О СХОДИМОСТИ РАСЧЕТОВ В ОСЦИЛЛЯТОРНОМ БАЗИСЕ

© 2021 г. А. М. Широков $^{1),2),3)}$, А. И. Мазур $^{2)*}$, В. А. Куликов $^{1),2)}$

Поступила в редакцию 10.06.2020 г.; после доработки 30.07.2020 г.; принята к публикации 30.07.2020 г.

Проведено исследование сходимости расчетов в осцилляторном базисе посредством локализации полюсов S-матрицы для связанных состояний в подходах HORSE и SS-HORSE. Изучена сходимость как в случае резкого обрезания матрицы потенциала в осцилляторном пространстве, так и при использовании сглаживания матричных элементов потенциала. На этой основе предложен новый метод экстраполяции на случай бесконечно больших модельных пространств, позволяющий на основе вариационных расчетов предсказывать энергии связи и асимптотические нормировочные коэффициенты связанных состояний с высокой степенью точности и оценивать погрешности этих предсказаний.

DOI: 10.31857/S0044002721020148

1. ВВЕДЕНИЕ

Точность теоретических предсказаний в подходах ab initio современной теории атомного ядра ограничена мощностью современных суперкомпьютеров. Например, в модели оболочек без инертного кора (No-Core Shell Model, NCSM) [1, 2] точность предсказаний напрямую связана с числом учитываемых квантов возбуждения в ядерной системе $N_{\rm max}$ и числом частиц в ядре A, так как размерность базиса NCSM растет экспоненциально с $N_{\rm max}$ и A. Исследование сходимости расчетов в подходах ab initio чрезвычайно важно, а развитие методов экстраполяции результатов в большие модельные пространства является актуальной задачей.

В настоящее время разработаны различные методы экстраполяции [3—21], в которых зависимости получаемых в оболочечных расчетах энергий и других характеристик связанных состояний от $N_{\rm max}$ и величины осцилляторного кванта $\hbar\Omega$ используются для предсказания значений, соответствующих бесконечному базису.

Недавно нами был предложен метод Single-State Harmonic-Oscillator Representation of Scattering Equations (SS-HORSE), в основе которого лежит J-матричный формализм теории рассеяния в осцилляторном базисе [22—28], также

известный как формализм HORSE [28]. Метод SS-HORSE [29, 30] является обобщением вариационных расчетов в осцилляторном базисе и, в частности, NCSM на случай непрерывного спектра и позволяет рассчитывать сдвиги фаз рассеяния, значения амплитуды и S-матрицы рассеяния нейтральных [31] и заряженных [32] частиц, а также характеристики рассеяния в случае демократического многочастичного рассеяния [33, 34]. Расчет характеристик рассеяния проводится с помощью простых формул при энергиях, совпадающих с собственными значениями E_{λ} конечной матрицы гамильтониана, построенной в осцилляторном базисе. Варьируя размеры модельного пространства и величину осцилляторного кванта $\hbar\Omega$, можно получить значения характеристик рассеяния в некотором интервале энергий. Затем, на основе параметризации сдвигов фаз, можно рассчитать характеристики рассеяния в широком интервале энергий. Эффективность метода была продемонстрирована нами в задачах резонансного и нерезонансного рассеяния нуклонов на изотопах гелия 4 He [29, 35–37] и 6 He [37–39], а также в предсказании возможности существования резонансного состояния тетранейтрона [33, 34]. Все перечисленные исследования проводились на основе расчетов ab initio в NCSM с нуклоннуклонными взаимодействиями JISP16 [40] и Daejeon16 [41].

Параметризация фаз рассеяния — это один из ключевых моментов метода SS-HORSE. Мы исследовали разные варианты параметризации (см. [29–33]), которые по сути являются эквивалентными, но имеют свои преимущества при решении конкретных задач. Параметризация, основанная на аналитических свойствах S-матрицы,

¹⁾НИИ ядерной физики им. Д.В. Скобельцына Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия.

²⁾Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск, Россия.

³⁾Department of Physics and Astronomy, Iowa State University, Iowa, USA.

^{*}E-mail: mazur@khb.ru

в силу своей наглядности оказалась удобной при исследовании рассеяния нейтральных частиц и резонансного состояния тетранейтрона. Кроме того, на основе SS-HORSE с этой параметризацией мы предложили новый способ экстраполяции результатов для связанных состояний на случай бесконечного базиса [21]. Новый метод позволяет определить не только положение полюса S-матрицы на мнимой полуоси комплексных значений импульсов (т.е. энергию связанного состояния), но и ее вычет в полюсе, связанный с асимптотическим нормировочным коэффициентом (АНК).

Цель настоящей работы заключается в дальнейшем развитии метода экстраполяции [21]. Мы предлагаем новый вариант экстраполяции результатов вариационных расчетов на бесконечно большое модельное пространство. В отличие от метода [21], в котором экстраполяция проводилась на основе большого числа результатов, полученных в разных модельных пространствах и с различными значениями осцилляторного параметра $\hbar\Omega$, в новой версии экстраполяция производится на основе небольшого числа результатов, полученных в одном модельном пространстве с различными значениями $\hbar\Omega$. Данный подход позволяет предсказывать как энергии связанных состояний, так и асимптотические нормировочные коэффициенты — важные наблюдаемые в ядерных системах. Мы предлагаем также способ оценки погрешности

Мы начинаем с того, что на примере простой модельной задачи анализируем некоторые общие свойства сходимости вариационных расчетов в осцилляторном базисе и расчетов положений полюсов S-матрицы для связанных состояний как в методе HORSE, так и в методе SS-HORSE. В частности, исследуется влияние "мягкого" обрезания матрицы потенциала в пространстве осцилляторных функций [42] на сходимость методов HORSE и SS-HORSE. Затем на этой основе мы формулируем предлагаемый метод экстраполяции результатов для энергии связанного состояния и АНК.

2. ПОЛЮСЫ S-МАТРИЦЫ ДЛЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ В МЕТОДАХ HORSE И SS-HORSE

2.1. Параметры модельной задачи

Рассмотрим задачу движения нейтральной частицы с массой $\mu c^2 = 751.14~$ МэВ в поле потенциала Вудса—Саксона в парциальной волне с орбитальным моментом l=0:

$$V(r) = \frac{V_0}{1 + \exp\left[(r - R_{ws})/a\right]},\tag{1}$$

где $V_0=-22.0~{\rm M}$ вВ, радиус $R_{ws}=3.08~{\rm фм}$, диффузность $a=0.53~{\rm фм}$. В системе имеется связанное состояние, энергия которого, рассчитанная непосредственным интегрированием уравнения Шредингера, $E_b^{\rm exact}=-7.010906~{\rm M}$ вВ, а АНК в этом состоянии ${\cal A}_l^{\rm exact}=2.89414~{\rm фm}^{-1/2}$. Число значащих цифр в приведенных значениях соответствует точности расчетов. В качестве модельной задачи мы будем исследовать сходимость вариационных расчетов в осцилляторном базисе для этого состояния и точность методов HORSE и SS-HORSE при получении указанных значений энергии состояния E_b и АНК ${\cal A}_l$.

2.2. Методы HORSE и SS-HORSE

Остановимся кратко на формулах методов HORSE и SS-HORSE, необходимых для анализа результатов. Детальное изложение этих методов можно найти в статьях [27, 28] и [29, 35] соответственно.

