií (1.5) a taktiež sa preto nemôže vyhnúť tomuto obmedzeniu.

2.2 Autokorelácia

Vďaka tomu, že máme vypočítané odchýlky od Garvey-Kelsonových relácií môžeme pristúpiť k prvej analýze zbytkových korelácií. Touto prvou analýzou bude autokorelácia. Konkrétne máme za cieľ prísť k správne tvaru autokorelačnej matice.

Ako už bolo ukázané v sekcii 1.3, pri počítaní autokorelačnej matice vzťahom (1.12) násobíme každú hodnotu nášho dátového súboru $P(N, Z)$ s každou inou hodnotou v danom dátovom súbore. Presnejšie povedané to znamená, že odchýlku $P(N, Z)$ násobíme s každou inou odchýlkou kde prechádzame všetky posunutia ako v smere N , tak v smere Z . Posunutie neútronového čísla jadra N budeme značiť ako ΔN a posunutie protónového čísla Z budeme značiť ako ΔZ . Toto vykonáme pre všetky dostupné odchýlky $P(N, Z)$ od GK relácií a sčítame cez všetky N a Z ako to môžeme vidieť vo vzťahu (1.12). Odchýlky $P(N, Z)$, pre ktoré nemáme namerané dáta, budeme nahradzovať nulou.

Elementy autokorelačnej matice budú teda odpovedať určitým posunutiam ΔN a ΔZ . Výsledná autokorelačná matica nám teda dá kvantitatívnu informáciu o tom ako je každá odchýlka od GK relácií korelovaná s ľubovoľnou inou odchýlkou posunutou o ΔN neutrónov a ΔZ protónov v jadrovej tabuľke.



Obr. 2.1: Kontúrový graf reziduálnych hmotností $P(N, Z)$ po aplikácii GK relácie (1.5) v závislosti na N a Z . Farba kontúr charakterizuje veľkosť $P(N, Z)$ v rozsahu od -600 keV do 600 keV.

2.2.1 Grafická analýza a diskusia

Pre Garvey-Kelsonove relácie vypočítané podľa vzťahu (1.6) bola autokorelačná matica vypočítaná pomocou rovnice (1.12). Pri normalizácii v (1.12) bola ako najväčšia hodnota vzatá centrálna korelácia kde nenastalo žiadne posunutie, resp. $\Delta N = 0$ a $\Delta Z = 0$, teda korelácia elementu so sebou samým. Konkrétny tvar autokorelačnej matice bol potom vykreslený ako kontúrový graf.

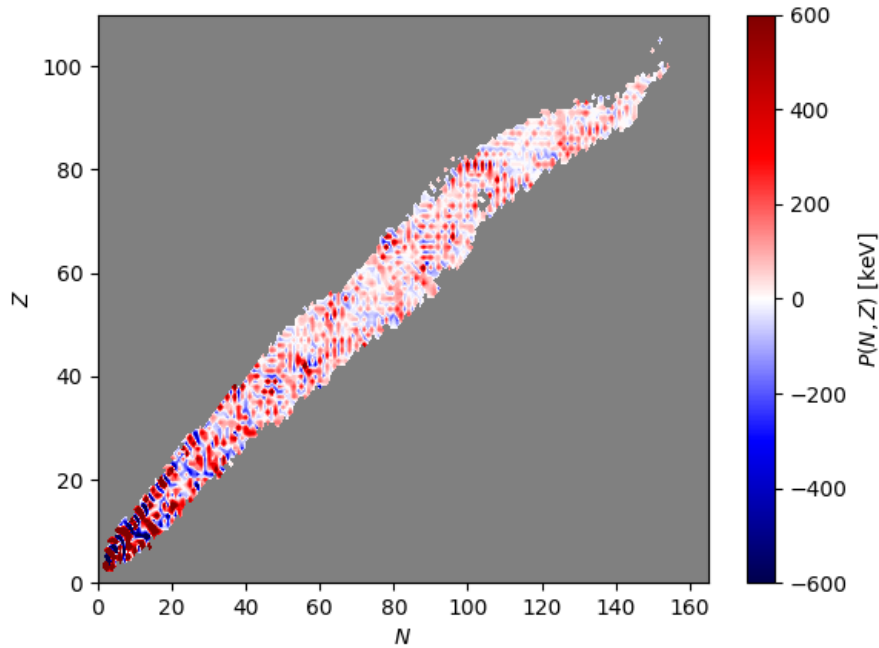
Autokorelačné koeficienty boli získané z vypočítaných odchýlok, ktoré boli vyhodnotené v časti 2.1 v programovacom jazyku Python a vykreslené ako kontúrové grafy s použitím knižnice Matplotlib.

V rozmedzí autokorelačného koeficientu $C_{\Delta N, \Delta Z}$ od -1 do 1 môžeme kontúrový graf vidieť na Obr. 2.5 a na Obr. 2.6 je zobrazený rovnaký graf, len sústredený na oblasť kde sú korelácie najsilnejšie. Na Obr. 2.7 je nakoniec tá istá korelačná matica až na to, že kontúrami zobrazujeme $C_{\Delta N, \Delta Z}$ v rozmedzí od -0,15 do 0,15.

Samozrejme môžeme počítať autokorelačnú maticu aj keď si zoberieme prípady iných GK relácií. Vezmime si napríklad GK relácie vypočítané podľa vzťahu (1.5). Kontúrový graf autokorelácie priblížený na najsilnejšie autokorelácie GK relácií (1.5) v rozmedzí autokorelačných koeficientov od -0.15 do 0.15 je na Obr. 2.8.

Nakoniec máme autokorelácie podľa GK relácii (1.8) na kontúrových grafoch pre rozmedzie autokorelačných koeficientov od -0.15 do 0.15 na Obr. 2.9.

Na Obr. 2.5 si môžeme všimnúť, že autokorelačné koeficienty sú sústredené iba na veľmi lokalizovanú oblasť okolo bodu (0,0). Koeficienty, ktoré hoci sú nenulové, ale veľmi blízke nule vidíme v určitej ohraničenej oblasti. Sivá oblasť, ktorá je mimo spomínanej ohraničenej oblasti s nenulovými koeficientami, reprezentuje



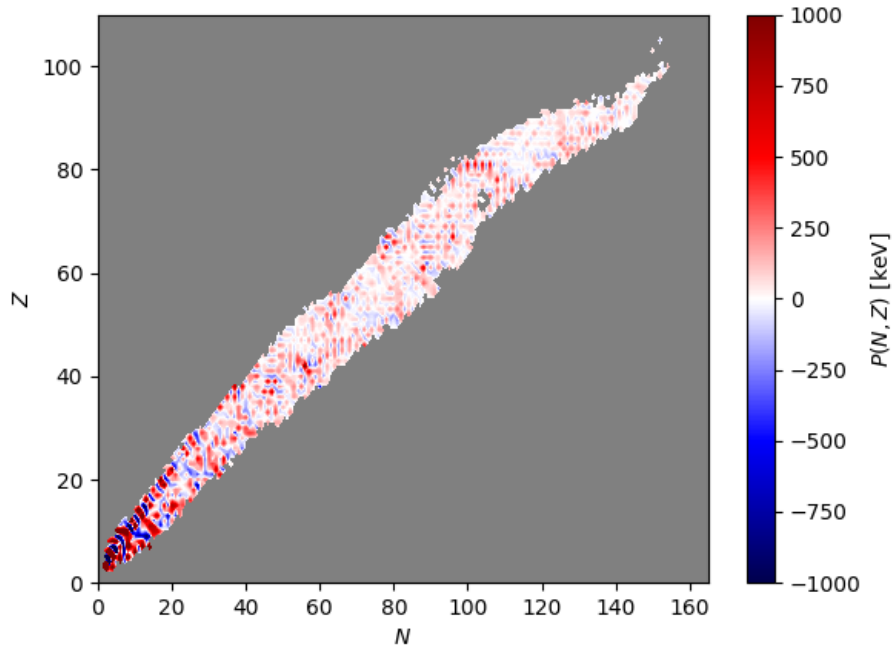
Obr. 2.2: Kontúrový graf reziduálnych hmotností $P(N, Z)$ po aplikácii GK relácie (1.6) v závislosti na N a Z . Farba kontúr charakterizuje veľkosť $P(N, Z)$ v rozsahu od -600 keV do 600 keV.

nemerané hodnoty. V programe počítajúcom autokorelačné koeficienty sme dostali presnú nulu, keďže už v časti 2.1 sme spomenuli ako nefyzikálne jadrá mimo jadrovú tabuľku, ktorých hmotnosti nemáme pokladáme za nulu. Taktiež sem spadajú odchýlky $P(N, Z)$, ktoré sme museli vyhodíť, ak sme pri výpočte GK relácie nepoznali hodnotu nejakého jadra. Toto sa samozrejme prejaví ako šedá oblasť aj v grafe autokorelačnej matice, čo plynie z (1.12).

Na všetkých obrázkoch autokorelácie môžeme taktiež pozorovať to, že autokorelačná matica má skutočne jednu z vlastností - symetriu. Na Obr. 2.6 môžeme pozorovať druhú spomínanú vlastnosť, a to že najväčším koeficientom autokorelačnej matice je centrálny element $(0, 0)$, podľa ktorého normalizujeme vo vzťahu (1.12).

Na Obr. 2.7 môžeme pozorovať autokorelačné koeficienty v takmer o rád menšom rozmedzí ako na predošlom Obr. 2.6. Napriek tomu stále pozorujeme korelácie len lokalizovane. Všimame si ostré striedanie korelácie a antikorelácie od centrálného bodu najsilnejšej korelácie v $(0, 0)$. Tieto výsledky dávajú fyzikálny zmysel, keďže najsilnejšie korelované budú susedné jadrové hmotnosti, teda posunuté o malé ΔN a ΔZ . Striedanie korelácie a antikorelácie dáva matematický zmysel z tvaru (1.12), keďže pozorujeme striedanie kladných a záporných odchýlok aj priamo v kontúrových grafoch odchýlok od GK relácií.

Korelácie zobrazené na Obr. 2.8 a Obr. 2.9 majú veľmi intenzívne korelovanú diagonálu. Toto je zjavne dôsledok toho, že pre GK relácie (1.5) a (1.8) sú odchýlky na línii $N = Z$ o niekoľko rádov väčšie ako v iných oblastiach. Pri autokorelácii, kvôli tvaru rovnice (1.12), to ale spôsobí skreslenie výsledkov autokorelácie keďže v (1.12) násobíme každú odchýlku s každou a najsilnejšie ko-



Obr. 2.3: Kontúrový graf reziduálnych hmotností $P(N, Z)$ po aplikácii GK relácie (1.6) v závislosti na N a Z . Farba kontúr charakterizuje veľkosť $P(N, Z)$ v rozsahu od -1000 keV do 1000 keV.

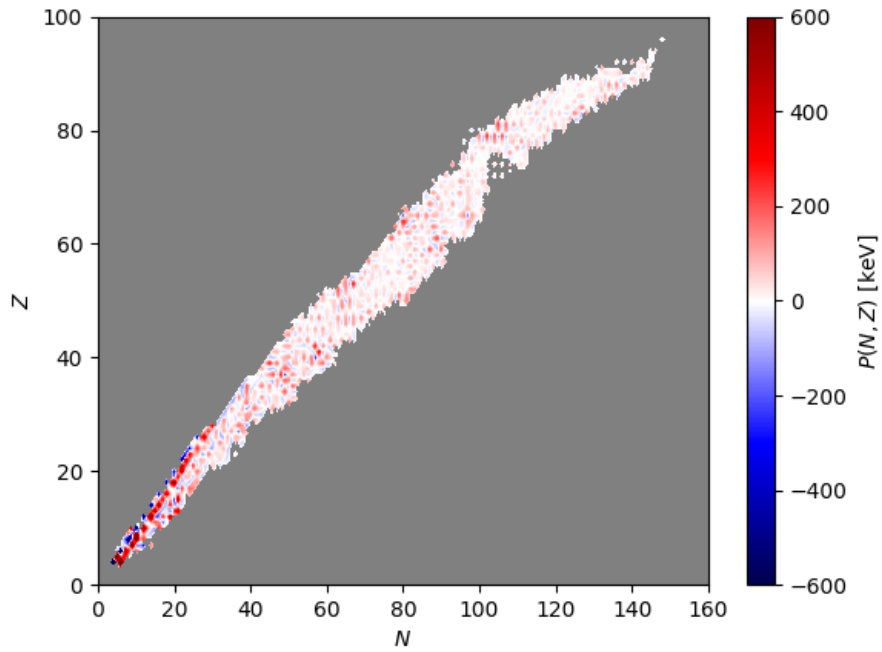
relácie budú samozrejme medzi odchýlkami na línii $N = Z$. Dokonca také silné, že prebijú korelácie v iných oblastiach. Toto je možné práve kvôli tomu, že autokoreláciou dostávame informáciu o tom ako veľmi je korelovaná ľubovoľná odchýlka s ľubovoľnou inou odchýlkou, ktorá je posunutá o nejaké ΔN a ΔZ . Keďže je ale lúnia $N = Z$ dlhá takmer $\Delta N = 40$ a $\Delta Z = 40$, tak pochopiteľne bude autokorelačná matica vyzerat' tak, ako ju pozorujeme na Obr. 2.8, resp. Obr. 2.9.

2.3 Korelácia

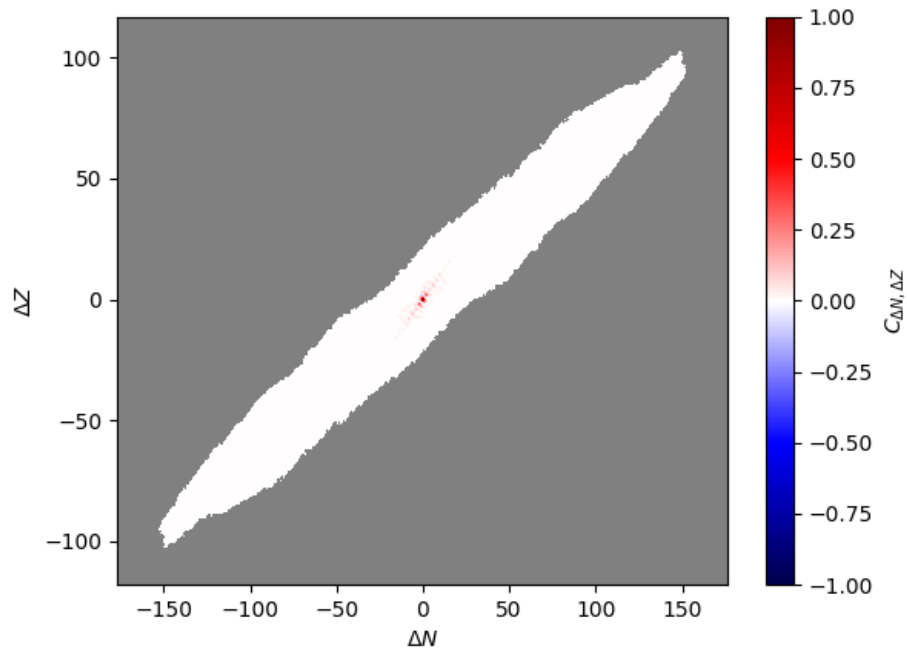
V tejto práci analyzujeme dáta z jadrovej tabuľky, teda máme hmotnosti jadier, ktoré zobrazujeme v závislosti na protónovom čísle Z a na neutrónovom čísle N , aby sme takto mohli zobrazit' všetky jadrá, kde každé jadro má pridelenú špecifickú hodnotu. Vo všeobecnosti by sme brali ako túto hodnotu hmotnosť daného jadra. V našom prípade ale pracujeme s odchýlkami $P(N, Z)$ od GK relácii, ako boli vypočítané v časti 2.1. Môžeme teda pristúpiť k druhému spôsobu analýzy nášho dátového súboru a to ku konštrukcii a ďalšej analýze korelačnej matice.

