

Znaczenie szybkich rozwiązań równań Faddeeva z siłami chiralnymi dla określenia Hamiltonianu układów jądrowych



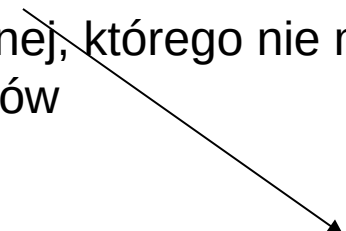
Henryk Witała

we współpracy z: Jacek Golak, Roman Skibiński

Instytut Fizyki, Uniwersytet Jagielloński, Kraków

Stan obliczeń ab initio układów kilku nukleonów w latach 1980s

- Kilka modeli potencjałów NN (Reid, Paris, Bonn, przybliżenia separowalne dla tych potencjałów)
- Zadowalający opis własności deuteronu oraz danych w rozpraszaniu NN, **LE CZ ...**
- ... 3N stany związane (^3H , ^3He) policzone z wszystkimi dostępnymi oddziaływaniami NN pozostawały niedowiązane → **WAŻNA INFORMACJA**: Hamiltonian 3N zawiera **potencjał trzy-nukleonowy** – człon w energii potencjalnej, którego nie można zredukować do sumy oddziaływań par nukleonów

$$H = H_0 + V_{12} + V_{23} + V_{31} + V_{123}$$


Rozpraszanie nukleon-deuteron wchodzi do gry !

Algorytmy numeryczne opracowane w tym okresie pozwoliły na numerycznie dokładne rozwiązanie równań Faddeeva w kontinuum 3-nukleonowym z dowolnym potencjałem 2- i 3-nukleonowym, co dało możliwość badania własności **różnych modeli potencjałów 2- i 3-nukleonowych**:



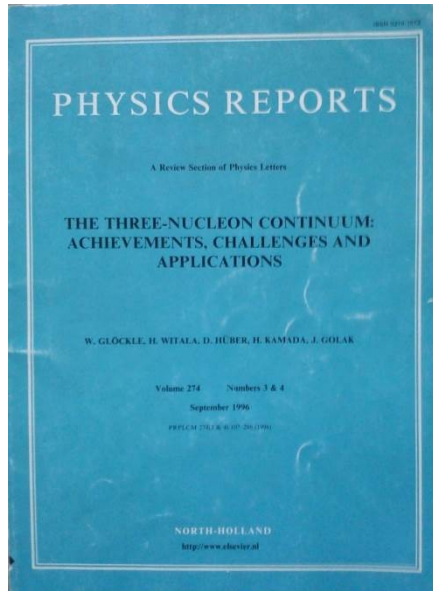
Wiele obserwacji w tych reakcjach wykazuje czułość na specyficzne części tych potencjałów. Reakcja rozszczepienia deuteronu posiada wiele kinematycznie zupełnych konfiguracji w stanie końcowym, które są czułe na określone cechy oddziaływań 2N i 3N.

Ważne pytania:

- Jaka jest rola siły trzeciałowej w układach 3N ?
- Czy obecne modele sił jądrowych opisują poprawnie dane z eksperymentów ?
- Gdzie szukać dużych efektów potencjałów 3N ?

Istotna współpraca z grupami eksperymentalnymi !

Pierwsze wyniki z potencjałami semi-fenomenologicznymi ...: CD Bonn, AV18, Nijm1 and 2



Physics Reports 274 (1996) 107–285

PHYSICS REPORTS

The three-nucleon continuum: achievements, challenges and applications

W. Glöckle^a, H. Witała^b, D. Hüber^a, H. Kamada^{a,1}, J. Golak^b

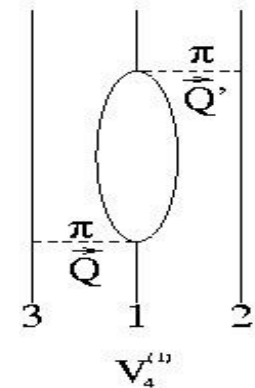
^a *Institut für theoretische Physik II, Ruhr-Universität Bochum, D-44780 Bochum, Germany*

^b *Institute of Physics, Jagellonian University, PL-30059 Cracow, Poland*

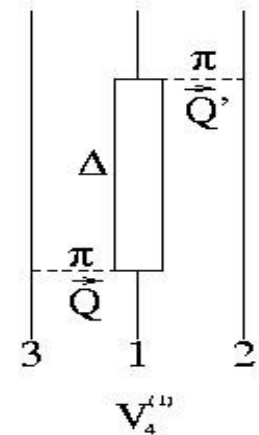
Received November 1995; editor: G.E. Brown