В методе HORSE радиальная волновая функция разлагается в ряд по бесконечному набору базисных осцилляторных функций $\phi_{nl}(r)$,

$$\phi_{nl}(r) = (2)$$

$$= (-1)^n \sqrt{\frac{2n!}{r_0 \Gamma(n + l/2 + 3/2)}} \left(\frac{r}{r_0}\right)^{l+1} \times \left(\frac{r^2}{r_0^2}\right) L_n^{l+1/2} \left(\frac{r^2}{r_0^2}\right).$$

Здесь $n=0,1,2,\ldots$ — главное квантовое число осцилляторной функции, $r_0=\sqrt{\hbar/\mu\Omega}$ — осцилляторный радиус, $L_n^{l+1/2}(x)$ — присоединенный полином Лагерра. В результате исходное уравнение Шредингера преобразуется в бесконечную систему линейных уравнений.

Бесконечное базисное пространство разбивается на два подпространства: конечное внутреннее, $n \leq N$, и бесконечное внешнее, n > N. Во внешней области n > N, отвечающей свободному движению частицы, гамильтониан представлен трехдиагональной симметричной бесконечной матрицей оператора кинетической энергии с ненулевыми матричными элементами

$$H_{nn} = T_{nn} = \frac{\hbar\Omega}{2} \left(2n + l + \frac{3}{2} \right),$$

$$H_{n,n-1} = H_{n-1,n} = T_{n,n-1} =$$

$$= -\frac{\hbar\Omega}{2} \sqrt{n \left(n + l + \frac{1}{2} \right)}.$$
(3)

Во внутренней области взаимодействие учитывается полностью, т.е. гамильтониан внутренней области H^N представлен конечной матрицей с элементами

$$H_{nm}^N = T_{nm} + V_{nm}^N, \quad n, m = 0, 1, 2, \dots, N.$$
 (4)

Таким образом, с формальной точки зрения суть метода HORSE заключается в аппроксимации исходного локального потенциала V(r) нелокальным потенциалом V^N , представленным матрицей размера $(N+1)\times (N+1)$ в пространстве осцилляторных функций. Матричные элементы V^N_{nm} потенциала V^N совпадают с матричными элементами V_{nm} потенциала V(r) для $n,m=0,1,2,\ldots,N$, т.е. потенциал V^N получается обрезанием бесконечной матрицы потенциала V(r) в осцилляторном базисе до матрицы конечного размера.

Задача с подобным нелокальным потенциалом имеет точное решение. Энергии и волновые функции связанных состояний, а также функции состояний непрерывного спектра и характеристики рассеяния в HORSE рассчитываются по формулам, в которые входят результаты диагонализации конечной матрицы гамильтониана (4), а также регулярное $S_{N+1,l}(k)$ и нерегулярное $C_{N+1,l}(k)$ осцилляторные решения, отвечающие свободному движению частицы с энергией $E=\hbar^2k^2/(2\mu)$, аналитический вид которых известен [28]. Например, формула для расчета S-матрицы в HORSE имеет вид

$$S_l(k) = \frac{C_{N,l}^{(-)}(k) - \mathcal{G}_{NN} T_{NN+1} C_{N+1,l}^{(-)}(k)}{C_{N,l}^{(+)}(k) - \mathcal{G}_{NN} T_{NN+1} C_{N+1,l}^{(+)}(k)}, \quad (5)$$

где

$$C_{N+1,l}^{(\pm)}(k) = C_{N+1,l}(k) \pm iS_{N+1,l}(k).$$
 (6)

Информация о взаимодействии содержится в матрице $\mathcal G$ с элементами

$$\mathcal{G}_{nn'} = -\sum_{\lambda=0}^{N} \frac{\langle nl | \lambda \rangle \langle \lambda | n'l \rangle}{E_{\lambda} - E},\tag{7}$$

где E_{λ} — собственные значения и $\langle nl|\lambda\rangle$ — собственные функции обрезанного при n=N гамильтониана:

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

$$n = 0, 1, ..., N.$$
(8)

Дополнительными внутренними параметрами метода HORSE являются граница обрезания N и величина осцилляторного кванта $\hbar\Omega$. Поэтому необходимо исследовать сходимость результатов при увеличении N и вариации $\hbar\Omega$.

Формула (5) справедлива и для комплексных значений аргументов. Из теории рассеяния [43] известно, что полюсы S-матрицы ассоциируются с ложными, виртуальными, резонансными и интересующими нас связанными состояниями. Положение полюса S-матрицы на комплексной плоскости импульсов в HORSE можно найти, решая трансцендентное уравнение [27]

$$C_{N,l}^{(+)}(k) - \mathcal{G}_{NN}T_{NN+1}C_{N+1,l}^{(+)}(k) = 0.$$
 (9)

По известному вычету S-матрицы C_l в полюсе для связанных состояний можно рассчитать асимптотический нормировочный коэффициент A_l [43]:

$$C_l = (-1)^{l+1} i |\mathcal{A}_l|^2. \tag{10}$$

Потенциал V^N соответствует резкому обрезанию матрицы потенциала в осцилляторном пространстве при n=N, что приводит к нерегулярному (осциллирующему) поведению фазы рассеяния, заметному в расчетах с малым значением N, и постепенно исчезающему по мере роста N. Как известно, сходимость фаз рассеяния в расчетах HORSE можно ускорить, если воспользоваться процедурой мягкого обрезания, предложенной в [42]. В этом случае вместо потенциала V^N используется потенциал \tilde{V}^N с матричными элементами

$$\widetilde{V}_{nm}^{N} = \sigma_n^N V_{nm}^N \sigma_m^N, \tag{11}$$

где

$$\sigma_n^N = \frac{1 - \exp\{-[\alpha(n - N - 1)/(N + 1)]^2\}}{1 - \exp\{-\alpha^2\}}$$
 (12)

и α — параметр сглаживания. Ниже для расчетов выбрано значение $\alpha=5$.

Отметим, что влияние мягкого обрезания матрицы потенциальной энергии (11), (12) на энергии связанных состояний до сих пор не изучалось. Это исследование мы проводим в настоящей работе.

В соответствии с формулой (5), для расчета S-матрицы необходимо иметь полную информацию о результатах диагонализации матрицы гамильтониана. Это делает невозможным непосредственное применение HORSE для анализа результатов, полученных в NCSM в больших модельных пространствах. Но если энергия совпадает с собственным значением $E=E_{\lambda}$, формула (5) существенно упрощается:

$$S_l(k_\lambda) = \frac{C_{N+1,l}^{(-)}(k_\lambda)}{C_{N+1,l}^{(+)}(k_\lambda)}.$$
 (13)

Здесь импульс k_{λ} соответствует собственной энергии E_{λ} для состояний рассеяния: $E_{\lambda} = \hbar^2 k_{\lambda}^2/(2\mu)$. Формула (13) выражает суть метода SS-HORSE:

в этом методе для расчета S-матрицы используется только одно собственное значение E_λ из всего спектра собственных значений.

В случае связанных состояний $k_\lambda=i\varkappa_\lambda,\ E_\lambda==-(\hbar^2\varkappa_\lambda^2/(2\mu)<0.$ Тогда формула (13) принимает вид

$$S_l(i\varkappa_\lambda) = \frac{C_{N+1,l}^{(-)}(i\varkappa_\lambda)}{C_{N+1,l}^{(+)}(i\varkappa_\lambda)}$$
(14)

и является основной в методе экстраполяции, предложенном в работе [21].