2.3.1 Korelačná matica

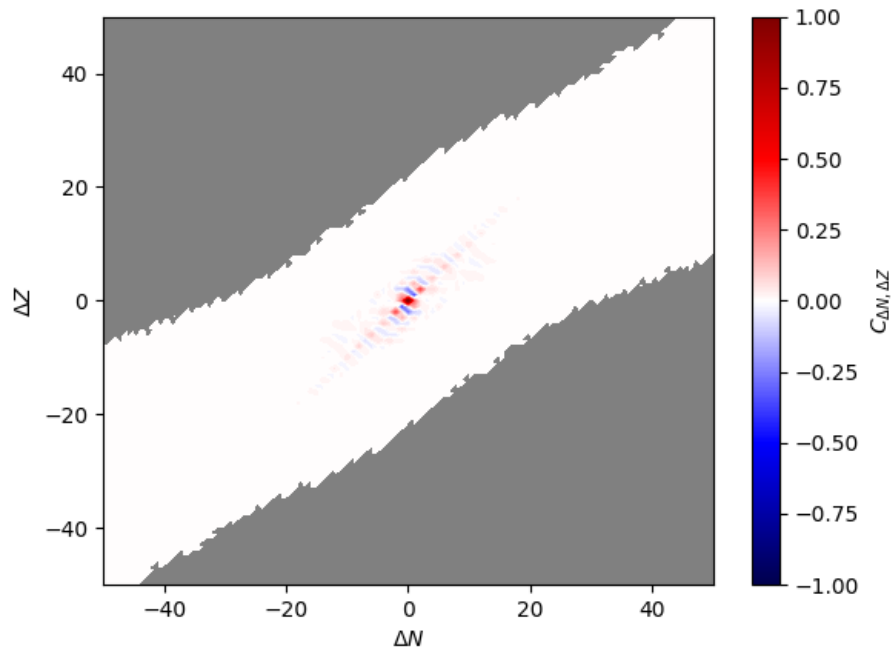
K tomu aby sme mohli pristúpiť k počítaniu korelačnej matice, si musíme uvedomiť, čo budú jednotlivé elementy tejto matice reprezentovať. V prípade jadrovej tabuľky so závislosťou na Z a N si musíme vybrať podľa ktorej závislosti budeme korelácie vykonávať. Zoberme si napríklad dve fixné hodnoty protónového



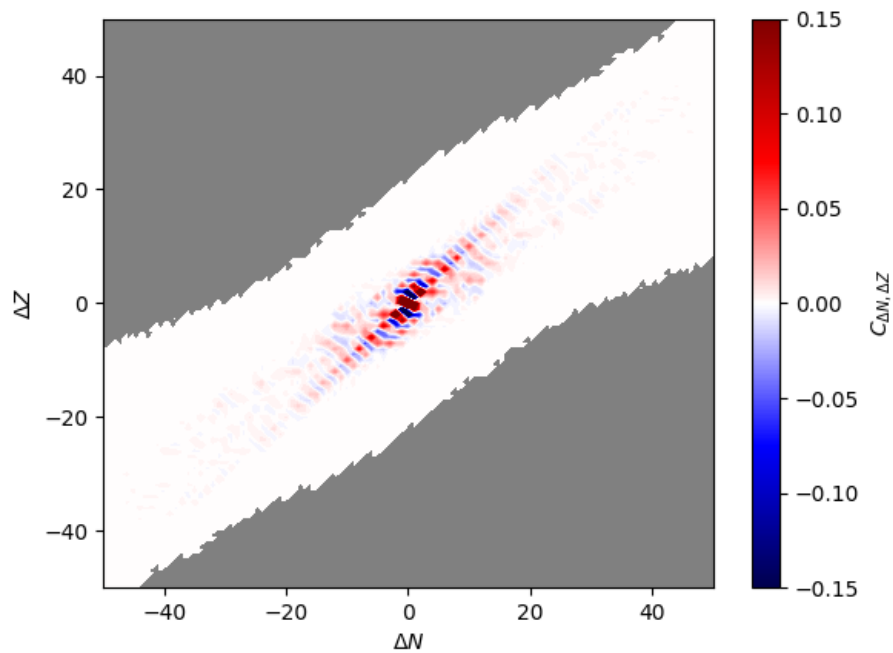
Obr. 2.4: Kontúrový graf reziduálnych hmotností $P(N, Z)$ po aplikácii GK relácie (1.8) v závislosti na N a Z . Farba kontúr charakterizuje veľkosť $P(N, Z)$ v rozsahu od -600 keV do 600 keV.



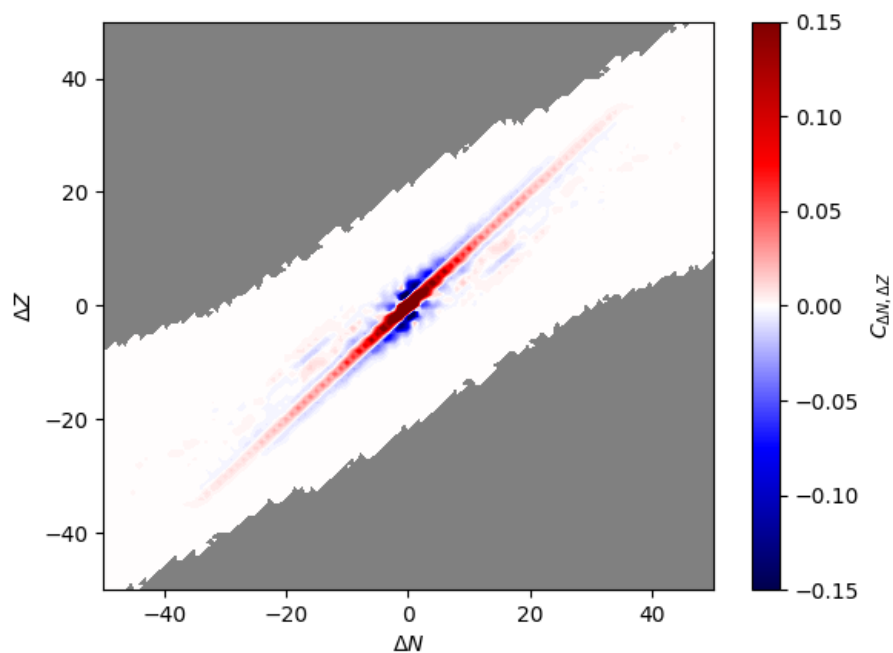
Obr. 2.5: Autokorelačný kontúrový graf závislosti na posunutíach ΔN a ΔZ . Farbou sú vyznačené autokorelačné koeficienty autokorelačnej matice pre Garvey-Kelsonove relácie (1.6) v rozmedzí od -1 do 1.



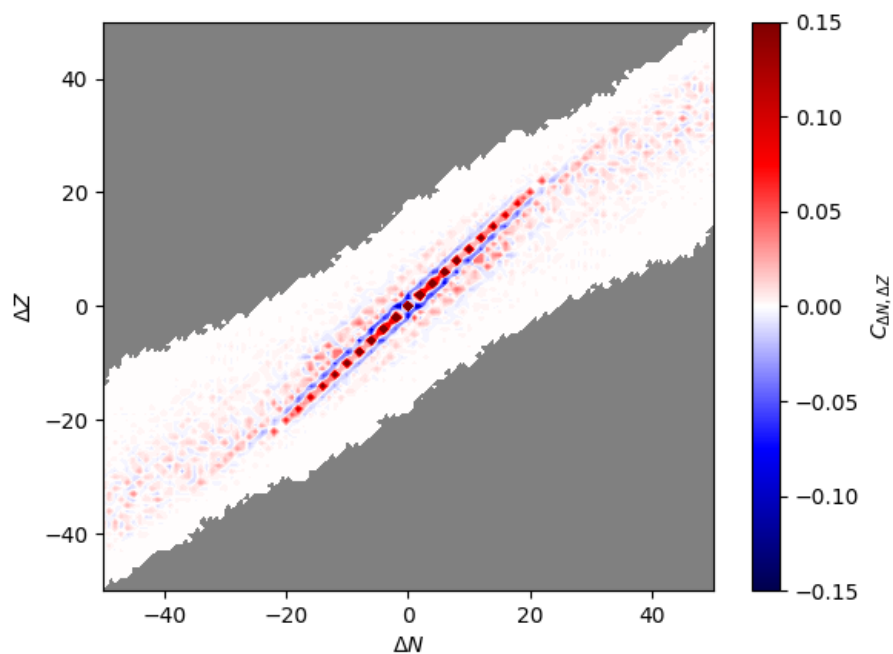
Obr. 2.6: Autokorelačný kontúrový graf závislosti na posunutiach ΔN a ΔZ približený na oblasť 100×100 . Farbou sú vyznačené autokorelačné koeficienty autokorelačnej matice pre Garvey-Kelsonove relácie (1.6) v rozmedzí od -1 do 1.



Obr. 2.7: Autokorelačný kontúrový graf závislosti na posunutiach ΔN a ΔZ približený. Farbou sú vyznačené autokorelačné koeficienty autokorelačnej matice pre Garvey-Kelsonove relácie (1.6) v rozmedzí od -0,15 do 0,15.



Obr. 2.8: Autokorelačný kontúrový graf závislosti na posunutiach ΔN a ΔZ priblížený. Farbou sú vyznačené autokorelačné koeficienty autokorelačnej matice pre Garvey-Kelsonove relácie (1.5) v rozmedzí od -0,15 do 0,15.



Obr. 2.9: Autokorelačný kontúrový graf závislosti na posunutiach ΔN a ΔZ priblížený. Farbou sú vyznačené autokorelačné koeficienty autokorelačnej matice pre Garvey-Kelsonove relácie (1.8) v rozmedzí od -0,15 do 0,15.

čísla: Z_1 a Z_2 . Skoro pre každé fixné Z_i máme niekoľko hodnôt N . Budeme to označovať v súlade s inými článkami ako reťaz izotopov (angl.: isotopic chain) [3]. Toto môžeme vidieť zobrazené na Obr. 2.10, kde môžeme pozorovať tieto dve línie zobrazené prerušovanými horizontálnymi čiarami. Keďže korelácia sa všeobecne počíta vzťahom (1.9) tak by v tomto ilustračnom príklade bola korelácia ρ_{Z_1, Z_2} dvoch fixných línií Z_1 a Z_2 spočítaná vzťahom:

$$\rho_{Z_1, Z_2} = \frac{1}{N_{max}} \sum_{N=1}^{N_{max}} \left[\frac{\left(P(N, Z_1) - \overline{P(Z_1)} \right) \left(P(N, Z_2) - \overline{P(Z_2)} \right)}{\sigma_{Z_1} \sigma_{Z_2}} \right] \quad (2.1)$$

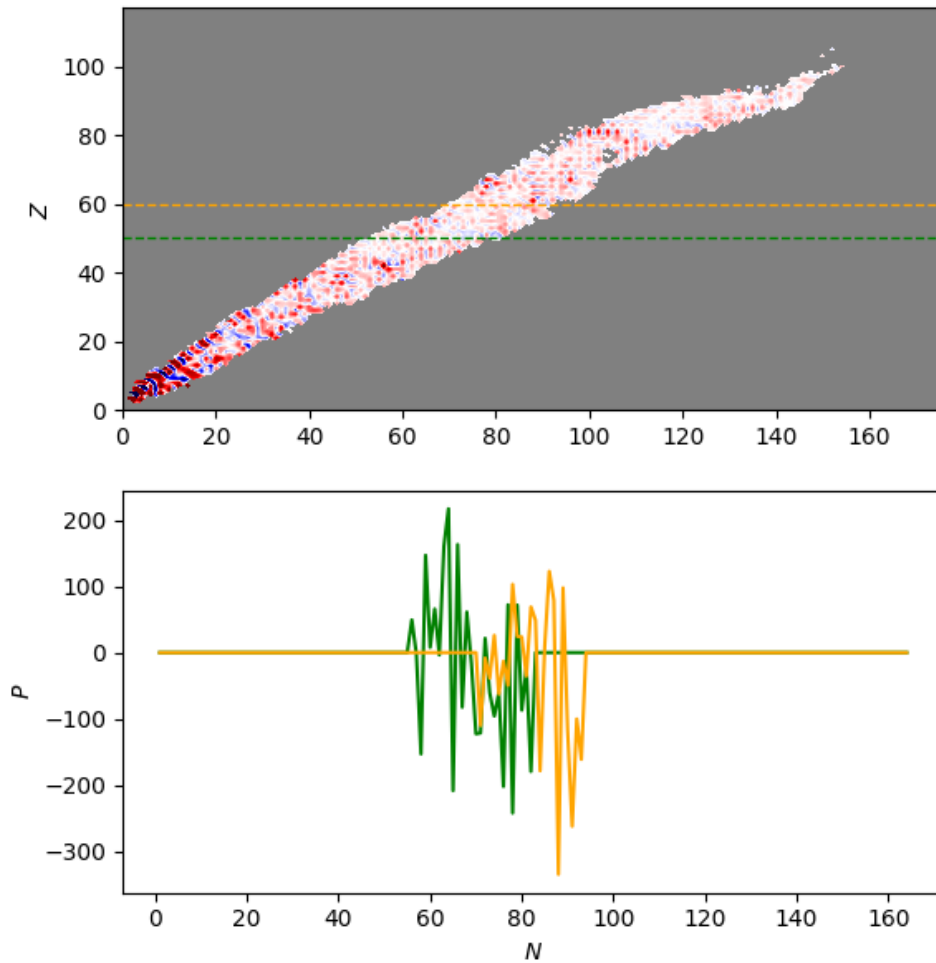
kde $P(N, Z_i)$ budeme označovať ako odchýlku od GK relácie na mieste (N, Z_i) , $\overline{P(Z_i)}$ ako strednú hodnotu v danej línii Z_i a σ_{Z_i} ako štandardnú odchýlku v danej línii. N ide od 0 do N_{max} , teda prechádzame celú reťaz izotopov pre dané Z_i , kde ako N_{max} berieme najväčšie N v našom dátovom súbore, teda pre náš konkrétny dátový súbor jadrových hmotností [17] $N_{max} = 160$. K dôvodu prečo delíme a v sume ideme k práve N_{max} sa vrátíme neskôr.

Jednotlivé elementy korelačnej matice prislúchajúce ρ_{Z_1, Z_2} budeme nazývať korelačné koeficienty. Teraz už nie je ťažké uviesť si, čo budú jednotlivé elementy korelačnej matice reprezentovať. Diagonálne elementy budú rovné ρ_{Z_1, Z_2} , keď $Z_1 = Z_2$. Z tohto a z (2.1) vidíme, že rozmery korelačnej matice budú $Z_{max} \times Z_{max}$. Taktiež je triviálne uviesť si, že bude korelačná matica symetrická, keďže $\rho_{Z_1, Z_2} = \rho_{Z_2, Z_1}$.

