

## ЭКСТРАПОЛЯЦИЯ ЭНЕРГИИ СВЯЗАННОГО СОСТОЯНИЯ В МЕТОДЕ SS-HORSE

© 2019 г. А. М. Широков<sup>1),2),3)</sup>, В. А. Куликов<sup>1),2)\*</sup>, А. И. Мазур<sup>2)</sup>

Поступила в редакцию 25.12.2018 г.; после доработки 25.12.2018 г.; принята к публикации 25.12.2018 г.

В работе предлагается новый метод экстраполяции энергии связанных состояний, полученных в осцилляторном базисе, позволяющий также рассчитывать асимптотические нормировочные коэффициенты. Приводится теоретическое обоснование метода и его апробация в модельной задаче.

DOI: 10.1134/S0044002719040172

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Для расчетов характеристик ядер активно используются подходы *ab initio*, в которых не делается модельных предположений о структуре атомного ядра. Большое количество расчетов *ab initio* различных ядер было проведено методом NCSM (No-Core Shell Model) [1, 2], в котором используется осцилляторный базис модели оболочек. Результаты таких расчетов ограничены мощностью современных суперкомпьютеров и зависят от параметров базиса — числа осцилляторных квантов возбуждения  $N_{\max}$ , связанного с размерностью базиса, и частоты осциллятора  $\hbar\Omega$ .

В методе NCFC (No-Core Full Configuration) [3] зависимость получаемых в оболочечных расчетах энергий от  $N_{\max}$  и  $\hbar\Omega$  используется для предсказания энергии, соответствующей бесконечному базису, и оценки погрешности предсказанного значения. Такая экстраполяция позволяет улучшить описание ядер и, в некоторой степени, обойти ограничения, накладываемые характеристиками существующих суперкомпьютеров. Несколькими коллективами были предложены и другие методы экстраполяции [4–16].

Недавно был предложен метод Single-State Harmonic-Oscillator Representation of Scattering Equations (SS-HORSE) [17–21], в основе которого лежит  $J$ -матричный формализм теории рассеяния в осцилляторном базисе — HORSE [22–26].

Использование SS-HORSE позволяет предсказывать положение резонансов, а в настоящей работе, опираясь на идеи теоретически обоснованного метода SS-HORSE, мы предлагаем его расширение для экстраполяции результатов расчетов энергий связанных состояний в осцилляторном базисе, а также для расчета асимптотических нормировочных коэффициентов (АНК), которые являются важными фундаментальными величинами [27].

В первой части статьи приводится теоретическое обоснование предложенного метода, далее следуют расчеты в модельной задаче и сравнение с методами экстраполяции, предложенными в [3], а также в [4] (с учетом модификации, развитой в [6, 7, 9]).

### 2. S-МАТРИЦА В МЕТОДЕ SS-HORSE

В HORSE [25, 26] волновая функция  $\Psi_{n,l}$  с заданным орбитальным моментом  $l$  разлагается в ряд по базисным функциям,

$$\Psi_{n,l} = \sum_{n=0}^{\infty} A_{nl} \Phi_{nl}, \quad (1)$$

в качестве которых используются  $\Phi_{nl}$  — собственные волновые функции гармонического осциллятора с частотой  $\hbar\Omega$ ,  $n$  — главное квантовое число,  $l$  — орбитальный момент. При этом уравнение Шредингера переходит в систему линейных уравнений для коэффициентов разложения  $A_{nl}$ :

$$\sum_{n'=0}^{\infty} (H_{nn'}^l - \delta_{nn'} E) A_{n'l} = 0, \quad n = 0, 1, \dots \quad (2)$$

Здесь  $H_{nn'}^l = T_{nn'}^l + V_{nn'}^l$  — матричные элементы гамильтониана, кинетической энергии и потенциала в осцилляторном базисе соответственно. Матрица потенциала обрезается при некоем значении

<sup>1)</sup>НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Россия.

<sup>2)</sup>Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск, Россия.

<sup>3)</sup>Department of Physics and Astronomy, Iowa State University, USA.

\*E-mail: kulikov@nucl-th.sinp.msu.ru

главного квантового числа  $n = N$ , то есть принимается условие

$$V_{nn'}^l = \begin{cases} V_{nn'}^l & \text{при } n \leq N \text{ и } n' \leq N; \\ 0 & \text{при } n > N \text{ или } n' > N, \end{cases} \quad (3)$$

а матрица кинетической энергии не обрезается и входит в теорию как бесконечная трехдиагональная матрица. Такой подход оправдан ввиду того, что при больших значениях  $n$  матричные элементы потенциала малы по сравнению с матричными элементами кинетической энергии. В методе HORSE вводятся функции  $C_{nl}^{(-)}(E/\hbar\Omega)$  и  $C_{nl}^{(+)}(E/\hbar\Omega)$ , образующие фундаментальную систему решений для свободного гамильтониана (кинетической энергии) в осцилляторном представлении, аналитические выражения для которых, а также их асимптотические свойства можно найти в [25]. Тогда  $S$ -матрица в общем случае имеет следующий вид (см. [23, 25, 26]):

$$S(E) = \frac{C_{Nl}^{(-)}(E/\hbar\Omega) - \mathcal{G}_{NN} T_{N,N+1}^l C_{N+1,l}^{(-)}(E/\hbar\Omega)}{C_{Nl}^{(+)}(E/\hbar\Omega) - \mathcal{G}_{NN} T_{N,N+1}^l C_{N+1,l}^{(+)}(E/\hbar\Omega)}, \quad (4)$$

где

$$\mathcal{G}_{nn} = - \sum_{\lambda=0}^N \frac{\langle nl|\lambda\rangle\langle\lambda|n'l\rangle}{E_\lambda - E}, \quad (5)$$

$E_\lambda$  — собственные значения обрезанного при  $n = N$  гамильтониана, а  $\langle nl|\lambda\rangle$  — его собственные функции:

$$\sum_{n'=0}^N (H_{nn'}^l - \delta_{nn'} E_\lambda) \langle\lambda|n'l\rangle = 0, \quad (6)$$

$$n = 0, 1, \dots, N.$$

Выражение (4) справедливо для любой энергии  $E$ , в частности для положительной, отрицательной или комплексной. Для энергии связанного состояния (отрицательной) выражение (4) должно иметь полюс (нуль знаменателя). В бесконечном базисе собственным значением гамильтониана будет  $E_b$ , соответствующее данному полюсу.