Значения E_λ и \varkappa_λ зависят от параметров осцилляторного базиса $\hbar\Omega$ и N. Варьируя эти параметры, мы можем по формуле (14) рассчитать набор значений S-матрицы $S_l(i\varkappa_\lambda^{(N,j)})$ в некотором интервале энергий. Здесь через $\varkappa_\lambda^{(N,j)}$ обозначен набор импульсов \varkappa_λ , соответствующих собственным энергиям $E_{\lambda}^{(N,j)}$, рассчитанным в модельных пространствах N с различными значениями параметра $\hbar\Omega^{(j)}$ (в каждом модельном пространстве Nмы проводили расчеты на равномерной сетке значений $\hbar\Omega^{(j)}$ с шагом 1 МэВ в интервале от 1 до 50 МэВ). Однако не все полученные значения $S_l(iarkappa_\lambda^{(N,j)})$ можно использовать в дальнейшем для анализа. Как и в методе HORSE, необходимо следить за сходимостью, которая в методе SS-HORSE определяется из следующих соображений. S-матрица как аналитическая функция является гладкой функцией энергии (за исключением разрывов в ее полюсах). Будем считать, что сходимость в модельном пространстве N достигнута в некотором диапазоне $\hbar\Omega$, если соответствующие значения $S_l(i\varkappa_\lambda^{(N,j)})$ ложатся на единую гладкую кривую, соответствующую поведению точной S-матрицы. Отклонения $S_l(i\varkappa_\lambda^{(N,j)})$ от этой гладкой кривой позволяют оценить точность предсказаний метода SS-HORSE. Выбор области значений параметров $\hbar\Omega^{(j)}$ и N, обеспечивающих применимость метода SS-HORSE, т.е. отбор значений $S_l(i\varkappa_\lambda^{(N,j)})$, обеспечивающих сходимость, детально обсуждается в работах [21, 29, 30, 35].

2.3. Параметризация S-матрицы

Следующим важным шагом в SS-HORSE является параметризация S-матрицы по отобранным значениям $S_l(i\varkappa_\lambda^{(N,j)})$.

Поведение S-матрицы вблизи полюса можно параметризовать выражением:

$$S_l(i\varkappa) = \frac{C_l}{i\varkappa - i\varkappa_b^{\rm ext}} + B. \tag{15}$$

Здесь C_l имеет смысл вычета S-матрицы в ее полюсе при импульсе $k=i\varkappa_b^{\rm ext}$, посредством B учтены вклады других полюсов. Используя большие наборы импульсов $i\varkappa_\lambda^{(N,j)}$ и соответствующих значений S-матрицы $S_l(i\varkappa_\lambda^{(N,j)})$, рассчитанные в нескольких модельных пространствах, в работе [21] определялись коэффициенты параметризации S-матрицы C_l , $\varkappa_b^{\rm ext}$ и B.

В настоящей работе мы исследуем другой способ экстраполяции, основанный на результатах расчетов с использованием одного и того же модельного пространства. В этом случае N фиксировано, а параметры C_l , $\varkappa_b^{\rm ext}$ и B для $\hbar\Omega^{(j)}$ определяются в соответствии с формулой (15) по импульсам $\varkappa_\lambda^{(N,j)}$ и значениям S-матрицы $S_l(i\varkappa_\lambda^{(N,j)})$, рассчитанным только в трех соседних точках $\hbar\Omega^{(j-1)}$, $\hbar\Omega^{(j)}$ и $\hbar\Omega^{(j+1)}$ в одном и том же модельном пространстве N. Забегая вперед отметим, что увеличение шага равномерной сетки значений $\hbar\Omega^{(j)}$ с 1 до 3 M эВ не оказывает существенного влияния на конечные результаты. Этот подход обеспечивает точность предсказания значений энергии и ΔHK , сравнимую с методом, представленным в работе [21].

Второй вариант параметризации, который мы используем, следует из свойств симметрии S-матрицы:

$$S_l(i\varkappa) = (-1)^l e^{R\varkappa} \frac{\varkappa_b^{\text{ext}} + \varkappa}{\varkappa_b^{\text{ext}} - \varkappa}.$$
 (16)

Здесь, как и в выражении (15), $i\varkappa_b^{\rm ext}$ — импульс, при котором S-матрица имеет полюс, соответствующий интересующему нас связанному состоянию, а вклад удаленных полюсов в этом случае учитывается экспонентой $e^{R\varkappa}$. Значения параметров R и $\varkappa^{\rm ext}$ в точке $\hbar\Omega^{(j)}$ мы определяем по результатам расчетов в двух соседних точках $\hbar\Omega^{(j)}$ и $\hbar\Omega^{(j+1)}$ в одном и том же модельном пространстве N.

Энергию $E_b^{\rm ext}=-(\hbar\varkappa_b^{\rm ext})^2/(2\mu)$, отвечающую положению полюса S-матрицы при импульсе $k==i\varkappa_b^{\rm ext}$, можно рассматривать как экстраполяцию полученных в модельном пространстве N результатов на случай бесконечного модельного пространства. Значение АНК $\mathcal{A}_l^{\rm ext}$ получается с помощью формулы (10) из вычета в полюсе S-матрицы, величина которого определяется подгоночным параметром C_l при использовании параметризации (15) или подгоночными параметрами R и $\varkappa^{\rm ext}$ при использовании параметризации (16).

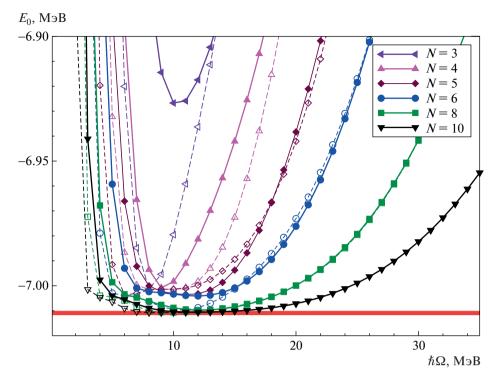


Рис. 1. Собственные энергии $E_0(\hbar\Omega)$ гамильтонианов для двух вариантов обрезания матрицы потенциала в разных модельных пространствах N. Кривые со светлыми символами соответствуют расчетам с потенциалом V^N (резкое обрезание матрицы потенциала), с темными — с потенциалом \widetilde{V}^N (мягкое обрезание). Горизонтальная линия — точное значение $E_h^{\rm exact}$.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ

3.1. Собственные энергии, полюсы S-матрицы и асимптотические нормировочные коэффициенты в HORSE

Собственные энергии нижайшего состояния $E_0(\hbar\Omega)$ гамильтонианов с потенциалами V^N (резкое обрезание матрицы потенциала) и \widetilde{V}^N (мягкое обрезание), рассчитанные в HORSE в разных модельных пространствах N, представлены на рис. 1.

В вариационных расчетах в качестве предсказания энергии связанного состояния в каждом модельном пространстве выбирается $E_0(\hbar\Omega_0)$ минимум зависимости E_0 от $\hbar\Omega$. Как видно на рис. 1, по мере роста размеров модельного пространства $E_0(\hbar\Omega_0)$ все более точно воспроизводит точное значение энергии состояния $E_b^{
m exact}$, а область значений $\hbar\Omega$, в которой кривая $E_0(\hbar\Omega)$ близка к $E_h^{
m exact}$, становится все более широкой. ${
m B}$ области $\hbar \Omega > \hbar \Omega_0$ различие между результатами расчетов с двумя вариантами потенциала с ростом N постепенно нивелируется, и начиная с N== 8 эти результаты уже неразличимы в выбранном масштабе рисунка. Слева от минимума $E_0(\hbar\Omega)$ в точке $\hbar\Omega = \hbar\Omega_0$ наблюдаются заметные различия результатов, полученных с разными вариантами

потенциала в расчетах во всех модельных пространствах. Однако результаты в этой области значений $\hbar\Omega$ не имеют значения для дальнейшего анализа в SS-HORSE.