Rovnaký myšlienkový proces je možné urobiť s koreláciami pri fixných N , kde dostaneme korelačnú maticu s rozmermi $N_{max} \times N_{max}$.

Vráťme sa teraz ešte k tomu, že v (2.1) delíme celú sumu N_{max} . Toto by sa na prvý pohľad mohlo zdať neprirodzené, keďže žiadny prvok s Z_i nemá izotopov N_{max} , teda pre všetky N , ale má ich špecifický počet pre každú fixnú líniu Z_i ako je jasne vidieť aj z Obr. 2.10. Musíme ale v (2.1) deliť pomocou maximálneho N kvôli nasledujúcim faktom. Vo vzťahu (2.1) vidíme, že od jednotlivých hodnôt $P(N, Z_i)$ vždy odčítavame strednú hodnotu $\overline{P(Z_i)}$ pre dané jadro Z_i . Ale uvedomme si, že pre také N kde $P(N, Z_i)$ nemá hodnotu by bola celková vypočítaná korelácia vzťahom (2.1) nenulová, keďže zjavne v (2.1) odčítavame strednú hodnotu $\overline{P(Z_i)}$ od hodnoty, ktorá keďže nemá hodnotu je v zmysle písania programovacieho kódu nulová. Z tohto dôvodu sa v takýchto prípadoch v štatistike robí to, že sa položia tieto $P(N, Z_i)$, ktoré nemajú hodnotu, rovno strednej hodnote $\overline{P(Z_i)}$. Potom vo vzťahu (2.1) pri odčítavaní dostaneme nulové korelácie tam kde $P(N, Z_i)$ nemá hodnotu. Tento proces je korektný keďže sa pri ňom stredná hodnota $\overline{P(Z_i)}$ reálne nenulových hodnôt samozrejme nezmení pri tom ako v programe pridávame namiesto nulových hodnôt, ktoré nijako k strednej hodnote neprispievali, ďalšie stredné hodnoty $\overline{P(Z_i)}$. Výsledkom bude stále rovnaká stredná hodnota.

Kvôli tomuto ale potom tiež sčítame až do N_{max} keďže sme za nemerané odchýlky $P(N, Z_i)$ dosadili nenulové hodnoty rovné strednej hodnote pre dané Z_i . Z tohto už potom jasne môžeme vidieť, prečo musíme vo vzťahu (2.1) deliť N_{max} .



Obr. 2.10: Graf hore je graf GK relácií (1.6) so zobrazenými líniami fixných $Z_1 = 50$ (zelená) a $Z_2 = 60$ (oranžová) a graf dole je závislosť odchýlky P na neutrónovom čísle N pre rovnaké fixné línie Z_1 a Z_2 ako v grafe hore.

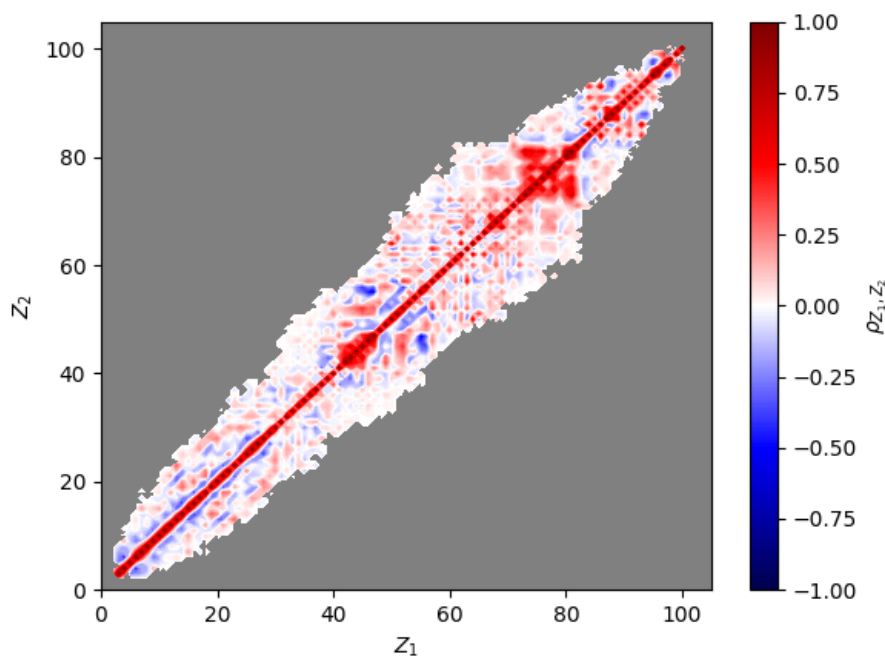
2.3.2 Grafická analýza a diskusia

Keďže máme vzťah pre výpočet koeficientov korelačnej matice (2.1) s fixnými protónovými číslami Z_i , tak môžeme vďaka nemu získať konkrétny tvar korelačnej matice odchýlok od GK relácií. K výpočtu a vykresleniu týchto matíc bol taktiež použitý programovací jazyk Python a knižnica Matplotlib.

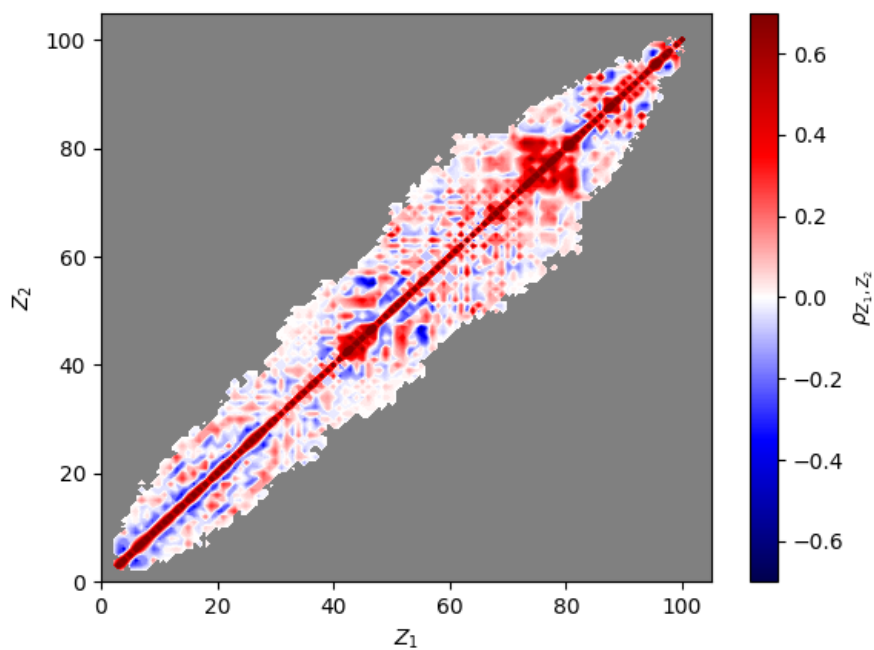
Ako prvé budeme uvažovať korelácie odchýlok s fixnými Z_i , takže počítame korelačnú maticu presne podľa vzťahu (2.1).

Pre GK relácie (1.5) je tvar korelačnej matice zobrazený na Obr. 2.11. Kvôli lepšiemu zobrazeniu detailov korelácií bol urobený rovnaký graf taktiež s menším rozsahom a to na Obr. 2.12.

Na Obr. 2.11 si hlavne všimnime, že diagonálne elementy korelačnej matice (teda prípad kedy $Z_1 = Z_2$) sú skutočne všetky rovné 1. Toto platí pre všetky korelačné matice vypočítané podľa vzťahu (2.1) ako bolo povedané v časti 2.3.1.

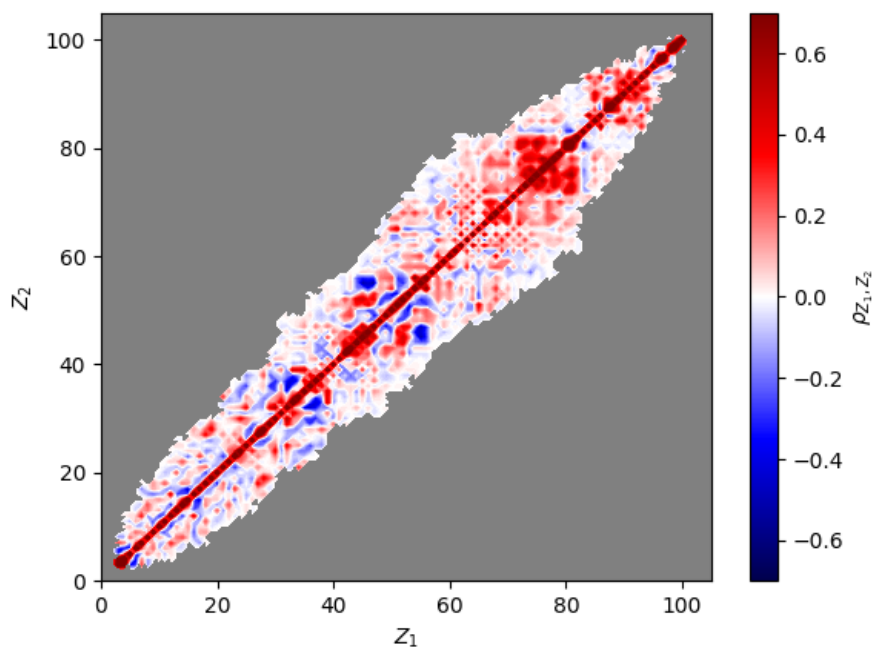


Obr. 2.11: Kontúrový graf korelačnej matice s fixnými Z_i odchýlok od GK relácie (1.5) s rozsahom korelačného koeficientu ρ_{Z_1, Z_2} od -1 do 1.

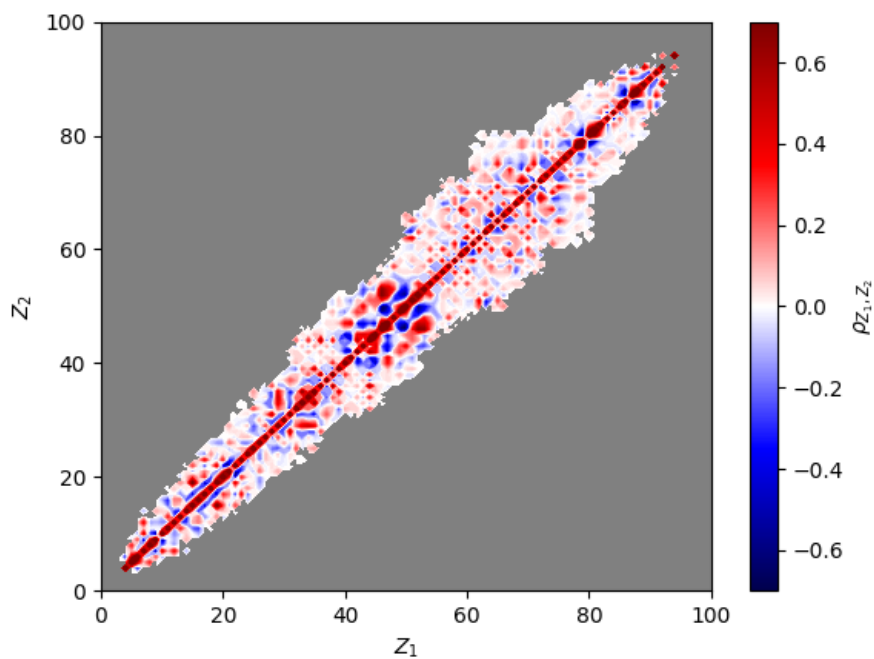


Obr. 2.12: Kontúrový graf korelačnej matice s fixnými Z_i odchýlok od GK relácie (1.5) s rozsahom korelačného koeficientu ρ_{Z_1, Z_2} od -0,7 do 0,7.

Kvôli tomu zobrazujeme aj Obr. 2.11 kde je jasnejšie vidieť hodnoty rovné presne 1 ako pri menších rozsahoch.



Obr. 2.13: Kontúrový graf korelačnej matice s fixnými Z_i odchýlok od GK relácie (1.6) s rozsahom korelačného koeficientu ρ_{Z_1, Z_2} od -0,7 do 0,7.



Obr. 2.14: Kontúrový graf korelačnej matice s fixnými Z_i odchýlok od GK relácie (1.8) s rozsahom korelačného koeficientu ρ_{Z_1, Z_2} od -0,7 do 0,7.

Pre GK relácie (1.6) je vypočítaná príslušná korelačná matica zobrazená na Obr. 2.13 s rozsahom ρ_{Z_1, Z_2} od -0,7 do 0,7.

Nakoniec pre GK relácie (1.8) je korelačná matica na Obr. 2.14 s rozsahom ρ_{Z_1, Z_2} od -0,7 do 0,7.

Môžeme si všimnúť, že skutočne platia vlastnosti korelačnej matice, ktoré sme rozoberali v sekcii 2.3.1 a to, že je symetrická, normalizovaná tak, aby diagonálne elementy boli rovné 1 a taktiež, keď vykonávame korelácie medzi reziduálnymi hmotnosťami s pevnými protónovými číslami Z_i , rozmery korelačnej matice sú $Z_{max} \times Z_{max}$, kde Z_{max} je protónové číslo Z odchýlky od GK relácie s najväčším Z . Je samozrejmé, že teda hodnota Z_{max} bude odlišná pre rôzne GK relácie, keďže na krajoch jadrovej tabuľky nemôžeme použiť GK reláciu ak nemáme dáta všetkých hmotností, ktoré sa používajú v danej GK relácii.

Ako poznámku k Obr. 2.14 k jednému voľnému miestu na diagonále treba dodať, že na tomto mieste chýbali dáta, ktoré sme chceli korelovať. V tomto konkrétnom prípade to bolo spôsobené dierou v grafe Garvey-Kelsonových relácií (1.8). Z rovnakého dôvodu na všetkých grafoch je niekoľko takýchto miest pre najmenšie Z .

Dalej sa chceme pozrieť aj na tvar korelačnej matice kde budeme naopak fixovať línie N_i a prechádzať cez všetky Z od 0 do Z_{max} . Teda vzťah (2.1) sa pri fixných N_i zmení podľa (1.9) na:

$$\rho_{N_1, N_2} = \frac{1}{Z_{max}} \sum_{Z=1}^{Z_{max}} \left[\frac{\left(P(N_1, Z) - \overline{P(N_1)} \right) \left(P(N_2, Z) - \overline{P(N_2)} \right)}{\sigma_{N_1} \sigma_{N_2}} \right] \quad (2.2)$$

Zo vzťahu (2.2) môžeme vypočítať korelačnú maticu pre fixné N_i rôznych GK relácií. Začnime teda GK reláciami (1.5), ktorých korelačnú maticu v tomto prípade môžeme vidieť na Obr. 2.15 s rozsahom korelačných koeficientov ρ_{N_1, N_2} od -1 do 1. Pre GK relácie (1.6) je korelačná matica s fixnými N_i zobrazená na Obr. 2.16 a pre GK relácie (1.8) je v tom istom prípade zobrazená na Obr. 2.17.