Выражение (4) справедливо и при энергии  $E = E_\lambda$  какого-либо состояния, полученного в результате диагонализации гамильтониана при данном значении  $\hbar\Omega$  и с данным обрезанием при  $n = N$ . Как было показано в работах [20, 22, 28, 29], точность расчета  $S$ -матрицы при  $E = E_\lambda$  выше, чем в других точках. В этом случае (4) существенно упрощается и принимает вид

$$S(E_\lambda) = \frac{C_{N+1,l}^{(-)}(E_\lambda/\hbar\Omega)}{C_{N+1,l}^{(+)}(E_\lambda/\hbar\Omega)}. \quad (7)$$

Обычно в расчетах получают зависимость энергии от  $\hbar\Omega$  для разного полного числа осцилляторных квантов  $N_{\text{tot}} = 2N + l$ , типичный вид которой приведен на рис. 1. Показанные на рисунке точки соответствуют собственным значениям гамильтониана при известных  $N_{\text{tot}}$  и  $\hbar\Omega$ . Они были получены диагонализацией двухчастичного гамильтониана в состоянии с  $l = 0$  с потенциалом Вудса—Саксона

$$V(r) = \frac{V_{\text{WS}}}{1 + \exp\left(\frac{r - R_{\text{WS}}}{D}\right)}. \quad (8)$$

Параметры потенциала:  $V_{\text{WS}} = -22.0$  МэВ,  $R_{\text{WS}} = 3.080$  Фм,  $D = 0.530$  Фм. Использовалась приведенная масса  $m = 751$  МэВ. С этими параметрами потенциал приводит к появлению в системе одного связанного состояния с энергией  $-7.011$  МэВ.

В работе [4] было показано, что в некотором диапазоне значений  $\hbar\Omega$  и  $N_{\text{tot}}$  энергия будет зависеть только от скейлинговой переменной, являющейся комбинацией этих параметров; в работах [6, 7, 9] было уточнено значение этой переменной. Действительно, если рассмотреть поведение функций  $C_{N+1,l}^{(-)}(E/\hbar\Omega)$  и  $C_{N+1,l}^{(+)}(E/\hbar\Omega)$  при  $N \gg \gg \sqrt{2|E|/(\hbar\Omega)}$  [25], то получим

$$S = \frac{C_{N+1,l}^{(-)}(E/\hbar\Omega)}{C_{N+1,l}^{(+)}(E/\hbar\Omega)} \approx \frac{H_{l+\frac{1}{2}}^{(2)}\left(2\sqrt{N_{\text{tot}} + \frac{7}{2}}\sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}}\right)}{H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}\left(2\sqrt{N_{\text{tot}} + \frac{7}{2}}\sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}}\right)}, \quad (9)$$

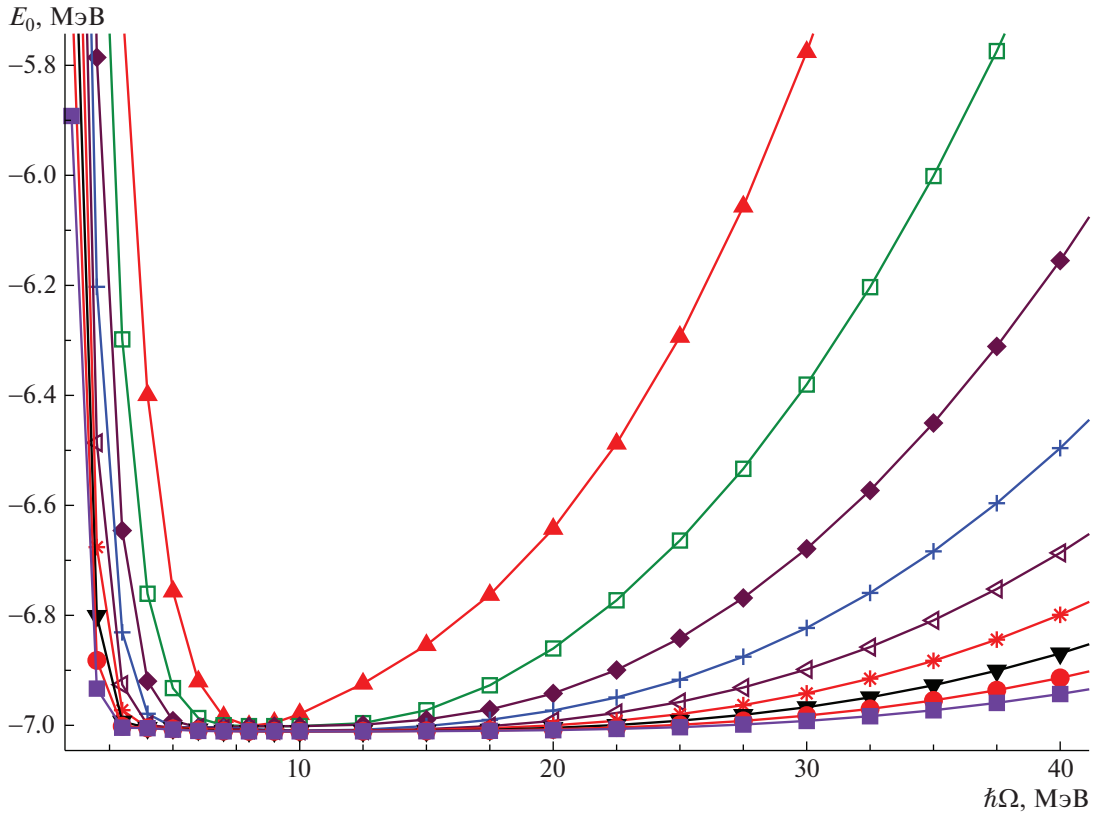
где через  $H_{l+\frac{1}{2}}^{(1)}(x)$  и  $H_{l+\frac{1}{2}}^{(2)}(x)$  обозначены функции Ханкеля первого и второго рода соответственно. Из (9) видно, что при достаточно большом  $N_{\text{tot}}$   $S$ -матрица зависит от комбинации

$$s = \frac{\hbar\Omega}{N_{\text{tot}} + \frac{7}{2}}, \quad (10)$$

а не от  $\hbar\Omega$  и  $N_{\text{tot}}$  по отдельности. В дальнейшем  $s$  будем называть скейлинговым параметром в соответствии с работами [4, 6].

Отметим, что метод SS-HORSE работает только при  $\frac{dE_\lambda}{d\hbar\Omega} > 0$  [17], поэтому из рассмотрения надо исключить точки, лежащие левее минимума кривой для каждого значения  $N_{\text{tot}}$  на рис. 1.

Для иллюстрации монотонной зависимости  $S$ -матрицы от скейлинга и от энергии возьмем тот же потенциал (8), что использовался для построения рис. 1. На рис. 2 показана зависимость логарифма  $S$ -матрицы при  $E = E_{\lambda=0}$  от скейлингового параметра  $s$ . Из рис. 2а видно, что большая часть точек, за исключением области малых значений



**Рис. 1.** Зависимость энергии нижайшего состояния  $E_0$  от  $\hbar\Omega$  для разных значений  $N_{\text{tot}}$ :  $\blacktriangle$  —  $N_{\text{tot}} = 4$ ,  $\square$  —  $N_{\text{tot}} = 6$ ,  $\blacklozenge$  —  $N_{\text{tot}} = 8$ ,  $\times$  —  $N_{\text{tot}} = 10$ ,  $\blacktriangleleft$  —  $N_{\text{tot}} = 12$ ,  $*$  —  $N_{\text{tot}} = 14$ ,  $\blacktriangledown$  —  $N_{\text{tot}} = 16$ ,  $\bullet$  —  $N_{\text{tot}} = 18$ ,  $\blacksquare$  —  $N_{\text{tot}} = 20$ . На остальных рисунках результаты диагонализации гамильтониана обозначены так же.