Результаты расчетов в HORSE энергий связанных состояний $E_b(\hbar\Omega)$, соответствующих полюсам S-матрицы (решения уравнения (9)), демонстрируются на рис. 2.

Диапазон значений $\hbar\Omega$, за пределами которого метод HORSE не может привести к достоверным результатам, определяется из простых соображений [21].

Во-первых, очевидно, что область пространства, которую покрывает используемый в диагонализации гамильтониана осцилляторный базис в координатном представлении, должна быть больше радиуса действия исходного локального потенциала V(r) — в противном случае будет невозможно учесть все свойства потенциала в методе HORSE. Максимальную пространственную область покрывает последняя функция этого базиса $\phi_{Nl}(r)$, расстояние до классической точки поворота которой $r_N^{cl}=2r_0\sqrt{N+l/2+3/4}$; при $r>r_N^{cl}$ все базисные функции быстро затухают. Следовательно, по крайней мере классическая точка поворота функции $\phi_{nl}(r)$ с максимальным значением n=N

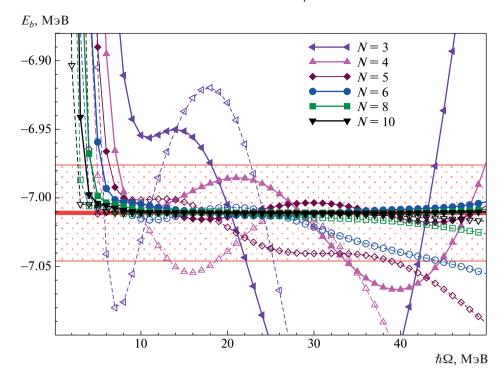


Рис. 2. Энергии связанных состояний $E_b(\hbar\Omega)$ (полюсы S-матрицы), полученные методом HORSE для двух вариантов обрезания матрицы потенциала. Обозначения как на рис. 1. Заштрихованная область шириной 70 кэВ соответствует полупроцентному отклонению от точного значения $E_h^{\rm exact} \pm 0.005 E_h^{\rm exact}$.

должна находиться за пределами радиуса потенциала $(R_{ws}+a)$. Это требование дает следующую оценку для верхней границы значений $\hbar\Omega_{\rm max}$ [21]:

$$\hbar\Omega \le \hbar\Omega_{\text{max}} = \frac{\hbar^2}{\mu(R_{ws} + a)^2} (4N + 2l + 3).$$
 (17)

В нашей модельной задаче даже в минимальном рассмотренном базисе (N=3) $\hbar\Omega_{\rm max}\sim 60~{\rm M}$ эВ. С ростом N верхняя граница $\hbar\Omega_{\rm max}$ увеличивается.

Во-вторых, как известно, функция связанного состояния затухает за пределами области действия потенциала. Описание подобной функции в виде разложения в ряд невозможно, если отсутствует хотя бы одна базисная функция, обращающаяся в нуль на границе или внутри этой области. Для фиксированного значения N из всех возможных вариантов ближе всего к началу координат расположен первый корень последней базисной функции $\phi_{Nl}(r)$. Таким образом, необходимо потребовать, чтобы первый корень базисной функции $\phi_{Nl}(r)$ находился внутри области действия потенциала. В результате можно получить оценку нижней границы интервала значений $\hbar\Omega_{\min}$ [21]:

$$\hbar\Omega \ge \hbar\Omega_{\min} = \frac{(4N+2l+3)\hbar^2}{\mu(2N+l)^2(R_{ws}+a)^2}.$$
(18)

Для модельного пространства N=3 значение $\hbar\Omega_{\min}$ составляет около 2 M \ni B, с ростом N

величина $\hbar\Omega_{\min}$ уменьшается. Однако, как видно из рис. 2, при $\hbar\Omega\approx\hbar\Omega_{\min}$ модуль производной $|dE_b/d(\hbar\Omega)|$ принимает очень большие значения, и кривые $E_b(\hbar\Omega)$ резко уходят вверх с уменьшением $\hbar\Omega$, что, очевидно, свидетельствует об отсутствии сходимости подхода при малых $\hbar\Omega$. Нижнюю границу сходимости метода HORSE разумно выбрать таким образом, чтобы отсечь область резкого роста $E_b(\hbar\Omega)$. На основе опыта численных расчетов в дальнейшем в качестве нижней границы сходимости по $\hbar\Omega$ мы используем значения от 4 до 8 МэВ в зависимости от N.

В расчетах положения полюса S-матрицы в HORSE с потенциалом V^N относительные отклонения энергии связанного состояния от точного значения $\delta(E_b)=(E_b-E_b^{\rm exact})/E_b^{\rm exact}$ в модельном пространстве N=4 не превышают половину процента в интервале значений $\hbar\Omega$ $\Delta(\hbar\Omega)=$ =[5,34] МэВ за исключением небольшого интервала значений $\hbar\Omega$ в районе $\hbar\Omega=15$ МэВ, где $\delta(E_b)$ немного больше, чем полпроцента; в случае N=5 полпроцентная точность предсказаний E_b наблюдается в интервале $\Delta(\hbar\Omega)=[4,39]$ МэВ. Начиная с N=8 точность предсказаний в интервале $\Delta(\hbar\Omega)=[3,50]$ МэВ заметно лучше половины процента. Отметим, что результаты, полученные в модельном пространстве N=3, фактически не

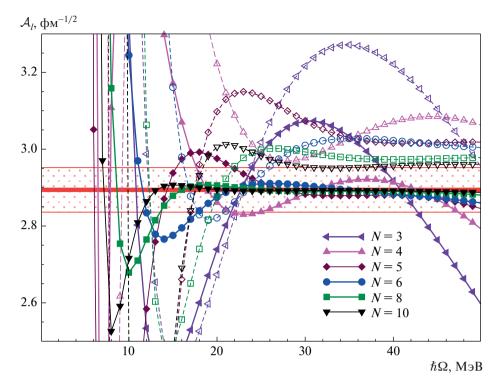


Рис. 3. Асимптотические нормировочные коэффициенты $\mathcal{A}_l(\hbar\Omega)$, полученные методом HORSE для двух вариантов обрезания матрицы потенциала. Обозначения как на рис. 1. Горизонтальная линия соответствует точному значению АНК $\mathcal{A}_l^{\text{exact}}$, заштрихованная область — двухпроцентному отклонению от точного значения $\mathcal{A}_l^{\text{exact}} \pm 0.02 \mathcal{A}_l^{\text{exact}}$.

демонстрируют сходимости, т.е. хотя бы намека на плато в зависимости $E_b(\hbar\Omega)$.

Мягкое обрезание потенциала существенно улучшает сходимость HORSE и позволяет получить хорошие предсказания в более широких интервалах значений $\hbar\Omega$ даже в небольших модельных пространствах. В модельных пространствах $N \geq 5$ точность предсказаний много лучше половины процента, начиная примерно с $\hbar\Omega \approx 7~{\rm M}{
m sB}$.