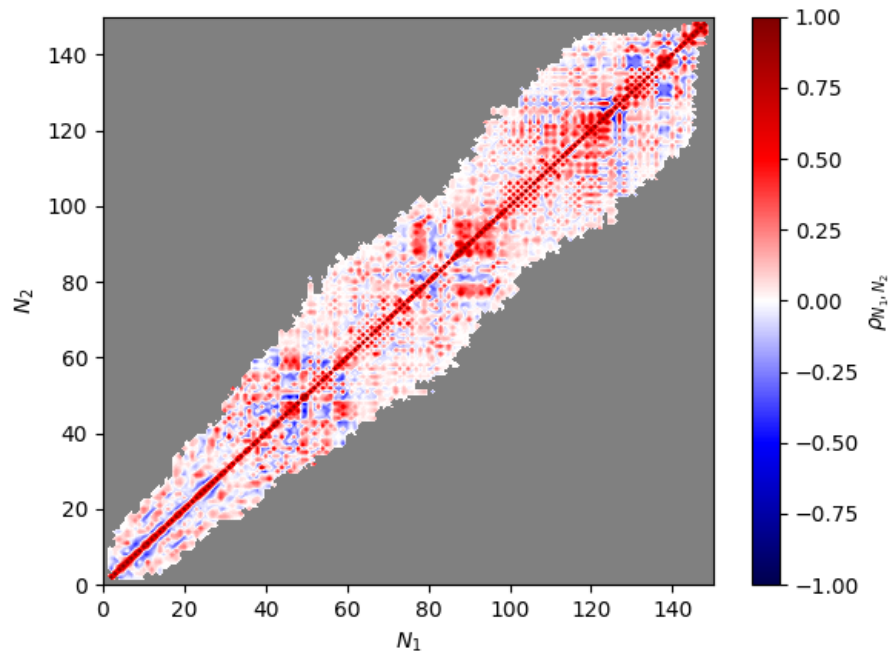
2.4 Analýza hlavných komponentov (PCA)

Pristúpime teraz k ďalšiemu spôsobu analýzy reziduálnych hmotností, a to k analýze hlavných komponentov, tzv. PCA.

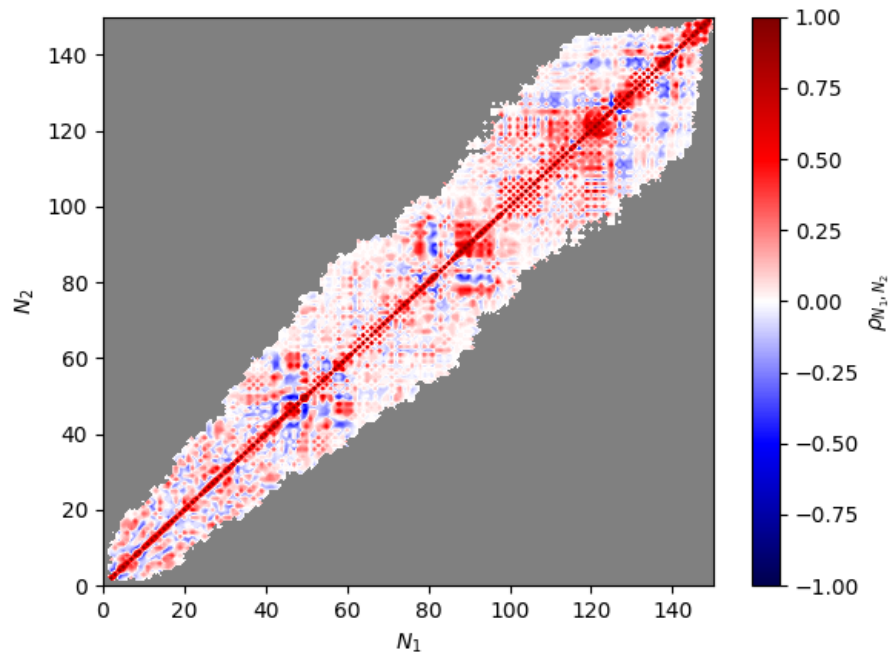
V sekcii 1.4 bolo teoreticky vysvetlené, čo znamená analýza hlavných komponentov a ako tieto hlavné komponenty získať. V jednoduchosti sa dá povedať, že je to úloha na hľadanie vlastných hodnôt a vlastných vektorov korelačných matíc.

Metódou PCA budeme analyzovať korelačné matice, ktoré sme získali v oddieli 2.3.2. Budeme teda hľadať vlastné hodnoty λ_i a vlastné vektory \vec{v}_i korelačných matíc. Ak sa vrátíme k notácii, ktorá bola používaná v 1.4, a ak chceme analyzovať korelačné matice, tak môžeme položiť $\hat{A} := \hat{\rho}_{Z_1, Z_2}$ v prípade korelácií fixných Z_i , resp. $\hat{A} := \hat{\rho}_{N_1, N_2}$ v prípade korelácií fixných N_i .

Hľadáme teda také λ_i a \vec{v}_i , ktoré budú spĺňať maticovú rovnosť (1.14) s tým, že vlastné hodnoty λ_i umiestnime ako diagonálne elementy matice $\hat{\Lambda}$, ako je definovaná v (1.18) a vlastné vektory \vec{v}_i umiestnime ako stĺpce matice \hat{V} definovanej v (1.17). Ak ďalej normalizujeme všetky vlastné vektory podľa podmienky (1.15), tak bolo ukázané, že bude platiť pre korelačné matice rozklad (1.23).

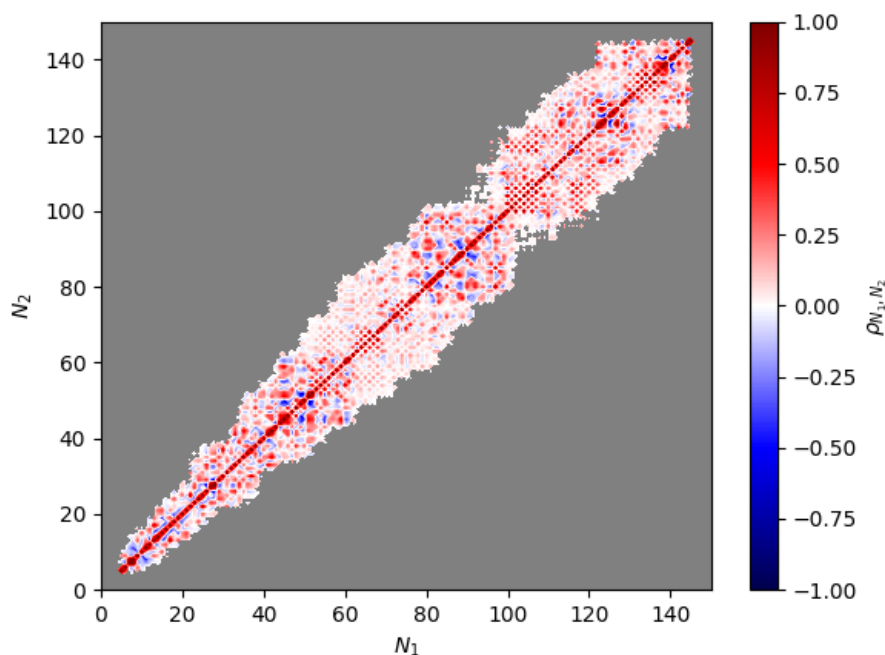


Obr. 2.15: Kontúrový graf korelačnej matice s fixnými N_i odchýlok od GK relácie (1.5) s rozsahom korelačného koeficientu ρ_{N_1, N_2} od -1 do 1.



Obr. 2.16: Kontúrový graf korelačnej matice s fixnými N_i odchýlok od GK relácie (1.6) s rozsahom korelačného koeficientu ρ_{N_1, N_2} od -1 do 1.

Keď máme vypočítané vlastné hodnoty a vlastné vektory korelačných matíc, tak PCA pozostáva už len z rozkladov jednotlivých hlavných komponentov, ako



Obr. 2.17: Kontúrový graf korelačnej matice s fixnými N_i odchýlok od GK relácie (1.8) s rozsahom korelačného koeficientu ρ_{N_1, N_2} od -1 do 1.

je definované v (1.25).

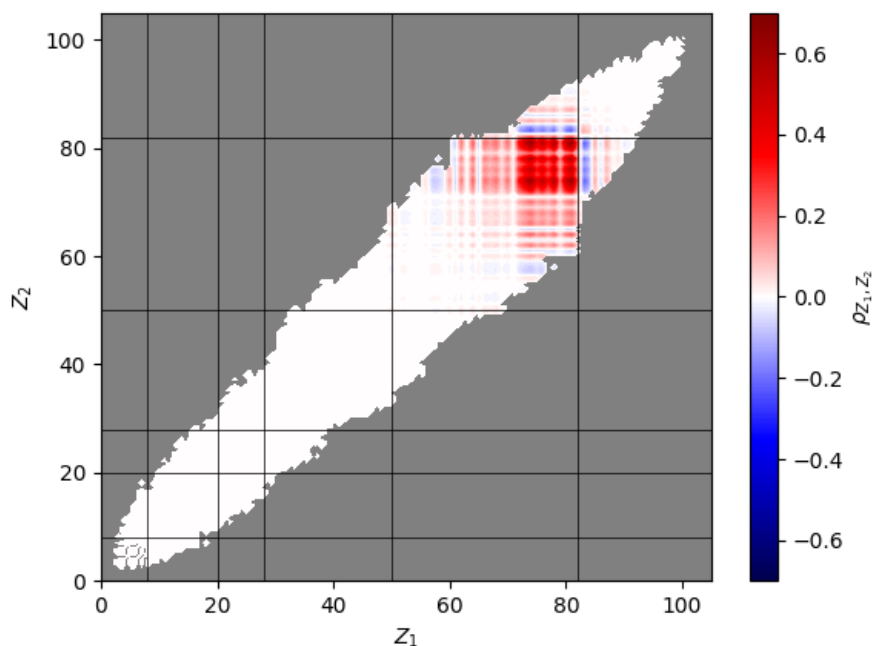
Zoraďme si ešte vlastné hodnoty a im zodpovedajúce vlastné vektory zostupne. Nulové vlastné hodnoty samozrejme uvažovať nebudeme, keďže sú spôsobené chýbajúcimi dátami naviac. Taktiež je triviálne vidieť z (1.25) a štruktúry matice Λ_i , že by nám nulové vlastné hodnoty dali identicky nulový hlavný komponent.

Ako to bolo spomínané v sekcii 1.4, ak máme takto zoradené vlastné hodnoty a vlastné vektory, bude platiť, že hlavné komponenty odpovedajúce najväčším vlastným hodnotám, teda prvým, budú ukazovať najsilnejšie korelácie v korelačnej matici. Budeme teda graficky zobrazovať 3 prvé hlavné komponenty. Taktiež budeme zobrazovať aj matice kumulovaných niekoľko prvých hlavných komponentov, spočítané vzťahom (1.26).

2.4.1 Grafická analýza a diskusia

Pre každú korelačnú maticu, ktorá bola zobrazená v sekcii 2.3.2 boli analyzované hlavné komponenty takým spôsobom ako bolo rozobrané v sekcii 1.4 a v predošlej časti tejto sekcie.

Zoberme si ako prvú korelačnú maticu GK relácie (1.5) s fixnými Z_i , ktorá je zobrazená na Obr. 2.12. Prvý hlavný komponent príslušiaci vlastnému číslu $\lambda_1 = 4,27$ je zobrazený ako kontúrový graf na Obr. 2.18, druhý hlavný komponent $\lambda_2 = 4,03$ na Obr. 2.19 a tretí hlavný komponent $\lambda_3 = 3,53$ na Obr. 2.20. Matica kumulovaných prvých 20 hlavných komponentov vypočítaná vzťahom (1.26) je zobrazená na Obr. 2.21. Na Obr. 2.21 môžeme vidieť, že skutočne už pre prvých 20 vlastných čísel a im zodpovedajúcich hlavných komponentov je veľká podobnosť s pôvodným grafom korelačnej matice Obr. 2.12.



Obr. 2.18: Kontúrový graf prvého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_1 = 4,27$ korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.5).

Ako ďalšiu si môžeme zobrať korelačnú maticu GK relácie (1.6) s fixnými Z_i , ktorá je zobrazená na Obr. 2.13. Prvý hlavný komponent prislúchajúci vlastnému číslu $\lambda_1 = 4,39$ je zobrazený ako kontúrový graf na Obr. 2.22, druhý hlavný komponent $\lambda_2 = 3,91$ na Obr. 2.23 a tretí hlavný komponent $\lambda_3 = 3,63$ na Obr. 2.24.

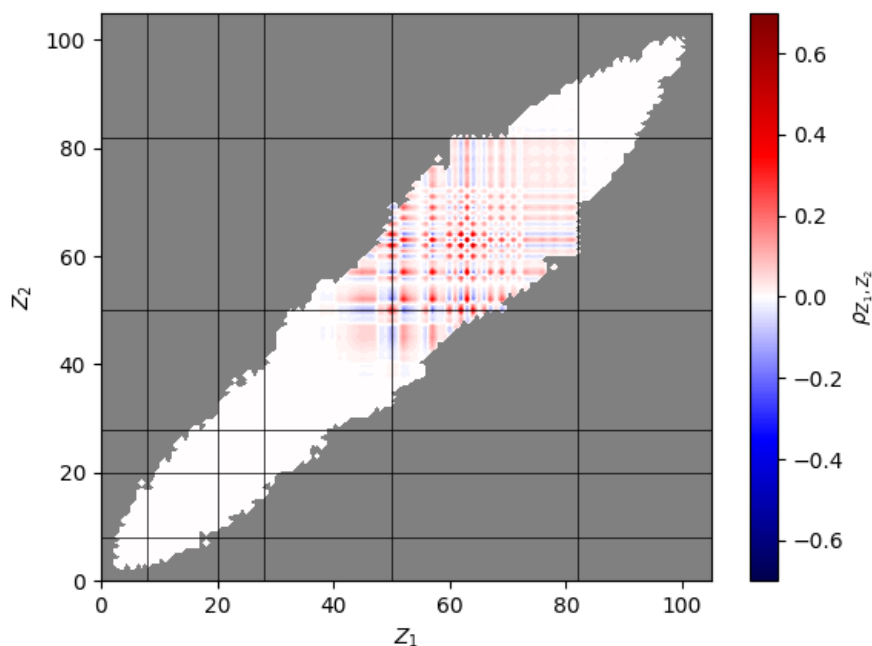
Ako poslednú z korelačných matíc s fixnými Z_i si zoberieme tú pre GK reláciu (1.8), ktorá je zobrazená na Obr. 2.14. Prvý hlavný komponent prislúchajúci vlastnému číslu $\lambda_1 = 4,26$ je zobrazený ako kontúrový graf na Obr. 2.25, druhý hlavný komponent $\lambda_2 = 3,80$ na Obr. 2.26 a tretí hlavný komponent $\lambda_3 = 3,47$ na Obr. 2.27.

Ďalej prejdime ku korelačným maticiam s fixnými N_i . Pre relácie (1.5) je prvý hlavný komponent $\lambda_1 = 8,08$ vykreslený na Obr. 2.28, druhý hlavný komponent $\lambda_2 = 6,09$ na Obr. 2.29 a tretí $\lambda_3 = 5,93$ na Obr. 2.30. Aj v tomto prípade vykresľujeme maticu kumulovaných hlavných komponentov len pre prípad relácie (1.5) a je zobrazená na Obr. 2.31.