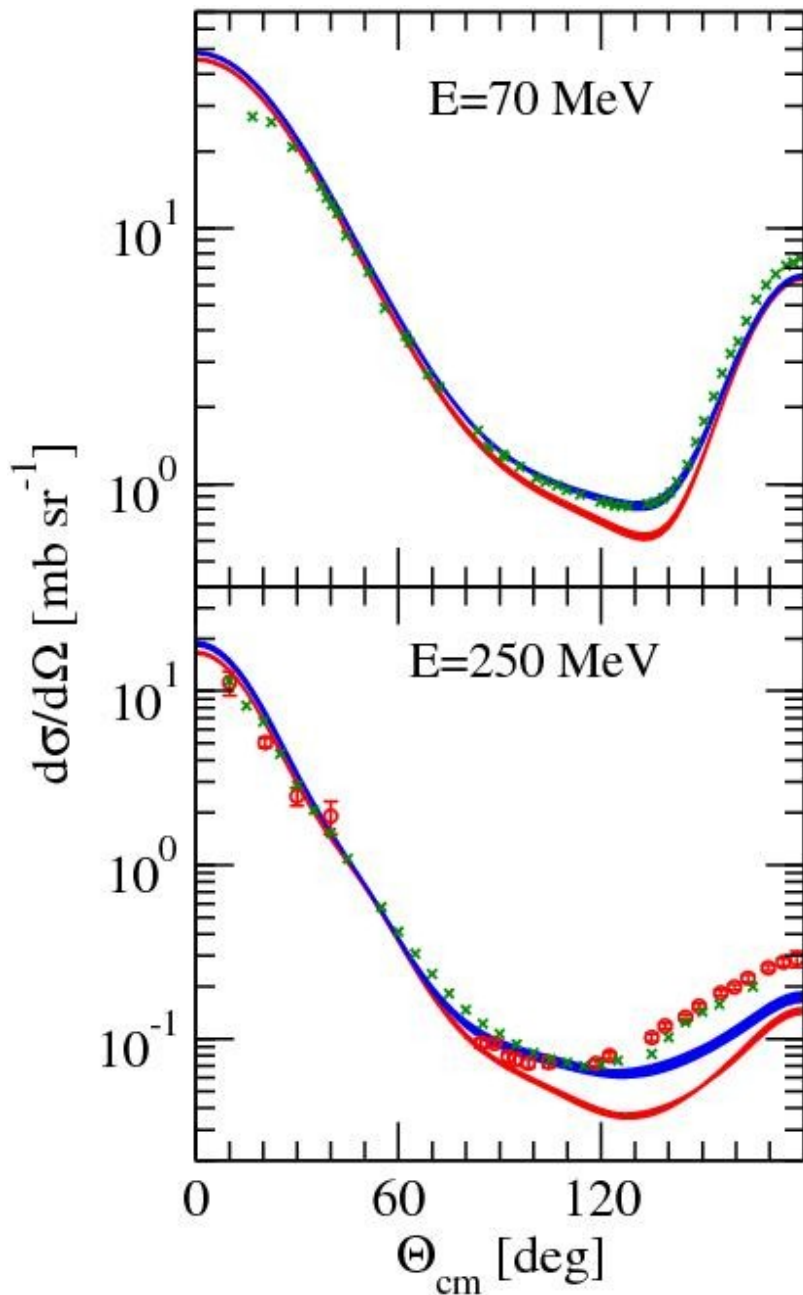
Użyto również dostępnych modeli sił trzy-nukleonowych :

Model Tucson-Melbourne (TM), bazujący na fenomenologicznej parametryzacji amplitudy rozpraszania pionu na nukleonie (S.A.Coon, W.Glöckle, PRC23, 1790 (1981))



Model Urbana IX, który bazuje na procesie wymiany dwóch pionów pomiędzy trzema nukleonami, prowadzącym do wzbudzenia rezonansu Δ w stanie pośrednim (Fujita-Miyazawa - lata 1950'e); ten proces został uzupełniony członem krótkozasięgowym niezależnym od spinu i izospinu (B.S.Pudliner et al., PRC56, 1720 (1997))