Асимптотические нормировочные коэффициенты более чувствительны к способу обрезания потенциала. В расчетах HORSE с потенциалом \widetilde{V}^N (мягкое обрезание матрицы) сходимость существенно более быстрая, чем в расчетах с потенциалом V^N (см. рис. 3). Кроме того, в расчетах с потенциалом V^N отличие АНК от точного значения даже в модельном пространстве N=10 составляет примерно два процента, тогда как в расчетах с \widetilde{V}^N относительное двухпроцентное отличие от $\mathcal{A}_l^{\text{exact}}$ даже в случае существенно меньшего модельного пространства N=5 наблюдается только на границах интервала $\Delta(\hbar\Omega)=[21,50]$ МэВ, а внутри этого интервала точность существенно выше.

Отметим, что по сравнению с энергией для AHK область сходимости метода HORSE смещена в сторону больших значений $\hbar\Omega$.

3.2. Полюсы S-матрицы и AHK в SS-HORSE

Рассмотрим результаты экстраполяции энергий E_b^{ext} и АНК $\mathcal{A}_l^{\mathrm{ext}}$ в методе SS-HORSE на основе расчетов в разных модельных пространствах.

Как и в HORSE, для метода SS-HORSE остаются справедливыми условия (17) и (18). Отметим, что при рассмотрении резонансных состояний в SS-HORSE для нижней границы $\hbar\Omega_{
m min}$ сходимости метода получено более жесткое условие, чем неравенство (18): производная $dE_0/d(\hbar\Omega)$ для каждого заданного значения N должна принимать положительные значения [29] (в нашей задаче этой границе соответствует $\hbar\Omega_{\min} \approx 11~{
m M}{
m s}{
m B}$ для потенциала V^N и \approx 12 МэВ для потенциала \widetilde{V}^N). Это условие вытекает из роста сдвига фаз в резонансной области, т.е. производная $d\delta_l/dE > 0$. В случае связанных состояний требование $dE_0/d(\hbar\Omega) > 0$ не является обоснованным, однако фактически оказывается, что нижняя граница области сходимости подхода приблизительно согласуется с оценкой на основе критерия $dE_0/d(\hbar\Omega) > 0$.

Сравнение результатов, полученных в HORSE и SS-HORSE в модельных пространствах N=4-7, представлено на рис. 4 и 5. На левых панелях рисунков демонстрируются расчеты с потенциалом V^N , на правых — с \tilde{V}^N . Левая граница по оси абсцисс $\hbar\Omega=9$ МэВ на рисунках примерно

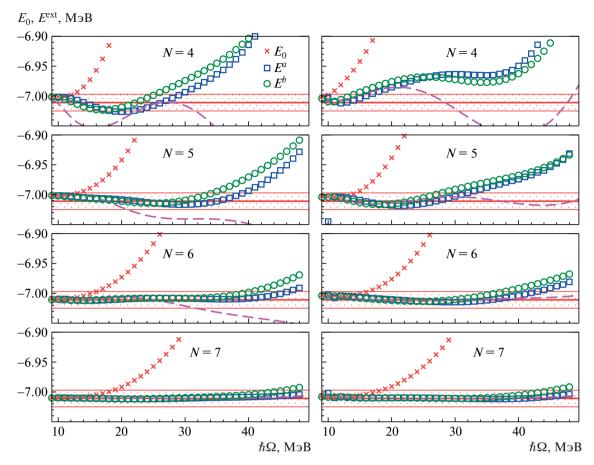


Рис. 4. Результаты экстраполяции энергий $E^{\rm ext}$ на основе расчетов с потенциалами V^N (слева) и \widetilde{V}^N (справа) в модельных пространствах N=4,5,6,7. Косые крестики — собственные энергии E_0 матрицы обрезанного гамильтониана, квадраты — экстраполяция SS-HORSE, вариант a, кружки — вариант b (см. текст). Штриховые кривые — результаты расчета энергии связанного состояния E_b в HORSE, горизонтальные прямые — точное значение $E_b^{\rm exact}$, заштрихованная область шириной 28 кэB соответствует отклонению от точного значения $E_b^{\rm exact}$ на 0.2%.

соответствует началу области сходимости, правая граница $\hbar\Omega=50~{
m M}{
m >}{
m B}$ — меньше верхней границы применимости HORSE $\hbar\Omega_{
m max}\sim60~{
m M}{
m >}{
m B}$ для модельного пространства N=3.

На рис. 4 представлены собственные энергии E_0 матрицы гамильтониана, полюсы S-матрицы E_b , рассчитанные в HORSE, а также два варианта (a и b) результатов экстраполяции SS-HORSE для энергий $E^{\rm ext}$. Энергии E^a соответствуют расчетам с параметризацией (15) по трем последовательным значениям $\hbar\Omega$ с шагом 1 МэВ; энергии E^b — расчетам с параметризацией (16) по двум последовательным значениям $\hbar\Omega$ с шагом 1 МэВ. Результаты экстраполяции двух вариантов параметризации S-матрицы E^a и E^b , как видно на рис. 4, близки. Различие между ними уменьшается по мере роста N. С ростом N уменьшается также различие результатов HORSE и экстраполяций SS-HORSE.

Отметим, что величина шага по $\hbar\Omega$ в параметризации (15) не играет заметной роли: различие

в поведении кривых экстраполяции в расчетах E^a с шагом 1 МэВ и в расчетах с шагом 3 МэВ существенно меньше, чем различие в поведении кривых E^a и E^b на рис. 4. Аналогичная картина наблюдается и для экстраполяции методом SS-HORSE AHK \mathcal{A}_l , представленной на рис. 4.

Результаты экстраполяции $E^{\rm ext}$ и ${\cal A}^{\rm ext}_l$ являются функциями $\hbar\Omega$, которые заметно изменяются при увеличении модельного пространства. В целом, оба метода — экстраполяции SS-HORSE и HORSE — имеют одинаковые особенности. Так, во всех вариантах расчетов в методе SS-HORSE при увеличении модельного пространства наблюдается сходимость результатов и расширение области сходимости. Но следует отметить важную особенность: в случае потенциала V^N (без сглаживания) экстраполяции SS-HORSE сходятся быстрее, чем расчеты HORSE, а со сглаживанием — наоборот, расчеты HORSE сходятся быстрее, чем экстраполяции SS-HORSE. С точки зрения раз-

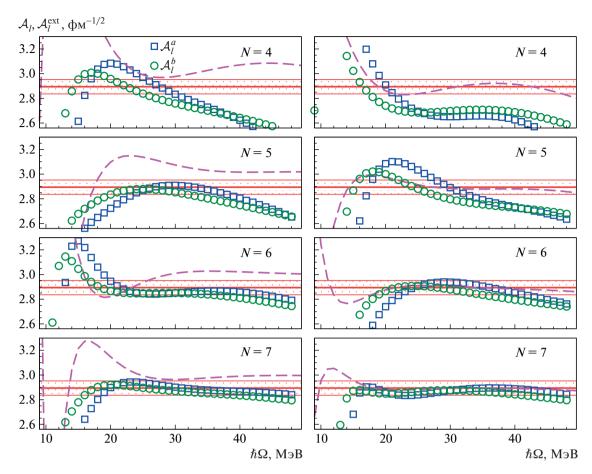


Рис. 5. Экстраполированные методом SS-HORSE AHK $\mathcal{A}_l^{\mathrm{ext}}$ на основе расчетов в модельных пространствах N=4, 5, 6, 7 с потенциалами V^N (слева) и \widetilde{V}^N (справа). Обозначения как на рис. 4. Заштрихованная область соответствует отклонению от точного значения $\mathcal{A}_l^{\mathrm{exact}}$ на 2%.