Pre relácie (1.6) sú tri prvé hlavné komponenty $\lambda_1 = 8,33$, $\lambda_2 = 6,11$ a $\lambda_3 = 5,71$ na Obr. 2.32, Obr. 2.33 a Obr. 2.34. Nakoniec pre relácie (1.8) sú hlavné komponenty $\lambda_1 = 8,34$, $\lambda_2 = 6,58$ a $\lambda_3 = 5,75$ zobrazené na Obr. 2.35, Obr. 2.36 a Obr. 2.37.

Do všetkých grafov PCA boli v tomto oddieli priložené vertikálne a horizontálne čierne čiary reprezentujúce magické čísla 8, 20, 28, 50, 82 a 126.

Pozrime sa teraz bližšie na konkrétne výsledky, ktoré sme dostali z PCA. Vo všetkých grafoch hlavných komponentov môžeme vidieť, že magické čísla hrajú dôležitú rolu. Hneď na Obr. 2.18 prvého hlavného komponentu môžeme vidieť jasné ohraničenie magickým číslom 82. Taktiež si môžeme všimnúť, že je pri



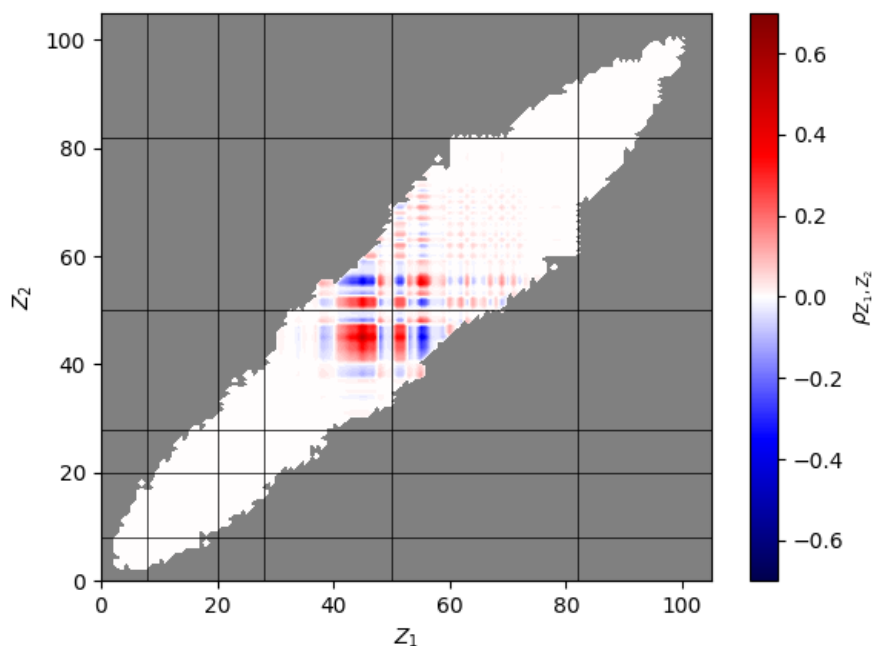
Obr. 2.19: Kontúrový graf druhého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_2 = 4,03$ korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.5).

čísle 82 ostrá zmena z korelácie na antikoreláciu. Veľmi silné ohraničenie korelácií magickými číslami 50 a 82 môžeme vidieť na Obr. 2.19. Celkovo pozorujeme pri hlavných komponentoch korelačnej matice s fixnými Z_i ohraničenie do oblasti medzi magickými číslami 50 a 82 aspoň raz pre každú GK reláciu. Táto špecifická oblasť je približne oblasťou vzácnych zemín, ktoré majú od La po Lu rozmedzie protónového čísla $57 < Z < 71$. To, že sú v tejto oblasti silnejšie korelácie by mohlo byť spôsobené tým, že sa tieto jadrá správajú približne ako deformovaná kvapka. GK relácie ale nevychádzajú z kvapkového modelu jadra alebo z analogických modelov založených na kvapkovom modeli. Ako bolo spomínané v časti 1.1.2, základným východiskom GK relácií je, že sa stredné pole mení pomaly s počtom nukleónov. Pravdepodobne teda v tejto oblasti toto východisko nie je úplne splnené.

Všimnime si, že najväčšie zmeny korelácií nastávajú v okolí magických čísel, resp. keď prekróčíme hranicu magického čísla. Dôvodom je aj tu pravdepodobne narušenie hlavného predpokladu GK relácií a to, že sa stredné pole mení rýchlejšie s počtom nukleónov v okolí magického čísla.

Veľmi zjavné je striedanie korelácie a antikorelácie aj pri výsledkoch PCA. Tento jav bol pozorovaný už priamo v odchýlkach $P(N, Z)$ od GK relácií, kde sa striedali kladné a záporné odchýlky, potom aj v autokorelačnej matici a pozorujeme to aj v hlavných komponentoch. Toto môže byť zapríčinené striedaním párných a nepárných jadier. Aj v Bethe-Weizsäckerovej hmotnostnej formuly hrá striedanie párných a nepárných jadier dôležitú rolu, čo môžeme vidieť z toho aký silný je párovací člen v Bethe-Weizsäckerovej hmotnostnej formuly [6].

Na druhej strane by mohlo striedanie korelácie a antikorelácie byť spôsobené násobením odchýlok v (2.1) a (2.2), keďže hodnota odchýlky môže byť ako kladná,



Obr. 2.20: Kontúrový graf tretieho hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_3 = 3,53$ korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.5).

tak záporná. Dokonca normalizácia (1.10) spôsobuje určitú periodickosť v striedaní kladných a záporných hodnôt [8].

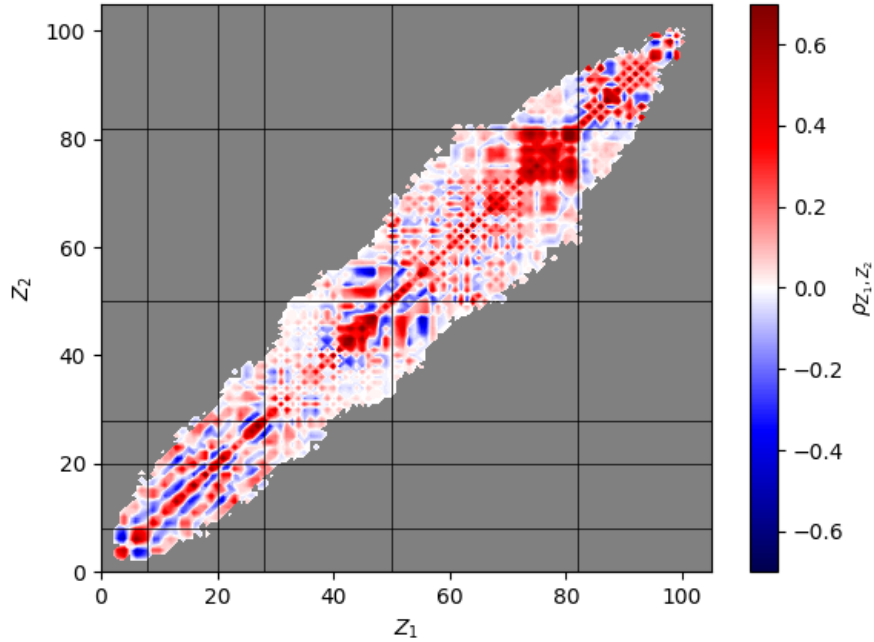
Je dôležité zdôrazniť, že hlavné komponenty, ktoré pozorujeme na kontúrových grafoch nám dávajú informáciu hlavne o lokalizácii korelácií. Nemôžeme diskutovať amplitúdy korelácií, keďže ako bolo povedané v časti 1.2, normalizáciou (1.10) strácame informácie o amplitúdach.

2.5 Spektrálna analýza korelačnej matice

Poslednou analýzou v tejto práci bude analýza spektrálnych korelácií. Budeme používať metódy teórie kvantového chaosu ako boli predstavené v časti 1.5. Začnime predpokladom, že korelačné matice, ktoré boli konštruované v časti 2.3.1 sú Wishartovým súborom a teda pravdepodobnostné rozdelenie vlastných hodnôt spĺňa (1.32).

Ak teda berieme korelačné matice odchýlok GK relácií ako Wishartov súbor, môžeme skúmať pravdepodobnostné rozdelenie vzdialeností najbližších susedov, teda NNSD. Budeme sa pozeráť na to ako dobre NNSD korelačnej matice fituje Wignerovo rozdelenie. Potom môžeme niečo povedať o koreláciách pôvodného signálu, teda konkrétne o koreláciách odchýlok od GK relácií.

NNSD bolo vypočítané v programovacom jazyku Python. Algoritmus k dosiahnutiu NNSD korelačnej matice bol približne taký, ako sme postupne vysvetlili NNSD v časti 1.5. Prvým krokom bolo nájsť vlastných hodnôt, čo sme mali už pripravené z analýzy hlavných komponent (PCA). Ďalej sme odstránili hladkú časť spektra neuvážovaním nulových vlastných hodnôt a polynomiálnym fito-



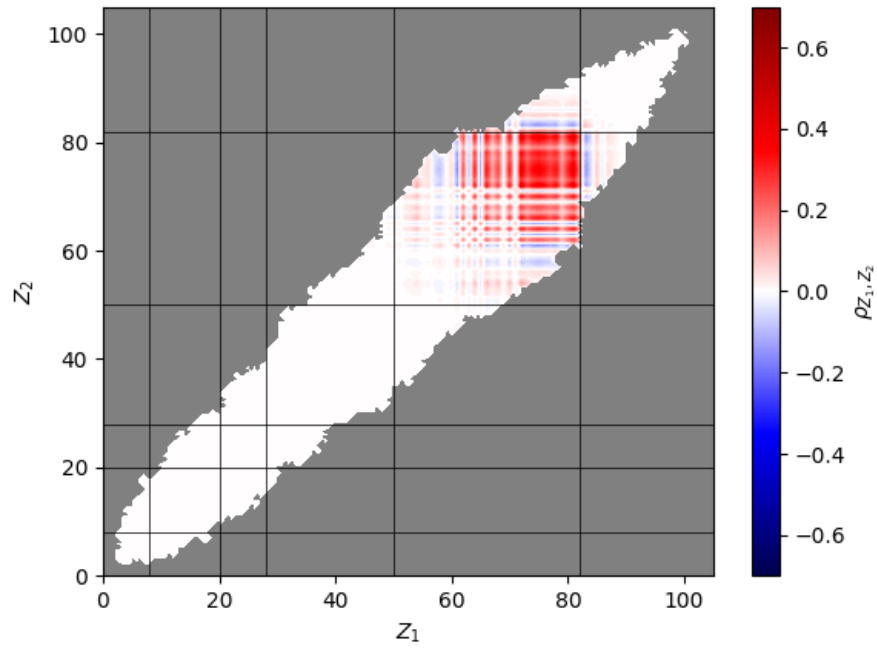
Obr. 2.21: Kontúrový graf kumulovaných prvých 20 hlavných komponentov korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.5).

vaním spektra, teda sme vykonali polynomial unfolding. Následne bolo spektrum normalizované a vypočítaním vzdialeností medzi najbližšími vlastnými hodnotami (hladinami) sme dostali NNSD. NNSD graficky zobrazujeme ako závislosť pravdepodobnosti $p(s)$ na vzdialenostiach s . Finálne sme nafitovali k NNSD korelačnej matice Wignerovo rozdelenie (1.27).

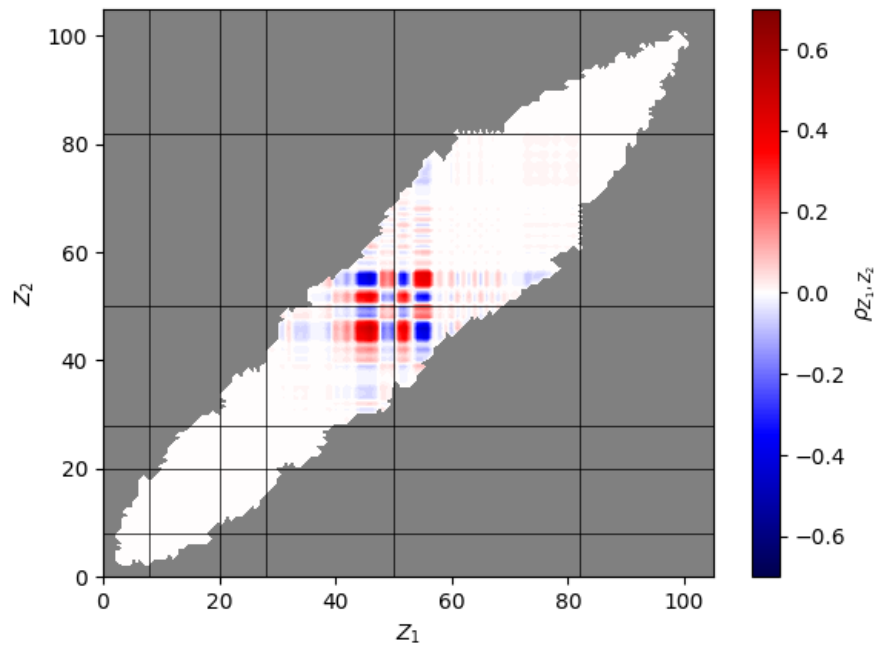
NNSD bolo vypočítané pre korelačné matice odchýlok od všetkých troch GK relácií a pri korelovaní buď podľa Z_i alebo N_i . Histogram NNSD korelačnej matice odchýlok od GK relácie (1.5) s fixnými Z_i je zobrazený na Obr. 2.38 a s fixnými N_i na Obr. 2.39. Pre GK relácie (1.6) máme histogram NNSD korelačnej matice s fixnými Z_i na Obr. 2.40 a s fixnými N_i na Obr. 2.41. Nakoniec histogram NNSD korelačnej matice odchýlok od GK relácie (1.8) s fixnými Z_i je na Obr. 2.42 a s fixnými N_i na Obr. 2.43.

Z výsledných histogramov môžeme povedať, že ani jeden nemá čisto Wignerovské rozdelenie a teda nám to dáva informáciu, že pôvodný signál, z ktorého bola konštruovaná korelačná matice nie je úplne náhodný. To súhlasí aj s predošlými analýzami, kde sme pozorovali medzi odchýlkami GK relácií netriviálne korelácie. Analýza NNSD s Wignerovým rozdelením nám naznačuje podobný záver.