скейлингового параметра, которые соответствуют энергиям  $E_0$ , лежащим левее минимума их зависимости от  $\hbar\Omega$ , образуют общую кривую, как и должно быть в соответствии с формулой (9) и работами [4, 6]. Тогда, если оставить только точки, для которых  $\frac{dE_0}{d\hbar\Omega} > 0$ , то они будут лежать на общей кривой, как показано на рис. 2б. В этом случае мы можем параметризовать  $S$ -матрицу, чтобы в конечном итоге зафиксировать ее полюс и тем самым найти энергию, соответствующую этому полюсу, уже не зависящую от параметров  $N_{\text{tot}}$  и  $\hbar\Omega$ .

### 3. ПАРАМЕТРИЗАЦИЯ $S$ -МАТРИЦЫ

Рассмотрим теперь возможные способы параметризации  $S$ -матрицы на мнимой оси импульсов. Можно выписать выражение для  $S$ -матрицы, учитывающее наличие  $n_b$  связанных состояний с импульсом  $k = i\kappa_b$ , где  $\kappa_b = \sqrt{\frac{2m|E_b|}{\hbar^2}}$ ,  $n_f$  ложных полюсов ( $k = i\kappa_f$ ),  $n_v$  виртуальных состояний ( $k = -i\kappa_v$ ) и  $n_r$  резонансов ( $k = k_r + i\gamma$ ) [30]:

$$S(E) = e^{-2\varphi(\kappa)} \prod_{i=1}^{n_b} \left( \frac{\kappa + \kappa_b^i}{\kappa_b^i - \kappa} \right) \prod_{i=1}^{n_f} \left( \frac{\kappa + \kappa_f^i}{\kappa_f^i - \kappa} \right) \times \quad (11)$$

$$\times \prod_{i=1}^{n_v} \left( \frac{\kappa_v^i - \kappa}{\kappa + \kappa_v^i} \right) \prod_{i=1}^{n_r} \left( \frac{(\kappa - \gamma^i)^2 + (k_r^i)^2}{(\kappa + \gamma^i)^2 + (k_r^i)^2} \right),$$

здесь для сохранения свойств симметрии  $S$ -матрицы  $\varphi(\kappa)$  — нечетная функция  $\kappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}$ .

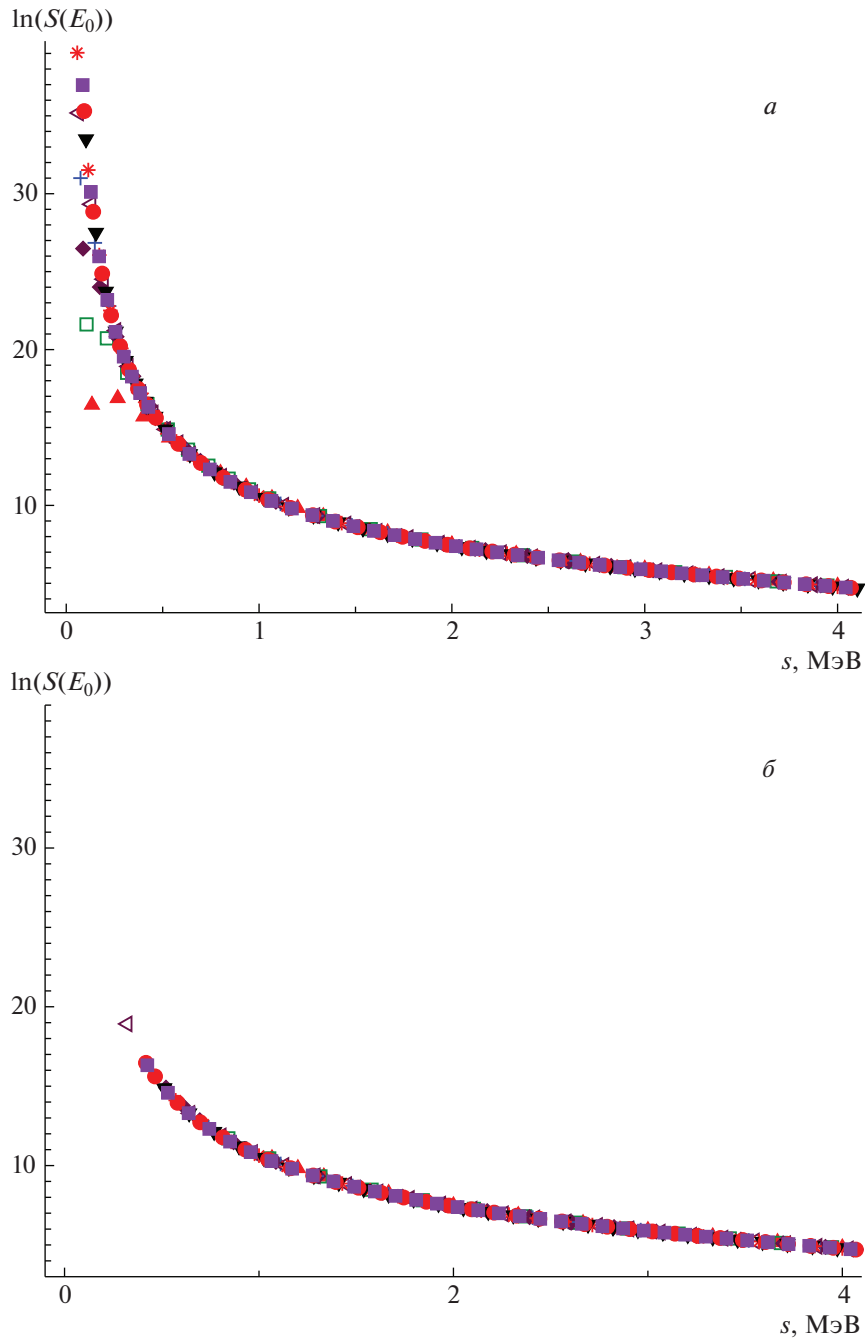
Если учесть соотношение  $\text{arth}(z) = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+z}{1-z} \right)$ , справедливое при  $|z| < 1$ , то при  $\kappa^2 \leq \kappa_f^2$  и  $\kappa^2 \leq \kappa_v^2$ , т.е. когда энергия  $E$  ближе к нулю, чем особенности типа ложного полюса или виртуального состояния, данную формулу можно переписать в виде

$$S(E) = e^{-2\varphi(\kappa)} \times \quad (12)$$

$$\times \exp \left( 2 \sum_{i=1}^{n_b} \text{arth} \left( \frac{\kappa}{\kappa_b^i} \right) + 2 \sum_{i=1}^{n_f} \text{arth} \left( \frac{\kappa}{\kappa_f^i} \right) \right) \times$$

$$\times \exp \left( 2 \sum_{i=1}^{n_v} \text{arth} \left( -\frac{\kappa}{\kappa_v^i} \right) - \right.$$

$$\left. - 2 \sum_{i=1}^{n_r} \text{arth} \left( \frac{2\kappa\gamma^i}{\kappa^2 + (k_r^i)^2 + (\gamma^i)^2} \right) \right).$$



**Рис. 2.** Зависимость логарифма  $S$ -матрицы от величины  $s$ : результаты диагонализации для различных модельных пространств (а), отобранные точки для параметризации  $S$ -матрицы, удовлетворяющие условию  $\frac{dE_0}{d\hbar\Omega} > 0$  (б).