Nowe pomiary zainspirowane
obliczeniami z potencjałami 3N

— only 2N (AV18, CD Bonn, Nijm1,
Nijm2)
— 2N+3N TM99

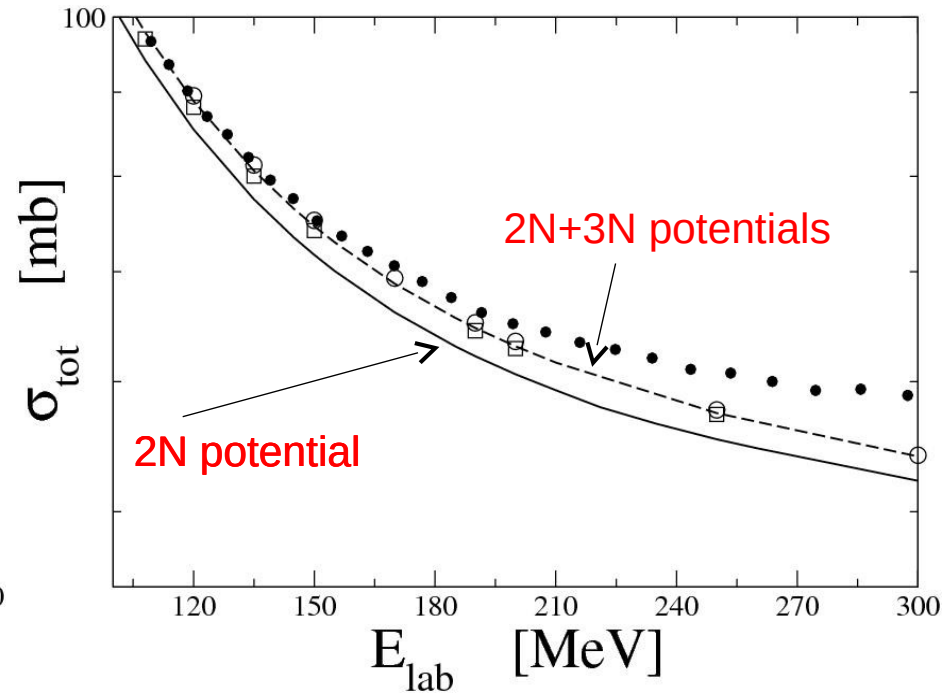
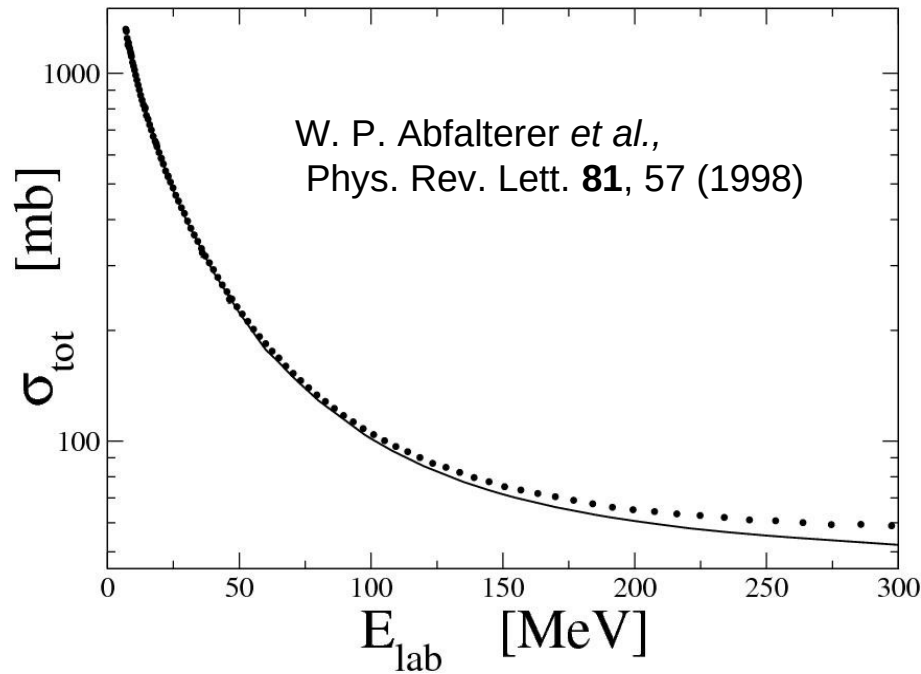
pd data at 70 MeV:
K.Sekiguchi et al., PR C65, 034003 (2002)

data at 250 MeV:
x nd - Y.Maeda et al., PR C76, 014004
(2007)
o pd - K.Hatanaka et al., PR C 66,
044002 (2002)