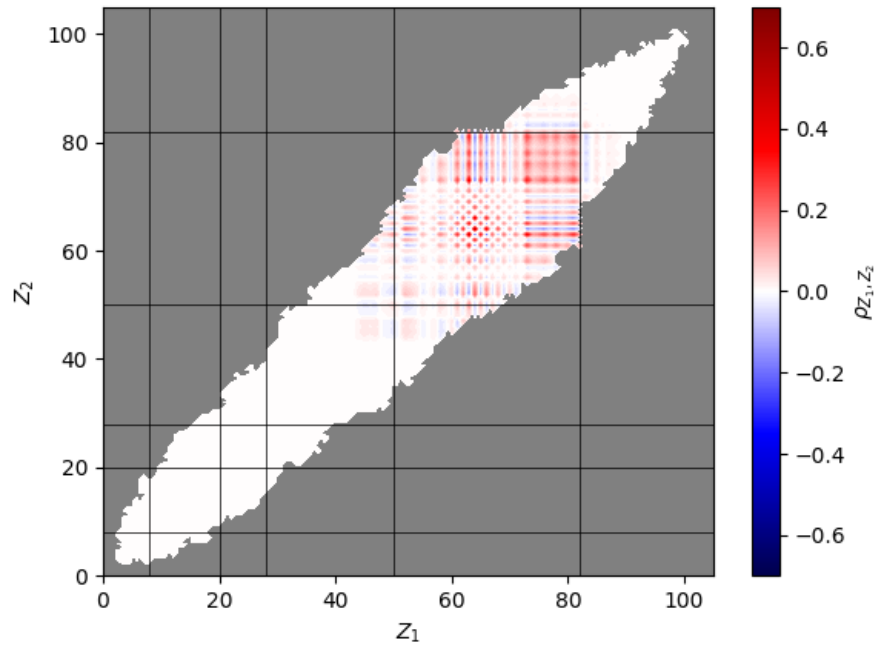
Napriek tomu ale v histogramoch pozorujeme určitú podobnosť s Wignerovým rozdelením. Je zaujímavé, že korelačné matice s fixnými N_i vykazujú značne lepší súhlas s Wignerovým rozdelením ako pri fixných Z_i . Najlepšie je tento rozdiel vidieť pri odchýlkach od GK relácie (1.12). Toto by mohlo byť spôsobené tým, že dimenzia korelačnej matice pri fixných N_i je väčšia ako pri fixných Z_i a teda má väčšie množstvo vlastných hodnôt.



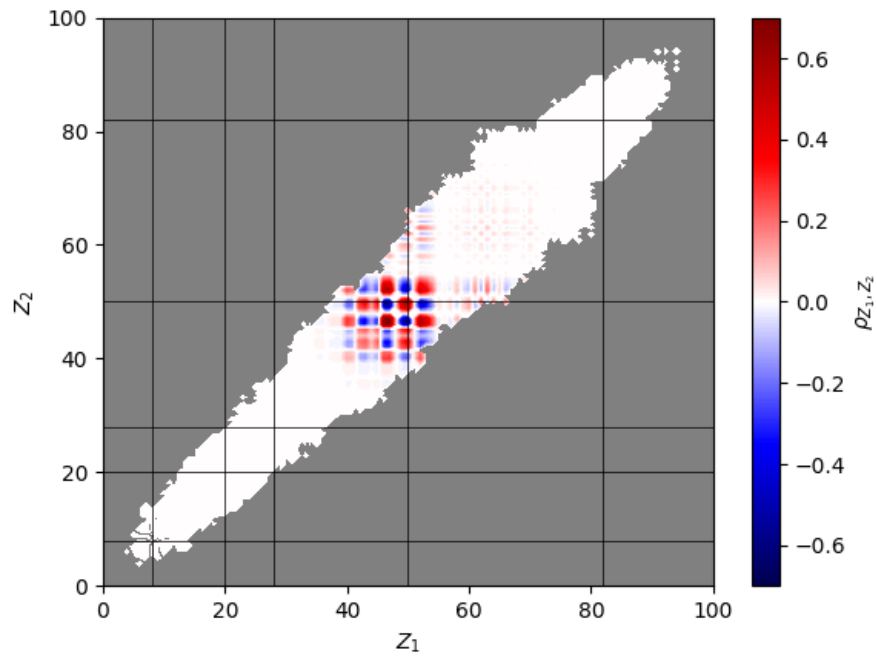
Obr. 2.22: Kontúrový graf prvého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_1 = 4.39$ korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.6).



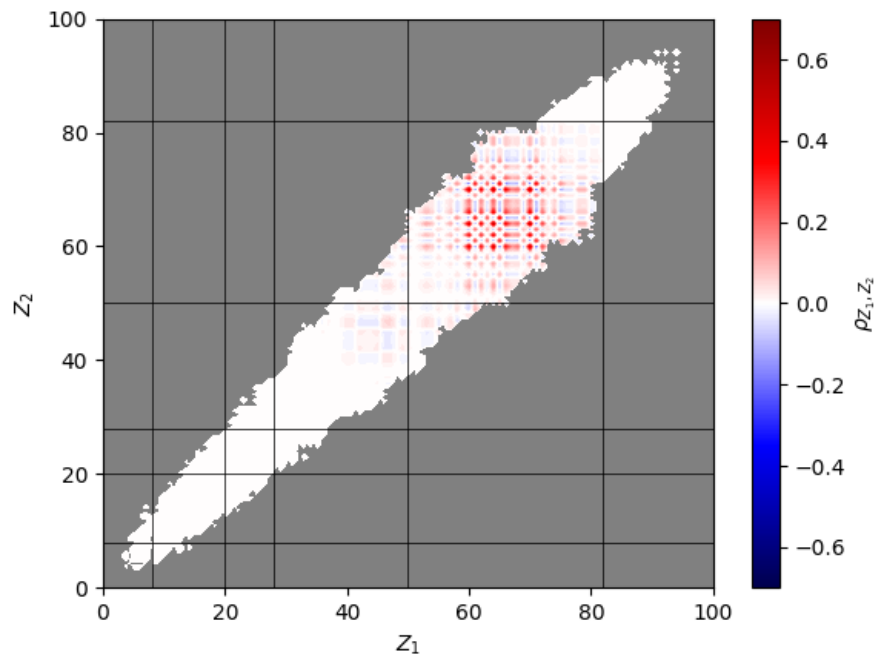
Obr. 2.23: Kontúrový graf druhého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_2 = 3,91$ korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.6).



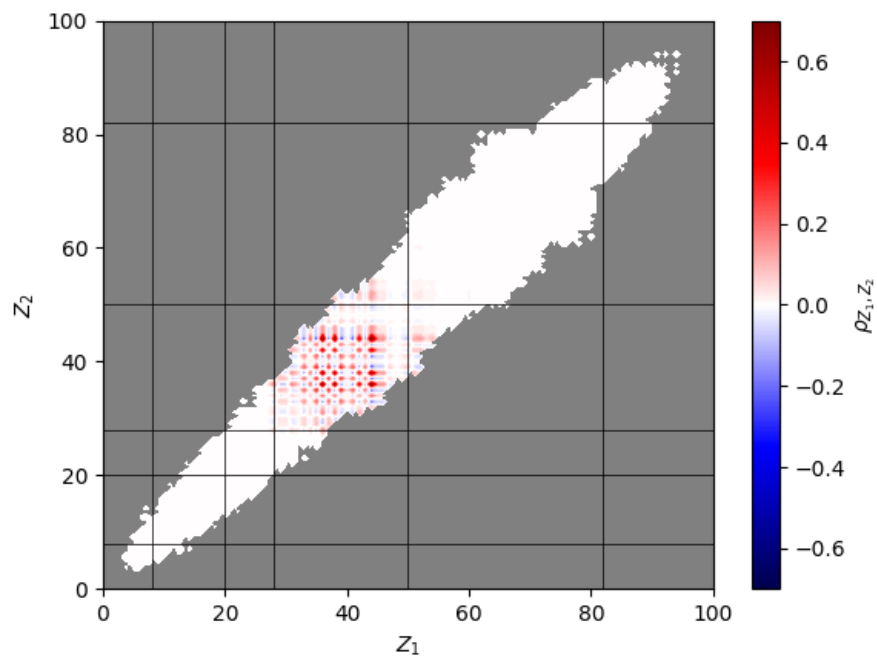
Obr. 2.24: Kontúrový graf tretieho hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_3 = 3,63$ korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.6).



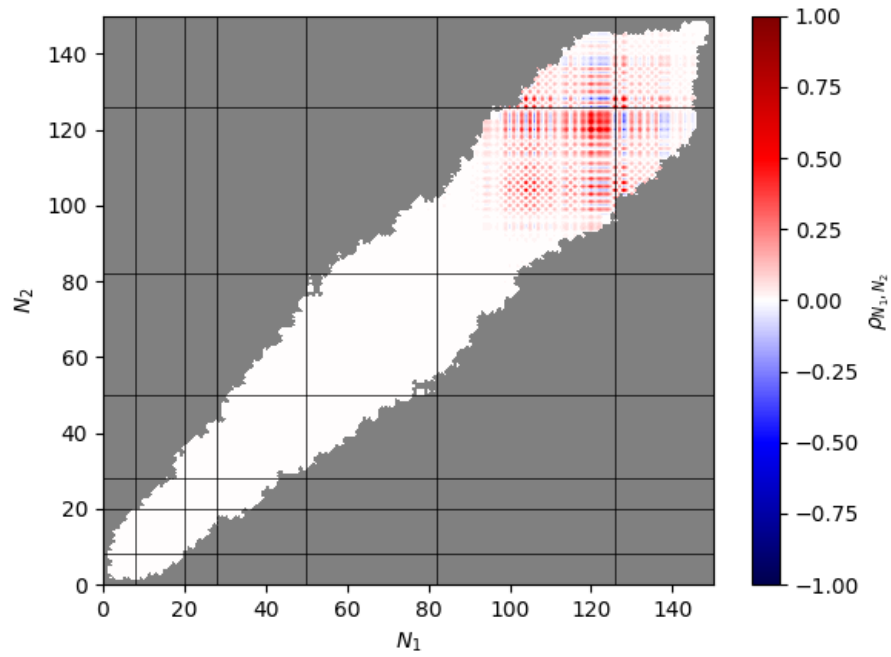
Obr. 2.25: Kontúrový graf prvého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_1 = 4,26$ korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.8).



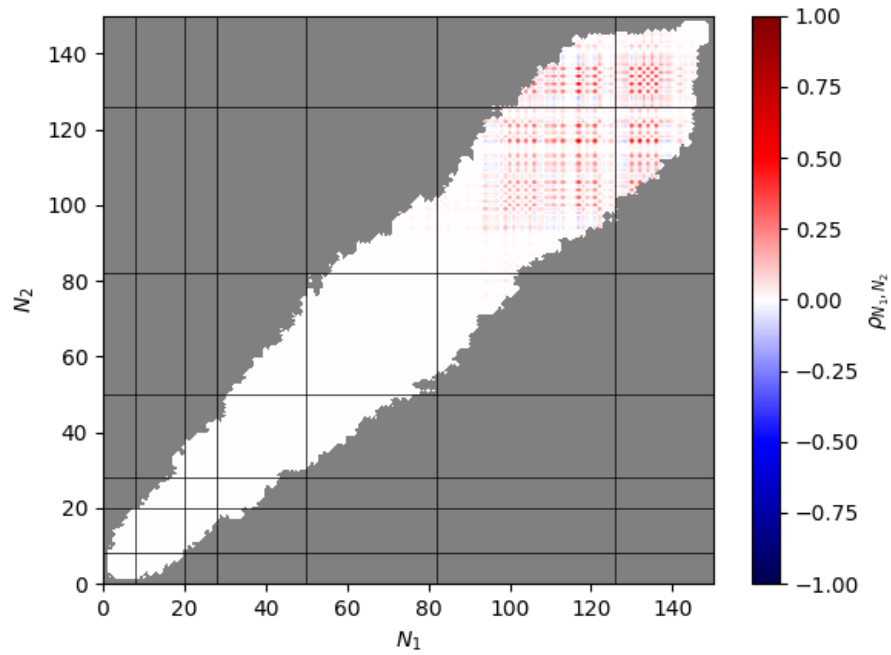
Obr. 2.26: Kontúrový graf druhého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_2 = 3,80$ korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.8).



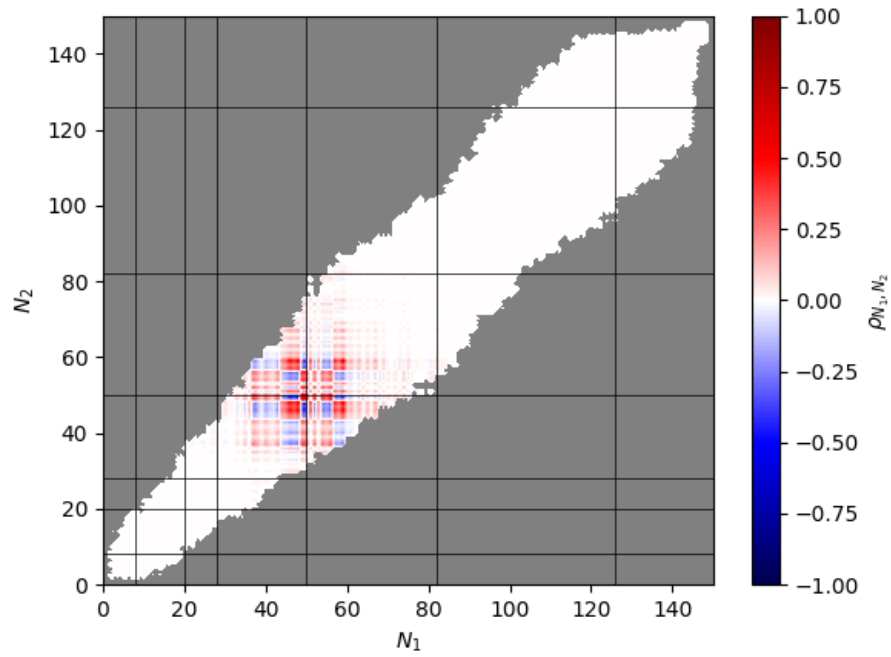
Obr. 2.27: Kontúrový graf tretieho hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_3 = 3,47$ korelačnej matice s fixnými Z_i GK relácie (1.8).



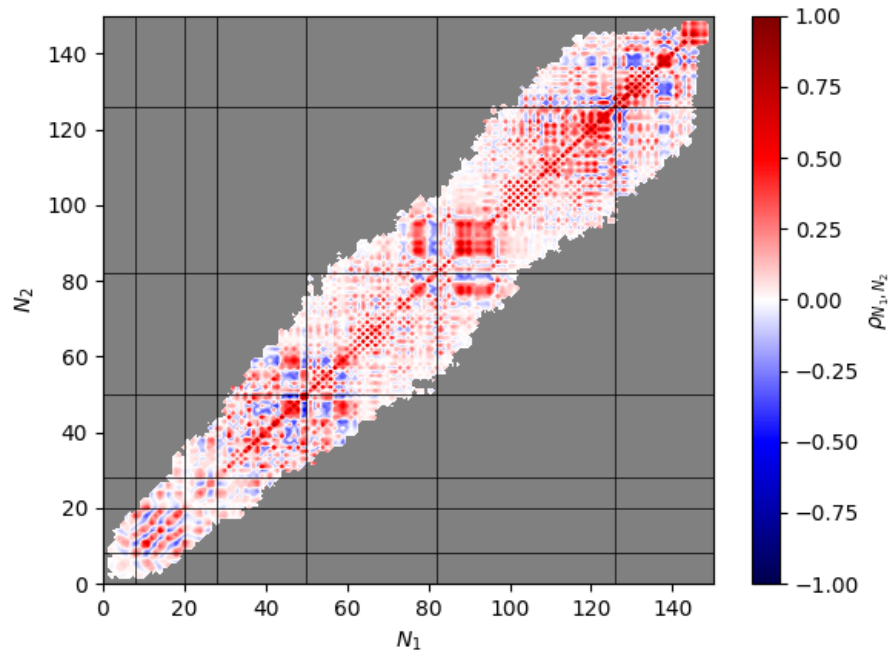
Obr. 2.28: Kontúrový graf prvého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_1 = 8,08$ korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.5).