Разложив в ряд  $\text{arth}(z)$  и учитывая (7) и определение  $\varkappa_\lambda = \sqrt{\frac{2m|E_\lambda|}{\hbar^2}}$ , для параметризации  $S$ -матрицы получим

$$= \left( \frac{\sqrt{|E_b|} + \sqrt{|E_\lambda|}}{\sqrt{|E_b|} - \sqrt{|E_\lambda|}} \right) \times \exp \left( R\sqrt{|E_\lambda|} + F(\sqrt{|E_\lambda|})^3 + \dots \right).$$

$$\frac{C_{N+1,l}^{(-)}(E_\lambda/\hbar\Omega)}{C_{N+1,l}^{(+)}(E_\lambda/\hbar\Omega)} = \quad (13)$$

Если между интересующим нас связанным состоянием и нулем лежит еще одно связанное состояние, то следует учитывать в явном виде как полюс, связанный с этим состоянием, так и расположенный

между ними нуль  $S$ -матрицы, соответствующий виртуальному состоянию; виртуальное состояние возникнет между ближайшим к нулю связанным состоянием и нулем также и в случае нечетного значения  $l$ . При учете  $S(E_\lambda = 0) = 1$  выражение (13) должно хорошо описывать  $S$ -матрицу при  $E_\lambda \rightarrow 0$ . Ниже мы используем эту формулу с учетом разного числа членов в показателе экспоненты.

В приложениях может оказаться более удобной другая формула, которая должна работать в окрестности полюса, соответствующего подгоняемому связанному состоянию. Так как  $S$ -матрица имеет полюс при импульсе  $k = i\kappa_b$ , то, в соответствии с [31] и определением  $k = i\kappa$ , имеем

$$S(E) = \frac{C_l}{i\kappa - i\kappa_b}. \quad (14)$$

Здесь  $C_l$  — коэффициент, связанный с асимптотической нормировочной константой (АНК)  $A_l$  [31], которая является интересной наблюдаемой и которую также желательно получить в расчете

$$C_l = (-1)^{l+1} i |A_l|^2. \quad (15)$$

Отметим, что выражение (14) работает только в непосредственной близости от полюса, а в более общем случае надо записать сумму по всем полюсам:

$$S(E) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{D_l^1}{\sqrt{|E|} - \sqrt{|E_b^1|}} + \frac{D_l^2}{\sqrt{|E|} - \sqrt{|E_b^2|}} + \dots \right), \quad (16)$$

где введено  $D_l^j = -iC_l^j \frac{\hbar}{\sqrt{m}}$ . В этом выражении мы учитывали только нерезонансные полюса. Если можно предположить, что мы находимся достаточно близко к первому полюсу, то основная зависимость от энергии определяется только первым членом в (16), а вклад всех остальных членов можно учесть поправками, пропорциональными степеням  $\sqrt{|E_\lambda|}$ .

Тогда, учитывая (16) и (7), получим

$$\begin{aligned} \frac{C_{N+1,l}^{(-)}(E_\lambda/\hbar\Omega)}{C_{N+1,l}^{(+)}(E_\lambda/\hbar\Omega)} &= \quad (17) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{D_l}{\sqrt{|E_\lambda|} - \sqrt{|E_b|}} \right) + \\ &+ B + Q\sqrt{|E_\lambda|} + H|E_\lambda| + \dots \end{aligned}$$

Неизвестные здесь —  $E_b$ ,  $D_l$ ,  $B$ ,  $Q$  и  $H$ , которые надо определять подгонкой к имеющимся результатам  $E_\lambda$ , полученным с теми или иными значениями  $N_{\text{tot}}$  и  $\hbar\Omega$ .

Нужно отметить, что знак подгоночного параметра  $D_l$  в общем случае определяется величиной  $l$ , а с учетом ограничений на величину  $A_l$  (см. [31]) величина  $D_l$  также ограничена и связана с АНК  $A_l$  следующей формулой:

$$|A_l| = \sqrt{\frac{\sqrt{m}}{\hbar}} |D_l|. \quad (18)$$

Связь между подходом, основанным на учете симметрии  $S$ -матрицы (формула (13)), и формулой (17) станет видна, если экспоненту в выражении (13) разложить в ряд в окрестности полюса по малому параметру  $(\sqrt{E_b} - \sqrt{E_\lambda})$  и для простоты принять  $F = 0$ :

$$\begin{aligned} \frac{C_{N+1,l}^{(-)}(E_\lambda/\hbar\Omega)}{C_{N+1,l}^{(+)}(E_\lambda/\hbar\Omega)} &= \quad (19) \\ &= -e^{R\sqrt{|E_b|}} \frac{\sqrt{|E_\lambda|} + \sqrt{|E_b|}}{\sqrt{|E_\lambda|} - \sqrt{|E_b|}} \times \\ &\times \left[ \alpha + \beta(\sqrt{|E_\lambda|} - \sqrt{|E_b|}) + \right. \\ &+ \gamma(\sqrt{|E_\lambda|} - \sqrt{|E_b|})^2 + \\ &\left. + \delta(\sqrt{|E_\lambda|} - \sqrt{|E_b|})^3 + \dots \right], \end{aligned}$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  и  $\delta$  — коэффициенты разложения, зависящие, в том числе, от подгоночного параметра  $R$ .

Таким образом, в нашем распоряжении есть формула (17) и ее упрощенные варианты, в которых либо  $H = 0$ , либо  $Q = 0$ , и  $H = 0$ . Также мы можем использовать формулу (13) с учетом одного ( $R \neq 0, F = 0$ ) или двух ( $R \neq 0, F \neq 0$ ) параметров в экспоненте.

#### 4. ОТБОР ТОЧЕК И РАСЧЕТЫ ДЛЯ ОДНОГО СВЯЗАННОГО СОСТОЯНИЯ

Для апробации предложенных формул мы произвели подгонку по набору энергий, полученному диагонализацией гамильтониана с потенциалом Вудса—Саксона (8), и сравнили полученные результаты с тем, что получается методами, предложенными в работах [4, 6] и NCFC [3], а также с решением данной модельной задачи стандартными численными методами.