меров области сходимости, экстраполяции SS-HORSE в расчетах с потенциалом V^N также выглядят предпочтительнее по сравнению с расчетами с потенциалом \widetilde{V}^N .

Так, например, сходимость энергий связанных состояний E^{ext} и АНК $\mathcal{A}_{l}^{\mathrm{ext}}$, экстраполированных на основе расчетов с потенциалом V^N , наблюдается, начиная с N = 5. При этом значения E^a , отличающиеся от точного не более, чем на 0.2%. лежат в интервале $\Delta(\hbar\Omega) = [10, 40] \, \text{МэВ. Соответ-}$ ствующий интервал для \mathcal{A}_{l}^{a} , в пределах которого отклонения АНК от точного значения не превышают 2%, составляет $\Delta(\hbar\Omega) = [25, 38] \, \text{МэВ}$ (на рис. 4, 5 области $(1\pm0.002)E_b^{
m exact}$ и $(1\pm0.02){\cal A}_l^{
m exact}$ выделены штриховкой). Область перекрытия этих двух интервалов достаточно высока. Для энергий E^b верхняя граница интервала $\Delta(\hbar\Omega)$ при аналогичных критериях уменьшается до 34 МэВ, а интервал для \mathcal{A}_{l}^{b} не только уменьшается, но и несколько сдвигается в область меньших $\hbar\Omega$ и составляет $\Delta(\hbar\Omega) = [21, 32] \text{ M} \cdot \text{B}.$

В модельном пространстве N=6 аналогичные интервалы $\Delta(\hbar\Omega)$ расширяются: для E^a он составляет $\Delta(\hbar\Omega)=[10,47]$ МэВ, а для $E^b-\Delta(\hbar\Omega)=[10,40]$ МэВ; для АНК эти интервалы равны $\Delta(\hbar\Omega)=[20,45]$ МэВ для \mathcal{A}_l^a и $\Delta(\hbar\Omega)=[17,36]$ МэВ для \mathcal{A}_l^b . Далее, в модельном пространстве N=7 энергия E^a не выходит за пределы выделенной области во всем диапазоне представленных значений $\hbar\Omega$, интервал $\Delta(\hbar\Omega)$ для E^b несколько уже: $\Delta(\hbar\Omega)=[10,47]$ МэВ; для АНК соответствующие интервалы равны $\Delta(\hbar\Omega)=[19,48]$ МэВ (\mathcal{A}_l^a) и $\Delta(\hbar\Omega)=[16,38]$ МэВ (\mathcal{A}_l^b).

В расчетах с потенциалом \widetilde{V}^N (мягкое обрезание матрицы потенциала) сходимость $E^{\rm ext}$ и $\mathcal{A}^{\rm ext}_l$ в целом такая же. Но интервалы $\Delta(\hbar\Omega)$, в которых отклонение $E^{\rm ext}$ от точного не превышает 0.2%, являются более узкими в небольших модельных пространствах. Так, в пространстве N=5 этот интервал для экстраполяции E^a составляет $\Delta(\hbar\Omega)=$ = [10,31] МэВ. Соответствующий интервал для E^b

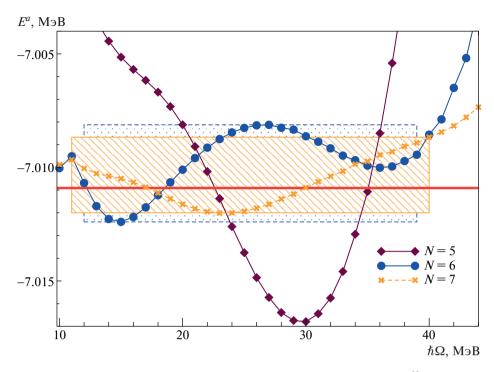


Рис. 6. Энергии E^a , полученные методом экстраполяции SS-HORSE с потенциалом V^N . Заштрихованная область, ограниченная сплошными линиями, соответствует области сходимости $\mathfrak{D}(\hbar\Omega)$ (по горизонтали) и соответствующему разбросу энергий E^a в модельном пространстве N=7; область, ограниченная штриховыми линиями — аналогичным величинам в модельном пространстве N=6 (см. текст). Жирная горизонтальная линия показывает точное значение энергии.

меньше: $\Delta(\hbar\Omega)=[10,27]$ МэВ. Результаты экстраполяции \mathcal{A}_l^a в модельном пространстве N=5 находятся в области двухпроцентного отклонения от точного значения только в интервале $\Delta(\hbar\Omega)=[28,33]$ МэВ. Аналогичный интервал в случае экстраполяции \mathcal{A}_l^b в этом же модельном пространстве $\Delta(\hbar\Omega)=[21,27]$ МэВ. Перекрытие интервалов, в которых одновременно с рассмотренной точностью воспроизводятся и энергии, и АНК, заметно меньше по сравнению с аналогичными интервалами в расчетах с потенциалом V^N .

Подчеркнем, что сходимость SS-HORSE с потенциалом V^N более быстрая по сравнению с HORSE. Это следует, в частности, из того, что энергии $E^{\rm ext}$ воспроизводят точные значения $E_b^{\rm exact}$ в каждом модельном пространстве с заданной точностью в более широких интервалах $\Delta(\hbar\Omega)$. Аналогичная ситуация наблюдается и для АНК.

В расчетах с потенциалом \widetilde{V}^N сходимость в HORSE, наоборот, более быстрая по сравнению с экстраполяциями SS-HORSE.

В модельных пространствах большей размерности в рассмотренном диапазоне значений $\hbar\Omega$ указанные выше отличия нивелируются, расчеты с потенциалами V^N и \widetilde{V}^N приводят к практически одинаковым результатам.

Результаты экстраполяции в каждом модельном пространстве зависят от $\hbar\Omega$. Для оценки значения энергии $ar{E}^{
m ext}$, полученной в результате экстраполяции, и соответствующей погрешности в модельном пространстве N, мы предлагаем следующую схему. Будем исходить из разброса значений $E^{\mathrm{ext}}(\hbar\Omega)$ в такой области значений $\mathfrak{D}(\hbar\Omega)$, в которой для данного модельного пространства наблюдается сходимость. Эту область мы предлагаем устанавливать, опираясь на сравнительно малые значения производной $dE^{\rm ext}(\hbar\Omega)/d(\hbar\Omega)$ и на точки пересечения кривых $E^{
m ext}(\hbar\Omega)$, полученных в модельных пространствах N и N-1. Определившись с областью сходимости $\mathfrak{D}(\hbar\Omega)$, мы принимаем полусумму максимального и минимального в этой области значений энергии за оценку предсказания для энергии $ar{E}^{ ext{ext}}$ в данном модельном пространстве N, а их полуразность — за погрешность ΔE^{ext} .