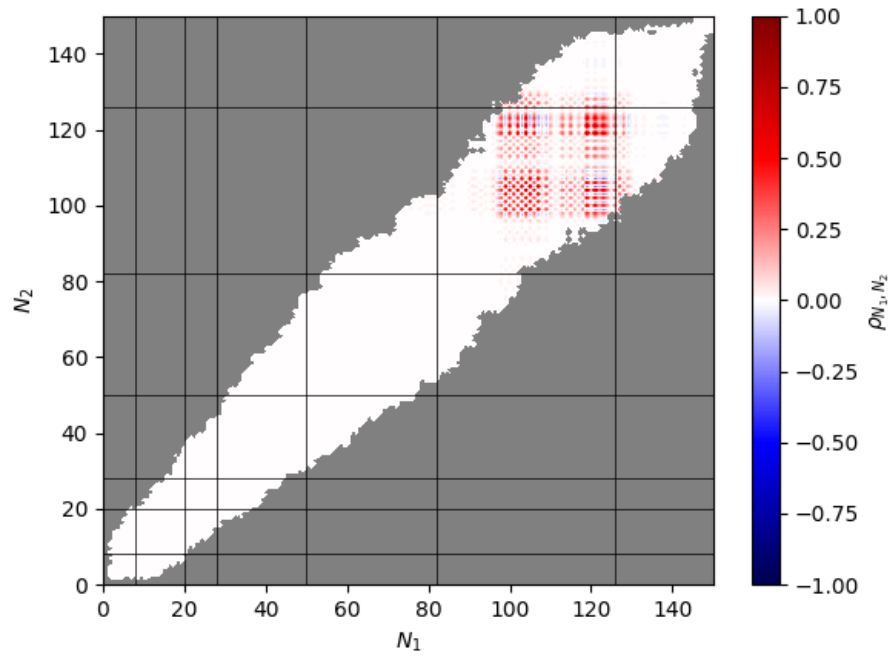
Obr. 2.29: Kontúrový graf druhého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_2 = 6,09$ korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.5).



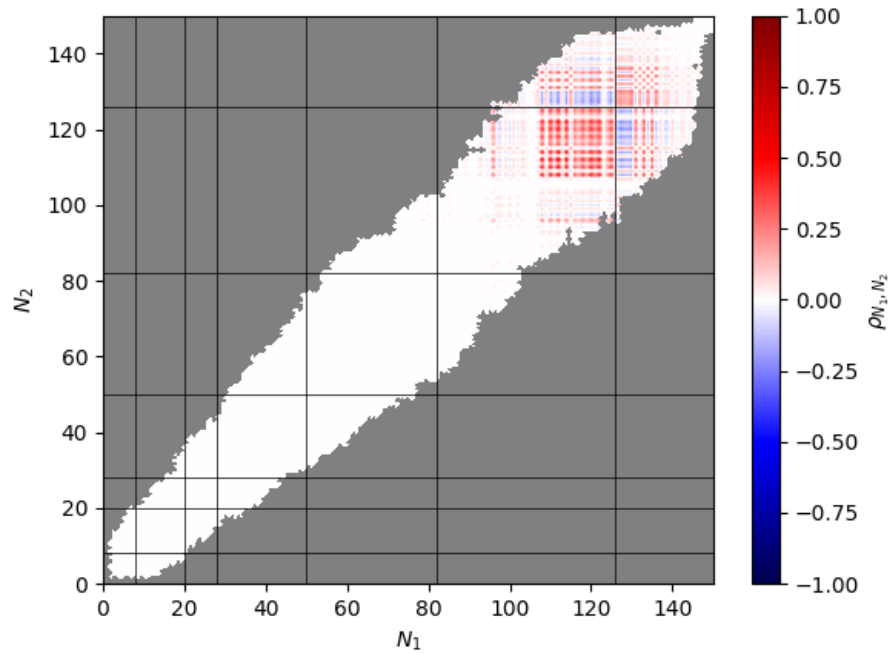
Obr. 2.30: Kontúrový graf tretieho hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_3 = 5,93$ korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.5).



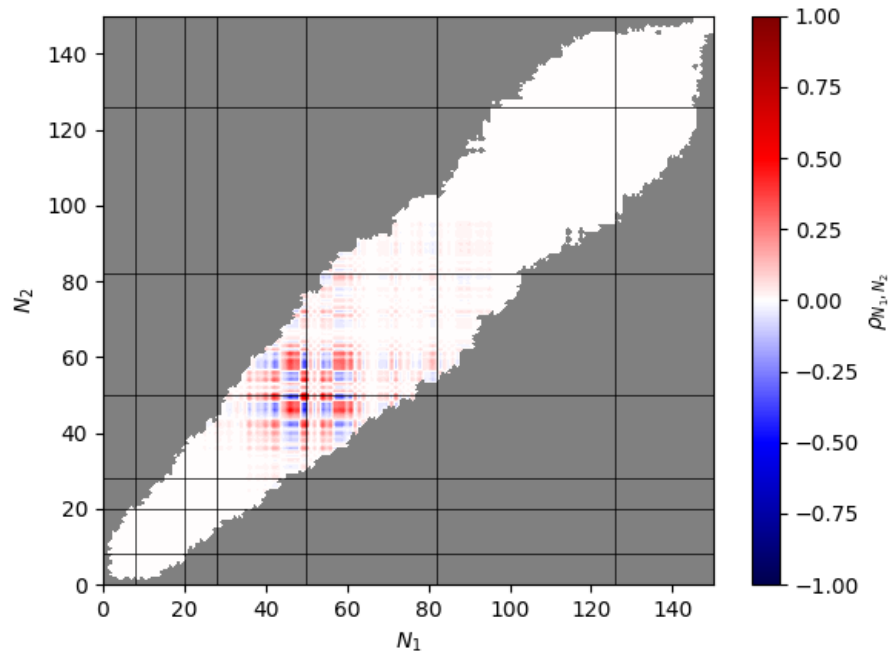
Obr. 2.31: Kontúrový graf kumulovaných prvých 20 hlavných komponentov korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.5).



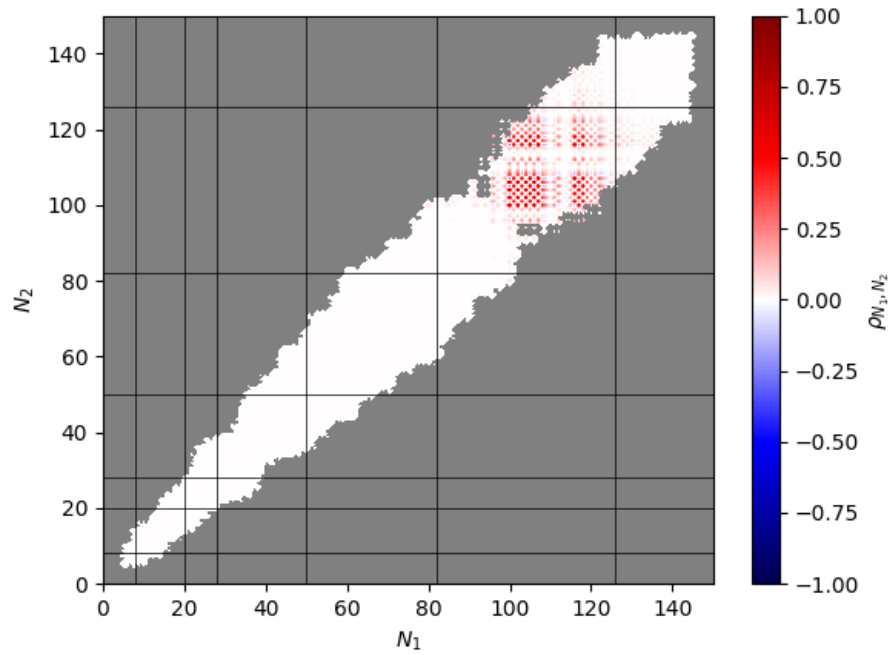
Obr. 2.32: Kontúrový graf prvého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_1 = 8,33$ korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.6).



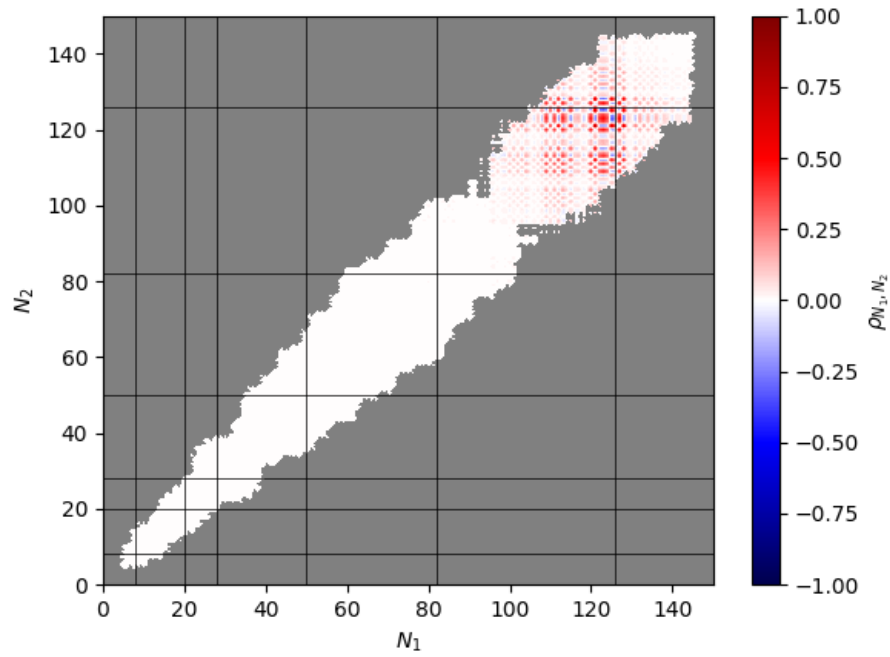
Obr. 2.33: Kontúrový graf druhého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_2 = 6,11$ korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.6).



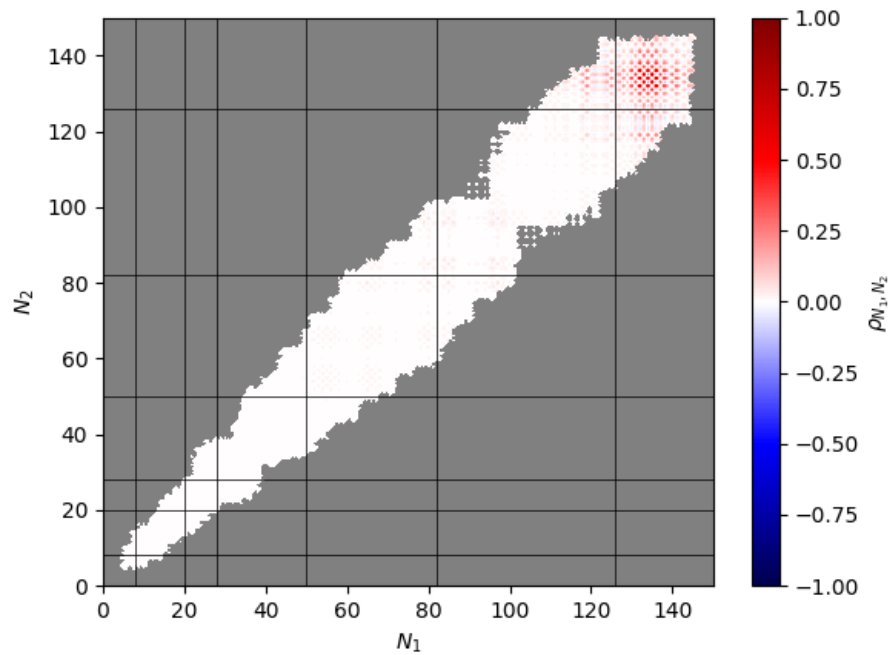
Obr. 2.34: Kontúrový graf tretieho hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_3 = 5,71$ korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.6).



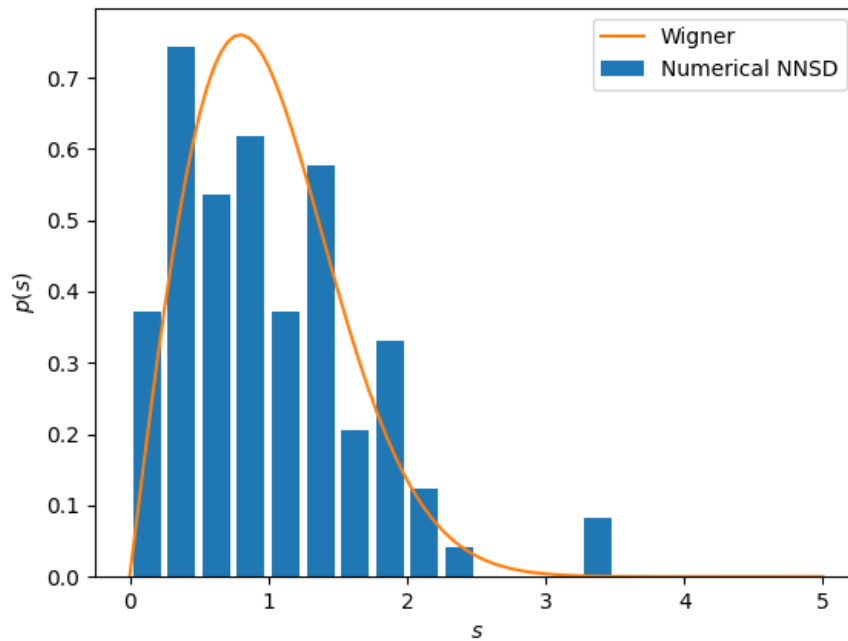
Obr. 2.35: Kontúrový graf prvého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_1 = 8,34$ korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.8).



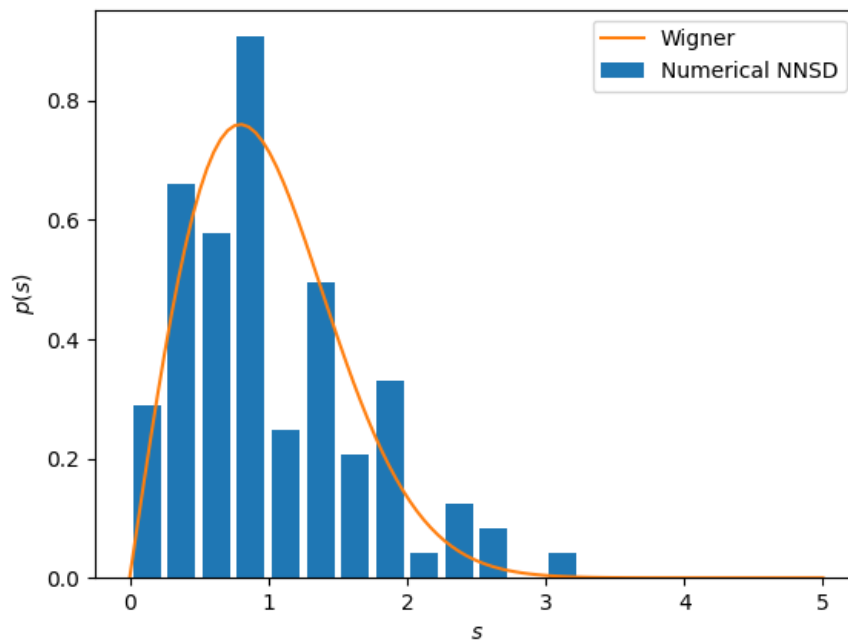
Obr. 2.36: Kontúrový graf druhého hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_2 = 6,58$ korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.8).