При подгонке минимизировалось выражение

$$\Xi_w = \sqrt{\frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \left( (E_\lambda^{(1)i} - E_\lambda^{(2)i})^2 \left( \frac{N_{\text{tot}}^i}{N_M} \right)^2 \right)}. \quad (20)$$

Здесь  $p$  — число использованных для подгонки значений энергии, добавлены множители, позволяющие учесть с большим весом значения, полученные в больших модельных пространствах,  $N_M$

**Таблица 1.** Подгоночные параметры для подгонки с  $4 \leq N_{\text{tot}} \leq 20$  с отбором точек по  $\hbar\Omega$  как показано на рис. 4 (для метода NCFC в скобках указана погрешность экстраполяции)

	$E_b,$ МэВ	$\Xi,$ кэВ	$A_l,$ $\Phi_M^{-1/2}$	$R,$ МэВ $^{-1/2}$	$F,$ МэВ $^{-3/2}$	$D_l,$ МэВ $^{1/2}$	$B$	$Q,$ МэВ $^{-1/2}$	$H,$ МэВ $^{-1}$
Точное значение	-7.011	—	2.89	—	—	—	—	—	—
(13)	-7.011	1	2.9	0.65	0.02	—	—	—	—
(17)	-7.011	1	2.9	—	—	-59.93	-7.57	-4.2	-4.6
[9]	-7.011	2	—	—	—	—	—	—	—
NCFC	-7.008(2)	—	—	—	—	—	—	—	—

бралось равным наибольшему значению  $N_{\text{tot}}^i$  из подгоняемого набора.  $E_\lambda^{(1)i}$  — значения энергии, полученные решением соответствующего уравнения (формулы (13) или (17)), параметризующего  $S$ -матрицу,  $E_\lambda^{(2)i}$  — собственные значения модельного гамильтониана, полученные при тех же  $\hbar\Omega$  и  $N_{\text{tot}}$ , что и  $E_\lambda^{(1)i}$ . В табл. 1 приводятся значения  $\Xi$  — среднеквадратичного отклонения:

$$\Xi = \sqrt{\frac{1}{p} \sum_{i=1}^p \left( E_\lambda^{(1)i} - E_\lambda^{(2)i} \right)^2}. \quad (21)$$

Перед проведением подгонки нам надо определить, какие результаты диагонализации мы можем использовать для анализа методом SS-HORSE, а какие — нет. Выше уже отмечалось, что метод SS-HORSE не работает для собственных состояний гамильтониана  $E_\lambda$ , полученных с данным значением  $N_{\text{tot}}$ , для которых  $\frac{dE_\lambda}{d\hbar\Omega} < 0$ , т.е. лежащих перед минимумом зависимости  $E_\lambda$  от  $\hbar\Omega$  [17]. Таким образом, мы будем использовать далее только энергии  $E_\lambda$ , полученные с

$$\hbar\Omega > \hbar\Omega_{\frac{dE_\lambda}{d\hbar\Omega}}, \quad (22)$$

где  $\hbar\Omega_{\frac{dE_\lambda}{d\hbar\Omega}}$  обеспечивает минимум зависимости  $E_\lambda$  от  $\hbar\Omega$  при заданном значении  $N_{\text{tot}}$ .

Далее, используемый при диагонализации обрванного гамильтониана осцилляторный базис должен обеспечивать адекватное описание волновой функции внутри ядра или, в нашей модельной задаче, в области действия потенциала Вудса—Саксона. В частности, хотя бы один узел одной из базисных функций должен попадать в область действия потенциала. Поскольку плотность узлов осцилляторных функций растет с ростом  $n$ , то необходимо, чтобы в область действия потенциала попал хотя бы один узел последней из используемых в базисе осцилляторных функций, соответствующей осцилляторному состоянию с полным

числом квантов  $N_{\text{tot}}$ . Эти соображения накладывают другое условие снизу на допустимые значения  $\hbar\Omega$  при заданном значении  $N_{\text{tot}}$ , которое можно оценить как

$$\hbar\Omega \geq \hbar\Omega_{\text{min}} = \frac{(2N_{\text{tot}} + 3)\hbar^2}{mN_{\text{tot}}^2 R_0^2}, \quad (23)$$

где  $R_0 = R_{\text{WS}} + D$ .

Здесь необходимо отметить, что метод, приведенный в работе [4], также предполагает отбор точек, связанный с ограничением значений  $\hbar\Omega$  снизу, а именно допустимые значения  $\hbar\Omega$  должны удовлетворять условию

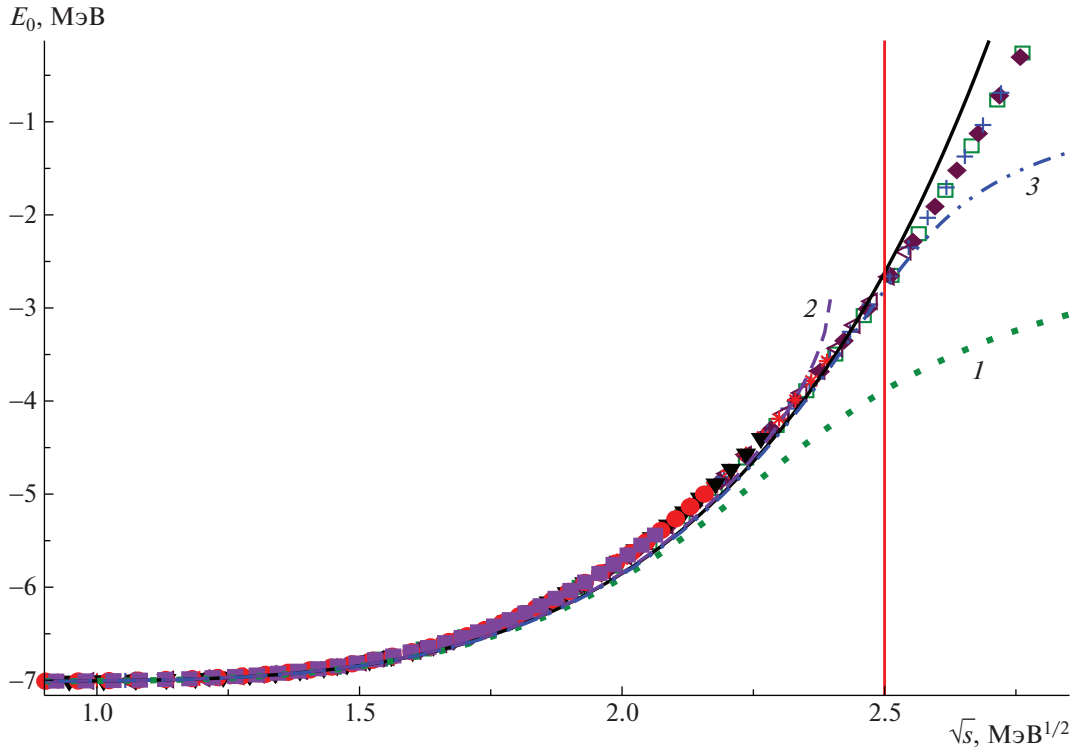
$$\sqrt{m(N_{\text{tot}} + 3/2)\hbar\Omega} \geq \Lambda_0, \quad (24)$$

где величина  $\Lambda_0$  выбирается на основе поведения в импульсном пространстве взаимодействия (вообще говоря, нуклон-нуклонного, а не используемого в данной задаче потенциала Вудса—Саксона, который играет роль среднего поля в ядре). Отметим впрочем, что условие (22) накладывает, как правило, более сильные ограничения на допустимые значения  $\hbar\Omega$ , чем условия (23) и (24), так что в дальнейшем можно ограничиться условием (23) на значения  $\hbar\Omega$  снизу.