В качестве примера рассмотрим результаты экстраполяции энергии E^a в модельном пространстве N=6 с потенциалом V^N . В этом случае мы предлагаем выбрать область сходимости $\mathfrak{D}(\hbar\Omega)=[12,39]$ МэВ, так как в этой области сравнительно небольшие значения производной, а обе точки пересечения с кривой в модельном пространстве N=5 попадают в нее. Соответ-

Таблица 1. Экстраполированные энергии \bar{E}^a , \bar{E}^b и АНК $\bar{\mathcal{A}}_l^a$, $\bar{\mathcal{A}}_l^b$, полученные на основе вариационных расчетов с потенциалами V^N и \tilde{V}^N в разных модельных пространствах N (погрешности в последней значащей цифре указаны в скобках; точные значения энергии нижайшего связанного состояния и АНК: $E_b^{\mathrm{exact}} = -7.01091~\mathrm{M}$ эВ, $\mathcal{A}_l^{\mathrm{exact}} = 2.894~\mathrm{фm}^{-1/2}$)

\overline{N}	$ar{E}^a$, МэВ	$ar{E}^b$, МэВ	$ar{\mathcal{A}}^a, \varphi M^{-1/2}$	$ar{\mathcal{A}}^b, \phi$ м $^{-1/2}$	$ar{E}^a$, МэВ	$ar{E}^b$, МэВ	$ar{\mathcal{A}}^a, \varphi M^{-1/2}$	$ar{\mathcal{A}}^b, \varphi M^{-1/2}$
	Потенциал V^N				Потенциал \widetilde{V}^N			
4	-6.99(4)	-6.98(4)	2.7(4)	2.8(2)	-6.99(2)	-6.99(2)	2.6(2)	2.65(6)
5	-7.009(8)	-7.008(6)	2.8(1)	2.8(1)	-7.00(2)	-7.00(2)	2.9(2)	2.8(2)
6	-7.010(2)	-7.010(2)	2.83(3)	2.81(7)	-7.008(7)	-7.009(5)	2.85(9)	2.82(8)
7	-7.010(2)	-7.010(2)	2.89(5)	2.86(6)	-7.010(1)	-7.0104(5)	2.86(3)	2.84(4)
8	-7.0109(5)	-7.0108(3)	2.86(4)	2.85(3)	-7.0107(2)	-7.0105(4)	2.89(2)	2.87(4)
9	-7.0109(2)	-7.0108(2)	2.885(4)	2.90(5)	-7.0108(1)	-7.0108(2)	2.889(9)	2.87(2)
10	-7.0109(1)	-7.0109(1)	2.90(1)	2.88(2)	-7.01084(8)	-7.01081(7)	2.891(3)	2.88(1)

ствующие минимальное и максимальное значения E^a определяют границы разброса (см. рис. 6), по которым находятся среднее значение \bar{E}^a и погрешность ΔE^a .

В случае модельного пространства N=7 границы области сходимости $\mathfrak{D}(\hbar\Omega)=[11,40]$ МэВ выбраны по точкам пересечения кривых $E^a(\hbar\Omega)$ в модельных пространствах N=7 и N=6: производная $dE^{\rm ext}(\hbar\Omega)/d(\hbar\Omega)$ для N=7 невелика в этой области и начинает расти справа за ее границей, а на левой границе испытывает резкие изменения, так что такое определение области сходимости выглядит разумным.

Аналогично мы оцениваем значение и погрешность АНК.

В табл. 1 приведены оценки экстраполированных значений и соответствующих погрешностей энергий \bar{E}^a , \bar{E}^b и АНК $\bar{\mathcal{A}}_l^a$, $\bar{\mathcal{A}}_l^b$, полученных в различных модельных пространствах в расчетах с потенциалами V^N и \tilde{V}^N . Как видно, начиная с N=6 результаты для обоих вариантов потенциала совпадают в пределах погрешностей и прекрасно воспроизводят точные значения $E_b^{\rm exact}=$ $=-7.01091~{\rm M}{
m p}{\rm B}$, $\mathcal{A}_l^{\rm exact}=$ $=2.894~{\rm dm}^{-1/2}$.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На примере модельной задачи исследована сходимость вариационных расчетов энергии нижайшего состояния. Изучены эффекты мягкого обрезания матрицы потенциала [42].

В методе HORSE посредством численной локализации полюса S-матрицы рассчитана энергия нижайшего связанного состояния и найден AHK соответствующей волновой функции. Впервые для метода HORSE изучено влияние мягкого обрезания матрицы потенциала в осцилляторном пространстве [42]. Показано, что в методе HORSE мягкое обрезание матрицы потенциала существенно улучшает сходимость как расчетов энергии, так и расчетов АНК.

В рамках подхода SS-HORSE предложен новый метод экстраполяции результатов вариационных расчетов в осцилляторном базисе, полученных в ограниченном модельном пространстве с различными значениями осцилляторного параметра $\hbar\Omega$, на бесконечно большое модельное пространство. Рассмотрены разные варианты параметризации S-матрицы, показано, что для них результаты предсказаний в области сходимости метода практически одинаковы. Данный метод, как и предложенный ранее нами в статье [21], позволяет не только предсказывать энергии связанных состояний не хуже других методов экстраполяции, но и рассчитывать с разумной точностью AHK — важные наблюдаемые в ядерных системах.

Для экстраполяций SS-HORSE изучено влияние мягкого обрезания матрицы потенциала в осцилляторном пространстве [42]. Показано, что в отличие от метода HORSE в случае экстраполяций SS-HORSE мягкое обрезание матрицы потенциала приводит к некоторому ухудшению сходимости. В расчетах без использования мягкого обрезания матрицы потенциала метод экстраполяции SS-HORSE демонстрирует более быструю сходимость, чем HORSE. Так, экстраполяция результатов, полученных в модельном пространстве N=6, дает предсказания для энергий E^a , отличающиеся от точного значения не более, чем на 0.2% в широкой области значений $\hbar\Omega$: $\Delta(\hbar\Omega)=[10,47]$ МэВ в

расчетах с потенциалом V^N и в несколько меньшей области $\Delta(\hbar\Omega)=[10,43]$ МэВ в расчетах с потенциалом \widetilde{V}^N . Соответствующие области для АНК \mathcal{A}_l^a с отклонениями не более 2% от точного значения составляют $\Delta(\hbar\Omega)=[20,45]$ МэВ (потенциал V^N) и $\Delta(\hbar\Omega)=[24,42]$ МэВ (потенциал \widetilde{V}^N).

Отметим, что относительная точность предсказаний для АНК ниже, чем для энергий как в расчетах HORSE, так и в методе экстраполяций SS-HORSE. Кроме того, нижняя граница области сходимости АНК в обоих подходах заметно сдвинута (примерно на 10 МэВ) вправо от нижней границы области сходимости для энергий.

Предложена процедура оценки погрешности предсказаний энергий $\bar{E}^{\rm ext}$ и АНК $\bar{\mathcal{A}}_l^{\rm ext}$. Погрешности предсказаний для двух вариантов обрезания потенциала в пространстве осцилляторных функций V^N и \tilde{V}^N в модельной задаче становятся одинаковыми начиная с N=6. Погрешность предсказания энергии, начиная с N=6, не превышает нескольких кэВ (доли процента). Относительная погрешность предсказания АНК больше, но и она не превышает процента. Отметим, что предсказанные величины совпадают с точными результатами в пределах погрешности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант \mathbb{N}_{2} 20-02-00357) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект \mathbb{N}_{2} 0818-2020-0005) с использованием ресурсов ЦКП "Центр данных ДВО РАН".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. B. R. Barrett, P. Navrátil, and J. P. Vary, Prog. Part. Nucl. Phys. **69**, 131 (2013).
- 2. J. P. Vary, R. Basili, W. Du, M. Lockner, P. Maris, D. Oryspayev, S. Pal, S. Sarker, H. M. Aktulga, E. Ng, M. Shao, and C. Yang, in *Proceedings of the International Conference "Nuclear Theory in the Supercomputing Era 2016" (NTSE-2016), Khabarovsk, Russia, September 19—23, 2016*, Ed. by A. M. Shirokov and A. I. Mazur (Pacific National University, Khabarovsk, Russia, 2018), p. 15; http://www.ntse-2016.khb.ru/Proc/Vary.pdf
- 3. H. Zhan, A. Nogga, B. R. Barrett, J. P. Vary, and P. Navrátil, Phys. Rev. C **69**, 034302 (2004).
- 4. P. Maris, J. P. Vary, and A. M. Shirokov, Phys. Rev. C **79**, 014308 (2009).
- 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).
- 6. 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.