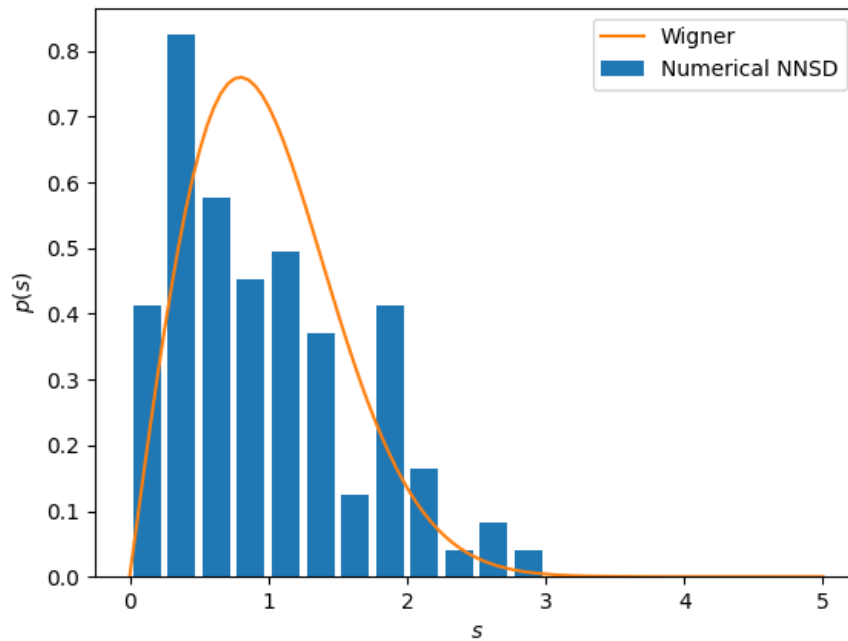
Obr. 2.37: Kontúrový graf tretieho hlavného komponentu prislúchajúceho $\lambda_3 = 5,75$ korelačnej matice s fixnými N_i GK relácie (1.8).



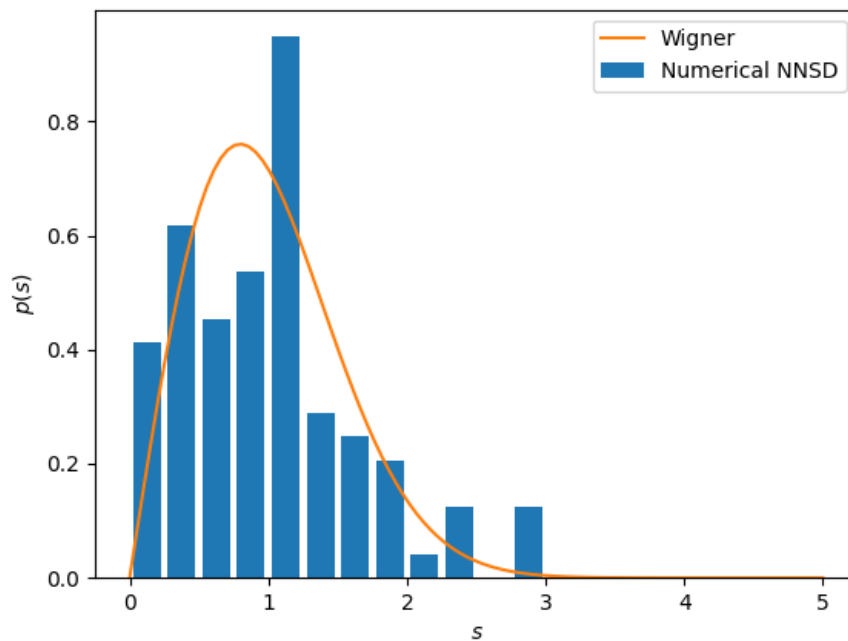
Obr. 2.38: Histogram NNSD korelačnej matice odchýlok od GK relácie (1.5) s fixnými Z_i . Krivka opisujúca histogram vyjadruje fitované Wignerovo rozdelenie.



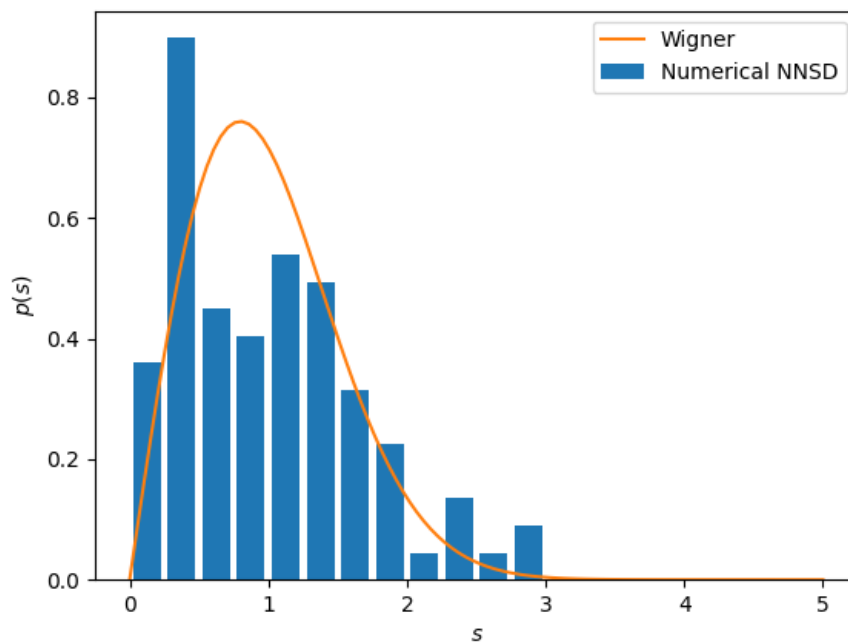
Obr. 2.39: Histogram NNSD korelačnej matice odchýlok od GK relácie (1.5) s fixnými N_i . Krivka opisujúca histogram vyjadruje fitované Wignerovo rozdelenie.



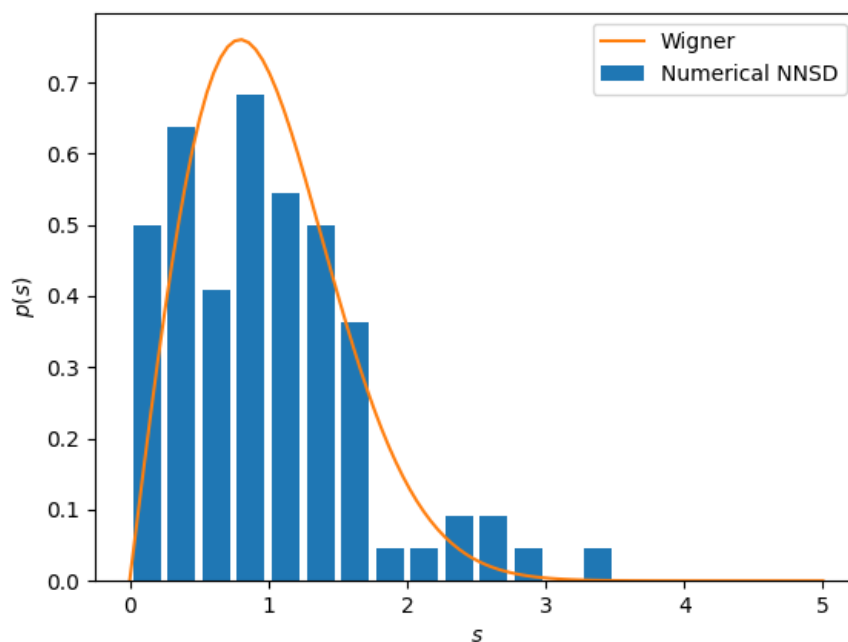
Obr. 2.40: Histogram NNSD korelačnej matice odchýlok od GK relácie (1.6) s fixnými Z_i . Krivka opisujúca histogram vyjadruje fitované Wignerovo rozdelenie.



Obr. 2.41: Histogram NNSD korelačnej matice odchýlok od GK relácie (1.6) s fixnými N_i . Krivka opisujúca histogram vyjadruje fitované Wignerovo rozdelenie.



Obr. 2.42: Histogram NNSD korelačnej matice odchýlok od GK relácie (1.8) s fixnými Z_i . Krivka opisujúca histogram vyjadruje fitované Wignerovo rozdelenie.



Obr. 2.43: Histogram NNSD korelačnej matice odchýlok od GK relácie (1.8) s fixnými N_i . Krivka opisujúca histogram vyjadruje fitované Wignerovo rozdelenie.

Záver

Odchýlky od rôznych moderných globálnych modelov jadrových hmotností vykazujú vlastnosti kvantového chaotického pohybu. Začali sme s hypotézou, že odchýlky od GK relácií zas vykazujú vlastnosti šumu a korelácie medzi týmito odchýlkami sú veľmi slabé.

Hlavným cieľom tejto práce bolo overiť platnosť tohoto tvrdenia, čo znamená, že museli byť podrobne analyzované odchýlky od GK relácií. Analýza bola prevedená použitím niekoľkých štatistických metód.

Ako prvé museli byť vypočítané odchýlky jadrových hmotností od troch variánt GK relácií, ktoré boli v teoretickej časti, v sekcii 1.1 odvodené. Ako vstupné dáta na výpočet odchýlok bola použitá najnovšia kompilácia jadrových hmotností AME2020 [16, 17]. Tvar a obmedzenia odchýlok od všetkých GK relácií bol diskutovaný. Pre GK relácie (1.5) a (1.6) mali odchýlky pre jadrá v oblasti, kde je Z viac ako $Z \approx 40$ veľkosť rádovo do 600 keV a pre GK relácie (1.8) mali odchýlky asi polovičnú veľkosť.

S vypočítanými odchýlkami od GK relácií bolo možné pristúpiť k štatistickým analýzám. Prvou analýzou bola autokorelácia a výpočet autokorelačnej matice. Analýza autokorelačnej matice ukázala netriviálne korelácie medzi blízkymi odchýlkami a veľmi malé, až nulové korelácie mimo malej lokalizovanej oblasti posunutí odchýlok.

Ďalej bola vypočítaná korelačná matica odchýlok od GK relácií buď s fixnými protónovými číslami ρ_{Z_1, Z_2} alebo s fixnými neutrónovými číslami ρ_{N_1, N_2} . Dostali sme takto pre 3 rôzne varianty GK relácií 6 korelačných matíc.

Korelačné matice boli následne podrobnejšie analyzované metódou PCA a metódou spektrálnych korelácií.

Vďaka metóde PCA sme mohli zobrazíť najväčšie korelácie v danej korelačnej matici ako tzv. hlavné komponenty. Pozorovali sme najsilnejšie korelácie v oblastiach: (i) silno deformovaných ťažkých jadier a (ii) okolia magických čísel. Prečo sme pozorovali najsilnejšie korelácie práve v týchto špecifických oblastiach bolo diskutované ako zoslabenie platnosti GK relácií z dôvodu nedodržania ich základného predpokladu, že sa stredné pole nemení so zmenou nukleónového čísla rýchlo.

Štúdiom spektrálnych korelácií korelačných matíc ako matíc z Wishartovho súboru sme sa mohli bližšie pozrieť vďaka metódam charakterizácie kvantového chaosu na veľkosti korelácií odchýlok od GK relácií. Porovnaním pravdepodobnostného rozdelenia spektra korelačnej matice NNSD s pravdepodobnostným rozdelením NNSD kvantového chaotického systému sme nakoniec mohli potvrdiť, že hoci zvyškové korelácie nie sú veľké, odchýlky nie sú úplne náhodné.

Tvrdenie, že korelácie odchýlok GK relácií sú malé bolo teda potvrdené, pričom ale existujú lokalizované oblasti, kde sú korelácie väčšie.

Literatúra

- [1] G.T. Garvey, I. Kelson, *New Nuclidic Mass Relationship*. Phys. Rev. Lett. **16**, 197 (1966).
- [2] G.T. Garvey et al, *Set of Nuclear-Mass Relations and a Resultant Mass Table*. Rev. of Modern Physics **41**, S1 (1969).
- [3] H. Olofsson, S. Åberg, O. Bohigas and P. Leboeuf, *Correlations and chaotic motion in nuclear masses*. Phys. Scr. **T125**, 162 (2006).
- [4] J. Barea, A. Frank, J. G. Hirsch, P. Van Isacker, and V. Velázquez, *Masses of atomic nuclei far from stability*. Eur. Phys. J. Special Topics **150**, 189-192 (2007).
- [5] J. Barea, A. Frank, J. G. Hirsch, P. Van Isacker, S. Pittel, and V. Velázquez, *Garvey-Kelson relations and the new nuclear mass tables*. Phys. Rev. C **77**, 041304(R) (2008).
- [6] S. Mičo, Studentský fakultní grant - *Analýza korelací jaderných hmotností*. [online]. [2021-05-02]. <http://www.pavelstransky.cz/works.php>.
- [7] M. Müller et al, *Detection and characterization of changes of the correlation structure in multivariate time series*. Phys. Rev. E **71**, 046116 (2005).
- [8] M. Müller et al, *Localized short-range correlations in the spectrum of the equal-time correlation matrix*. Phys. Rev. E **74**, 041119 (2006).
- [9] P. Šeba, *Random Matrix Analysis of Human EEG Data*. Phys. Rev. Lett. **91**, 198104 (2003).
- [10] M. Hadavand-Siri, C.V.Deutsch, *Some Thoughts on Understanding Correlation Matrices*. Centre for Computational Geostatistics Annual Report 14 - 2012. University of Alberta, Canada. Paper 408 (2012).
- [11] F. Haake, *Quantum Signatures of Chaos* (Springer, 2010).
- [12] O. Bohigas, M.-J. Giannoni, C. Schmit, *Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws*. Phys. Rev. Lett **52**, 1 (1984).
- [13] E. Wigner, *Characteristic vectors of bordered matrices with many dimensions*. Annals of Mathematics **62**, 548 (1955).
- [14] M. L. Mehta, *Random Matrices* (Elsevier 2004).

- [15] AMDC, *Atomic Mass Evaluation - AME2020*. [online]. [2021-05-02]. <https://www-nds.iaea.org/amdc/>.
- [16] W. J. Huang et al, *The AME 2020 atomic mass evaluation (I). Evaluation of input data, and adjustment procedures*. Chinese Phys. C **45** 030002 (2021).
- [17] Meng Wang et al, *The AME 2020 atomic mass evaluation (II). Tables, graphs and references*. Chinese Phys. C **45** 030003 (2021).