Кроме того, надо учесть, что при увеличении  $n$  осцилляторные функции “сжимаются” и охватывают все меньшую область расстояний. Логичным будет потребовать, чтобы базис охватывал всю область ядра и не учитывать результаты из модельных пространств, у которых классическая точка поворота последней базисной осцилляторной волновой функции лежит уже внутри потенциальной ямы, т.е. оставить только результаты с

$$\hbar\Omega \leq \hbar\Omega_{\text{max}} = \frac{(2N_{\text{tot}} + 3)\hbar^2}{mR_0^2}. \quad (25)$$

Чтобы убедиться в адекватности условия (25), на рис. 3 мы представили результаты диагонализации гамильтониана — низжайшие собственные энергии  $E_0$  как функции корня из скейлингового параметра  $\sqrt{s}$ , полученные в различных модельных



**Рис. 3.** Подгонка по формуле (27) в окрестности полюса (сплошная кривая) и ее разложения (19) в ряд по степеням  $(\sqrt{|E_b|} - \sqrt{|E_\lambda|})$ . Цифрами 1, 2 и 3 обозначены кривые подобно старшей степени, учтенной в разложении (19). Вертикальная сплошная линия соответствует значению  $\sqrt{s_{\max}}$  в условии (26) для  $N_{\text{tot}} = 6$ .

пространства и удовлетворяющие условию (22), но без учета ограничения (25). Условие (25) можно переписать в виде ограничения на скейлинговый параметр:

$$s \leq s_{\max}(N_{\text{tot}}) = \frac{2\hbar^2(N_{\text{tot}} + 3/2)}{mR_0^2(N_{\text{tot}} + 7/2)}. \quad (26)$$

Вертикальная линия на рис. 3 соответствует значению  $s_{\max}$  для  $N_{\text{tot}} = 6$ .

На этом же рисунке мы приводим результаты подгонки по простейшему варианту формулы (13) с двумя подгоночными параметрами  $R$  и  $E_b$ :

$$\frac{C_{N+1,l}^{(-)}(E_\lambda/\hbar\Omega)}{C_{N+1,l}^{(+)}(E_\lambda/\hbar\Omega)} = \quad (27)$$

$$= e^{R\sqrt{|E_\lambda|}} \left( \frac{\sqrt{|E_b|} + \sqrt{|E_\lambda|}}{\sqrt{|E_b|} - \sqrt{|E_\lambda|}} \right).$$

Также приведены линии, соответствующие разложению (19) экспоненты в выражении (13) в ряд по степеням  $(\sqrt{|E_b|} - \sqrt{|E_\lambda|})$ . Видно, что формула (27) описывает практически все точки вплоть до ограничения (26). Однако разложение в ряд (19) перестает работать уже при меньших значениях  $s$ , если в нем не учитывать кубические

по  $(\sqrt{|E_b|} - \sqrt{|E_\lambda|})$  члены. Таким образом, при использовании в подгонке выражения (17), которое фактически соответствует разложению (19), необходимо учитывать в нем хотя бы несколько членов в разложении по степеням  $\sqrt{|E_\lambda|}$  или же ограничиваться наборами собственных энергий, полученных с меньшими значениями  $\hbar\Omega$ , чем задаются условием (25).

Мы сопоставляем результаты экстраполяции на бесконечное базисное пространство, основанное на описанных выше подгонках, с экстраполяцией  $B$  метода NCFC [3], которая основана на феноменологическом предположении об экспоненциальной сходимости энергий при увеличении  $N_{\text{tot}}$ , а также с экстраполяцией, предложенной в работе [4]. В последнем подходе подгонка осуществляется по формуле

$$E_\lambda = E_b + Ae^{-b/\lambda_{\text{sc}}}, \quad (28)$$

где скейлинговый параметр  $\lambda_{\text{sc}}$  с учетом поправки, предложенной в работе [9], задается формулой

$$\lambda_{\text{sc}}^{(1)} = \sqrt{\frac{mc^2\hbar\Omega}{N_{\text{tot}} + \frac{7}{2}}}, \quad (29)$$

и пропорционален  $\sqrt{s}$ .

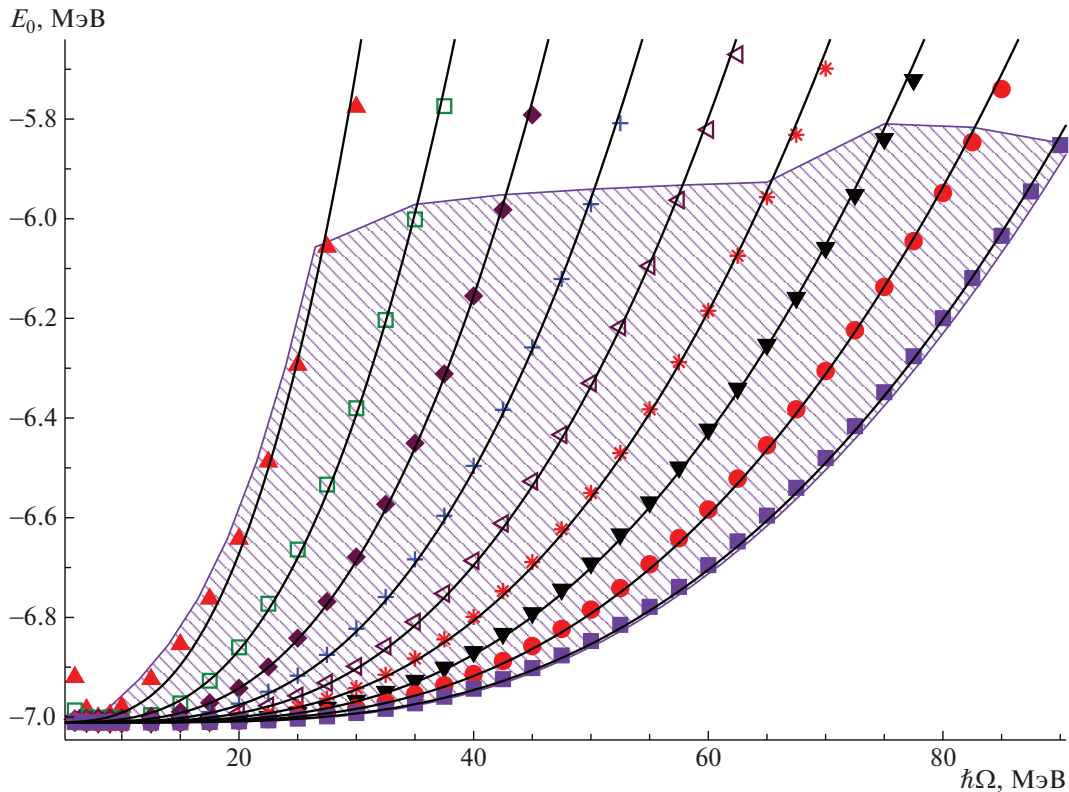


Рис. 4. Зависимость энергии нижайшего состояния  $E_0$  от  $\hbar\Omega$  для разных значений  $N_{\text{tot}}$ . Сплошные кривые — результат подгонки по формуле (27). Отобранные для подгонки точки лежат в заштрихованной части рисунка.