- 7. R. J. Furnstahl, G. Hagen, and T. Papenbrock, Phys. Rev. C **86**, 031301(R) (2012).
- 8. S. N. More, A. Ekström, R. J. Furnstahl, G. Hagen, and T. Papenbrock, Phys. Rev. C 87, 044326 (2013).
- 9. M. K. G. Kruse, E. D. Jurgenson, P. Navrátil, B. R. Barrett, and W. E. Ormand, Phys. Rev. C 87, 044301 (2013).
- R. J. Furnstahl, S. N. More, and T. Papenbrock, Phys. Rev. C 89, 044301 (2014).
- D. Sääf and C. Forssén, Phys. Rev. C 89, 011303(R) (2014).
- 12. S. König, S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, S. N. More, and T. Papenbrock, Phys. Rev. C **90**, 064007 (2014).
- 13. R. J. Furnstahl, G. Hagen, T. Papenbrock, and K. A. Wendt, J. Phys. G **42**, 034032 (2015).
- 14. K. A. Wendt, C. Forssén, T. Papenbrock, and D. Sääf, Phys. Rev. C **91**, 061301(R) (2015).
- 15. S. A. Coon and M. K. G. Kruse, Int. J. Mod. Phys. E **25**, 1641011 (2016).
- D. Odell, T. Papenbrock, and L. Platter, Phys. Rev. C 93, 044331 (2016).
- I. J. Shin, Y. Kim, P. Maris, J. P. Vary, C. Forssén, J. Rotureau, and N. Michel, J. Phys. G 44, 075103 (2017).
- 18. G. 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), Feb. 18–22, 2018, Barcelona, Spain (IARIA, 2018), p. 20; arXiv: 1803.03215 [physics.comp-ph].*
- 19. 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, Phys. Rev. C 99, 054308 (2019).
- 20. W. G. Jiang, G. Hagen, and T. Papenbrock, Phys. Rev. C **100**, 054326 (2019).
- 21. А. М. Широков, В. А. Куликов, А. И. Мазур, ЯФ **82**, 339 (2019) [Phys. At. Nucl. **82**, 385 (2019)].
- 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. Г. Ф. Филиппов, И. П. Охрименко, ЯФ **32**, 932 (1980) [Sov. J. Nucl. Phys. **32**, 480 (1980)].
- 25. Г. Ф. Филиппов, ЯФ **33**, 928 (1981) [Sov. J. Nucl. Phys. **33**, 488 (1981)].
- 26. Yu. F. Smirnov and Yu. I. Nechaev, Kinam **4**, 445 (1982); Ю. И. Нечаев, Ю. Ф. Смирнов, ЯФ **35**, 1385 (1982) [Sov. J. Nucl. Phys. **35**, 808 (1982)].
- 27. С. А. Зайцев, Ю. Ф. Смирнов, А. М. Широков, ТМФ **117**, 227 (1998) [Theor. Math. Phys. **117**, 1291 (1998)].
- 28. J. M. Bang, A. I. Mazur, A. M. Shirokov, Yu. F. Smirnov, and S. A. Zaytsev, Ann. Phys. (N.Y.) 280, 299 (2000).
- 29. A. M. Shirokov, A. I. Mazur, I. A. Mazur, and J. P. Vary, Phys. Rev. C **94**, 064320 (2016).
- 30. I. A. Mazur, A. M. Shirokov, A. I. Mazur, and J. P. Vary, Phys. Part. Nucl. **48**, 84 (2017).

- 31. 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)].
- 32. 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)].
- A. M. Shirokov, G. Papadimitriou, A. I. Mazur, I. A. Mazur, R. Roth, and J. P. Vary, Phys. Rev. Lett. 117, 182502 (2016).
- A. M. Shirokov, Y. Kim, A. I. Mazur, I. A. Mazur, I. J. Shin, and J. P. Vary, AIP Conf. Proc. 2038, 020038 (2018).
- 35. A. M. Shirokov, A. I. Mazur, I. A. Mazur, E. A. Mazur, I. J. Shin, Y. Kim, L. D. Blokhintsev, and J. P. Vary, Phys. Rev. C **98**, 044624 (2018).
- А. И. Мазур, А. М. Широков, И. А. Мазур, Л. Д. Блохинцев, Ю. Ким, И. Дж. Шин, Дж. П. Вэри, ЯФ 82, 449 (2019) [Phys. At. Nucl. 82, 537 (2019)].
- 37. И. А. Мазур, А. М. Широков, А. И. Мазур, И. Дж. Шин, Ю. Ким, П. Марис, Дж. П. Вэри, ЭЧАЯ **50**, 602 (2019) [Phys. Part. Nucl. **50**, 537 (2019)].

- 38. I. A. Mazur, A. M. Shirokov, I. J. Shin, A. I. Mazur, Y. Kim, P. Maris, and J. P. Vary, in *Proceedings of the International Conference "Nuclear Theory in the Supercomputing Era—2018"* (NTSE-2018), Daejeon, South Korea, October 29—November 2, 2018, Ed. by A. M. Shirokov and A. I. Mazur (Pacific National University, Khabarovsk, Russia, 2019), p. 310; http://www.ntse.khb.ru/files/uploads/2018/proceedings/MazurI.pdf
- 39. I. A. Mazur, A. M. Shirokov, I. J. Shin, A. I. Mazur, Y. Kim, P. Maris, and J. P. Vary, arXiv: 2001.08898 [nucl-th] (2020).
- 40. A. M. Shirokov, J. P. Vary, A. I. Mazur, and T. A. Weber, Phys. Lett. B **644**, 33 (2007).
- 41. A. M. Shirokov, I. J. Shin, Y. Kim, M. Sosonkina, P. Maris, and J. P. Vary, Phys. Lett. B **761**, 87 (2016).
- 42. J. Révai, M. Sotona, and J. Žofka, J. Phys. G 11, 745 (1985).
- 43. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (Наука, Москва, 1971).

ON THE CONVERGENCE OF OSCILLATOR BASIS CALCULATIONS

A. M. Shirokov^{1),2),3)}, A. I. Mazur²⁾, V. A. Kulikov^{1),2)}

¹⁾Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Russia
²⁾Pacific National University, Khabarovsk, Russia
³⁾Department of Physics and Astronomy, Iowa State University, USA

We examine the convergence of bound state calculations within the method of the oscillator basis expansions by means of location of S-matrix poles utilizing the HORSE and SS-HORSE approaches. The convergence is studied in the case of a sharp truncation of the potential matrix in the oscillator space as well as in the case of smoothing of potential matrix elements. A new method of extrapolation of the variational calculation results to the case of infinite-dimensional basis space is proposed. The method makes it possible to predict binding energies and asymptotic normalization coefficients with a high accuracy and estimate uncertainties of these predictions.