На рис. 4 показаны наборы точек, по которым проводилась экстраполяция, отобранные в соответствии с приведенными выше критериями  $\hbar\Omega \frac{dE_\lambda}{d\hbar\Omega} < \hbar\Omega \leq \hbar\Omega_{\text{max}}$ , и дополнительно отброшена часть точек для обеспечения подгонки по формуле (17), а также зависимости  $E_0$  от  $\hbar\Omega$  для разных  $N_{\text{tot}}$ , рассчитанные с параметрами, полученными в подгонке по формуле (27).

До сих пор мы брали простейший вариант формулы (13), полученной из свойств симметрии  $S$ -матрицы — формулу (27). Однако проведенные нами расчеты показали, что наилучшие результаты получаются, если использовать полный вариант формулы (13), используя не только  $R$ , но и  $F$  как подгоночный параметр. При использовании формулы (17), как уже отмечалось, необходим учет всех слагаемых, т.е. надо использовать пять подгоночных параметров. Результаты проведенных нами подгонок представлены в табл. 1. Из этой таблицы видно, что все методы позволяют предсказать значение энергии связанного состояния  $E_b$  с высокой точностью. Интересно при этом отметить, что экстраполяция по методу NCFC дает несколько меньшее значение энергии связи по сравнению с численным решением и другими методами экстраполяции.

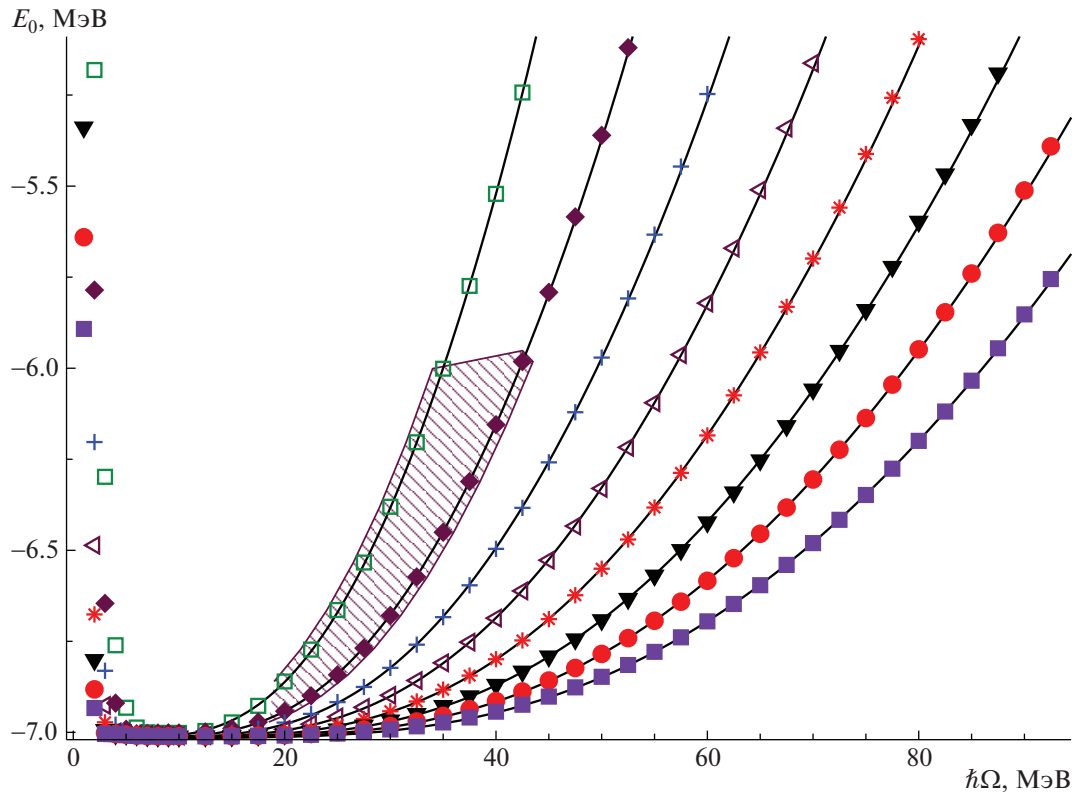
Важнейшим достоинством нашего подхода по сравнению с другими является возможность получить также АНК. Рассчитанные значения АНК близки к теоретическому как в случае использования формулы (13), так и при подгонке по формуле (17).

С точки зрения приложений данного подхода к исследованию конкретных ядер на основе расчетов в NCSM следует отметить, что в многочастичных задачах приходится довольствоваться результатами, полученными с существенным обрезанием ба-

Таблица 2. Сходимость результатов расчетов с ростом  $N_{\text{tot}}$

	$N_{\text{tot}}^{\text{min}} - N_{\text{tot}}^{\text{max}}$	$E_b$ , МэВ	$A_L$ , $\Phi_{\text{M}}^{-1/2}$
Точное значение	—	-7.011	2.89
(13)	4–8	-7.015	2.92
(13)	4–10	-7.012	2.90
(13)	4–20	-7.011	2.90
(17)	4–8	-7.015	2.93
(17)	4–10	-7.011	2.89
(17)	4–20	-7.011	2.89





**Рис. 5.** Предсказание собственных энергий при более высоких значениях  $N_{\text{tot}}$ , основываясь на результатах, полученных с  $6 \leq N_{\text{tot}} \leq 8$ , лежащих в заштрихованной области.

зиса, т.е. со сравнительно небольшими значениями  $N_{\text{tot}}$ , когда не удается достичь хорошей сходимости полученных энергий. В связи с этим необходимо исследовать, позволяет ли данный метод предсказать значения энергий в больших модельных пространствах, основываясь на результатах подгонки точек, полученных с малыми значениями  $N_{\text{tot}}$ .

На рис. 5 показаны результаты предсказания энергий в больших модельных пространствах с использованием экстраполяции по меньшим модельным пространствам ( $6 \leq N_{\text{tot}} \leq 8$ ) на основе формулы (17). Из табл. 2 можно увидеть, что предлагаемый метод позволяет предсказывать результаты в больших модельных пространствах при подгонке по меньшим модельным пространствам, т.е. обладает приемлемой сходимостью. Отметим, что формулы (13) и (17) дают значение АНК, близкое к точному.

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен метод экстраполяции результатов расчетов в осцилляторном базисе связанных состояний квантовых систем на случай бесконечного базиса, являющийся развитием метода SS-HORSE. На примере модельной задачи показано,

что данный метод позволяет предсказать положение полюсов  $S$ -матрицы, отвечающих связанным состояниям, и величину вычета в этих полюсах. Проведенное сравнение с методами экстраполяции, предложенными ранее в работах [3] и [4, 9], показало, что данный подход позволяет предсказывать энергии связи не хуже других методов, но основное его достоинство в том, что он позволяет рассчитать АНК — важные наблюдаемые в ядерных системах. В наших расчетах значение АНК получилось близким к точному решению, как при экстраполяции по формулам (13), так и при расчетах по формулам (17).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 16-12-10048).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. B. R. Barrett, P. Navrátil, and J. P. Vary, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **69**, 131 (2013).
2. J. P. Vary, P. Maris, H. Potter, M. A. Caprio, R. Smith, S. Binder, A. Calci, S. Fischer, J. Langhammer, R. Roth, H. M. Aktulga, E. Ng, C. Yang, D. Orspayev, M. Sosonkina, and E. Saule, in *Proceedings of the International Conference "Nuclear Theory in the Supercomputing Era-2014" (NTSE-2014), Khabarovsk, Russia, June 23–27, 2014*, Ed. by A. M. Shirokov and

- A. I. Mazur (Pacific National University, Khabarovsk, Russia, 2015), p. 154.
3. P. Maris, J. P. Vary, and A. M. Shirokov, *Phys. Rev. C* **79**, 014308 (2009).
  4. S. A. Coon, M. I. Avetian, M. K. G. Kruse, U. van Kolck, P. Maris, and J. P. Vary, *Phys. Rev. C* **86**, 054002 (2012).
  5. S. A. Coon, in *Proceedings of the International Conference "Nuclear Theory in the Supercomputing Era-2012" (NTSE-2012), Khabarovsk, Russia, June 18–22, 2012*, Ed. by A. M. Shirokov and A. I. Mazur (Pacific National University, Khabarovsk, Russia, 2013), p. 171.
  6. R. J. Furnstahl, G. Hagen, and T. Papenbrock, *Phys. Rev. C* **86**, 031301(R) (2012).
  7. S. N. More, A. Ekström, R. J. Furnstahl, G. Hagen, and T. Papenbrock, *Phys. Rev. C* **87**, 044326 (2013).
  8. M. K. G. Kruse, E. D. Jurgenson, P. Navrátil, B. R. Barrett, and W. E. Ormand, *Phys. Rev. C* **87**, 044301 (2013).
  9. R. J. Furnstahl, S. N. More, and T. Papenbrock, *Phys. Rev. C* **89**, 044301 (2014).
  10. D. Sääf and C. Forssén, *Phys. Rev. C* **89**, 011303(R) (2014).
  11. S. König, S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, S. N. More, and T. Papenbrock, *Phys. Rev. C* **90**, 064007 (2014).
  12. R. J. Furnstahl, G. Hagen, T. Papenbrock, and K. A. Wendt, *J. Phys. G* **42**, 034032 (2015).
  13. K. A. Wendt, C. Forssén, T. Papenbrock, and D. Sääf, *Phys. Rev. C* **91**, 061301(R) (2015).
  14. S. A. Coon and M. K. G. Kruse, *Int. J. Mod. Phys. E* **25**, 1641011 (2016).
  15. I. J. Shin, Y. Kim, P. Maris, J. P. Vary, C. Forssén, J. Rotureau, and N. Michel, *J. Phys. G* **44**, 075103 (2017).
  16. A. Negoita, G. R. Luecke, J. P. Vary, P. Maris, A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, E. G. Ng, and C. Yang, in *Proceedings of the Ninth International Conference on Computational Logics, Algebras, Programming, Tools, and Benchmarking (COMPUTATION TOOLS 2018), February 18–22, 2018, Barcelona, Spain* (IARIA, 2018), p. 20; arXiv:1803.03215 [physics.comp-ph]; G. A. Negoita, J. P. Vary, G. R. Luecke, P. Maris, A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, E. G. Ng, C. Yang, M. Lockner, and G. M. Prabhu, arXiv:1810.04009 [nucl-th] (Принято в печати в *Phys. Rev. C*).
  17. A. M. Shirokov, A. I. Mazur, I. A. Mazur, and J. P. Vary, *Phys. Rev. C* **94**, 064320 (2016).
  18. I. A. Mazur, A. M. Shirokov, A. I. Mazur, and J. P. Vary, *Phys. Part. Nucl.* **48**, 84 (2017).
  19. Л. Д. Блохинцев, А. И. Мазур, И. А. Мазур, Д. А. Савин, А. М. Широков, *ЯФ* **80**, 102 (2017) [*Phys. At. Nucl.* **80**, 226 (2017)].
  20. Л. Д. Блохинцев, А. И. Мазур, И. А. Мазур, Д. А. Савин, А. М. Широков, *ЯФ* **80**, 619 (2017) [*Phys. At. Nucl.* **80**, 1093 (2017)].
  21. А. М. Широков, А. И. Мазур, И. А. Мазур, Е. А. Мазур, I. J. Shin, Y. Kim, L. D. Blokhintsev, and J. P. Vary, *Phys. Rev. C* **98**, 044624 (2018).
  22. E. J. Heller and H. A. Yamani, *Phys. Rev. A* **9**, 1201 (1974).
  23. H. A. Yamani and L. J. Fishman, *J. Math. Phys.* **16**, 410 (1975).
  24. Yu. F. Smirnov and Yu. I. Nechaev, *Кинем* **4**, 445 (1982); Ю. И. Нечаев, Ю. Ф. Смирнов, *ЯФ* **35**, 1385 (1982) [*Sov. J. Nucl. Phys.* **35**, 808 (1982)].
  25. С. А. Зайцев, Ю. Ф. Смирнов, А. М. Широков, *ТМФ* **117**, 227 (1998) [*Theor. Math. Phys.* **117**, 1291 (1998)].
  26. J. M. Bang, A. I. Mazur, A. M. Shirokov, Yu. F. Smirnov, and S. A. Zaytsev, *Ann. Phys. (N.Y.)* **280**, 299 (2000).
  27. Л. Д. Блохинцев, И. Борбей, Э. И. Долинский, *ЭЧАЯ* **8**, 1189 (1977) [*Sov. J. Part. Nucl.* **8**, 485 (1977)].
  28. H. A. Yamani and M. S. Abdelmonem, *J. Phys. A* **26**, L1183 (1993).
  29. H. A. Yamani, *Eur. J. Phys.* **34**, 1025 (2013).
  30. R. G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles, 2nd ed.* (Springer-Verlag, New York, 1982).
  31. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (Наука, Москва, 1971).

## SS-HORSE EXTRAPOLATION OF BOUND-STATE ENERGY

A. M. Shirokov<sup>1),2),3)</sup>, V. A. Kulikov<sup>1),2)</sup>, A. I. Mazur<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russia

<sup>2)</sup>Department of Physics, Pacific National University, Khabarovsk, Russia

<sup>3)</sup>Department of Physics and Astronomy, Iowa State University, Ames, Iowa, USA

We propose a new approach to the extrapolation of bound-state energies obtained using the oscillator basis. This approach makes it possible to calculate also the asymptotic normalization constants. We present the derivation of this extrapolation technique and verify it by applying to a model problem.