Problemy przy wyższych energiach

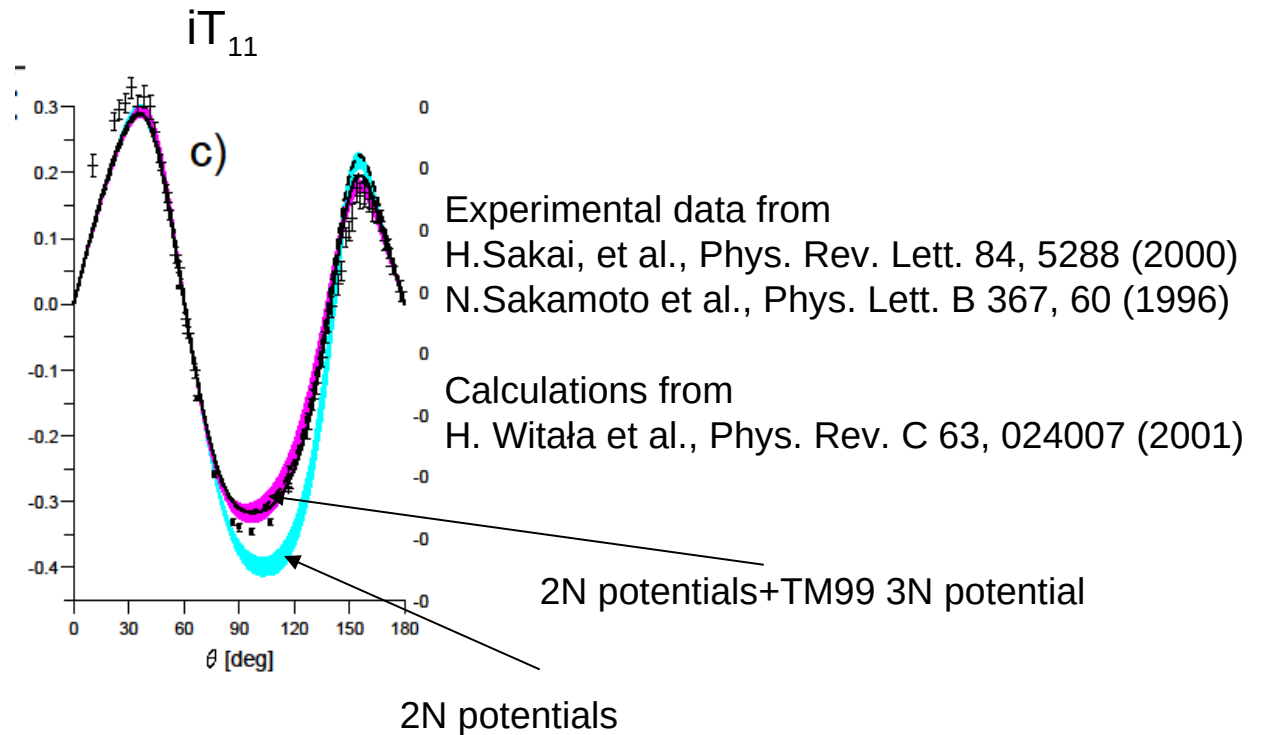
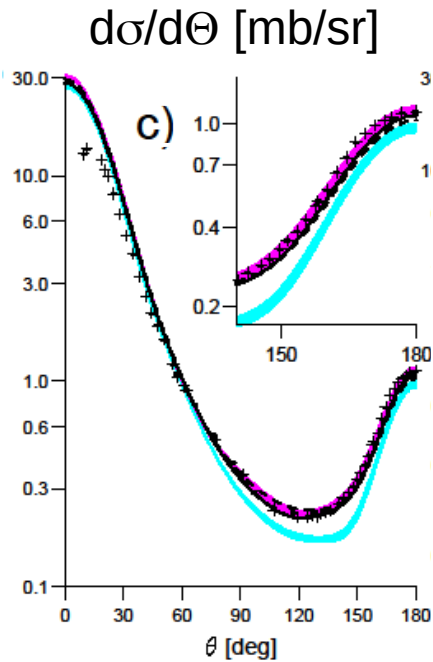
Całkowity przekrój czynny na oddziaływanie neutronu z deuteronem:

- do ~ 50 MeV dobra zgodność z przewidywaniami bazującymi na siłach 2N
- siła 3N wyjaśnia rozbieżność między teorią i danymi do ~ 150 MeV
- dla jeszcze wyższych energii pojawia się wyraźna rozbieżność teorii z danymi, która rośnie ze wzrostem energii układu trzynukleonowego



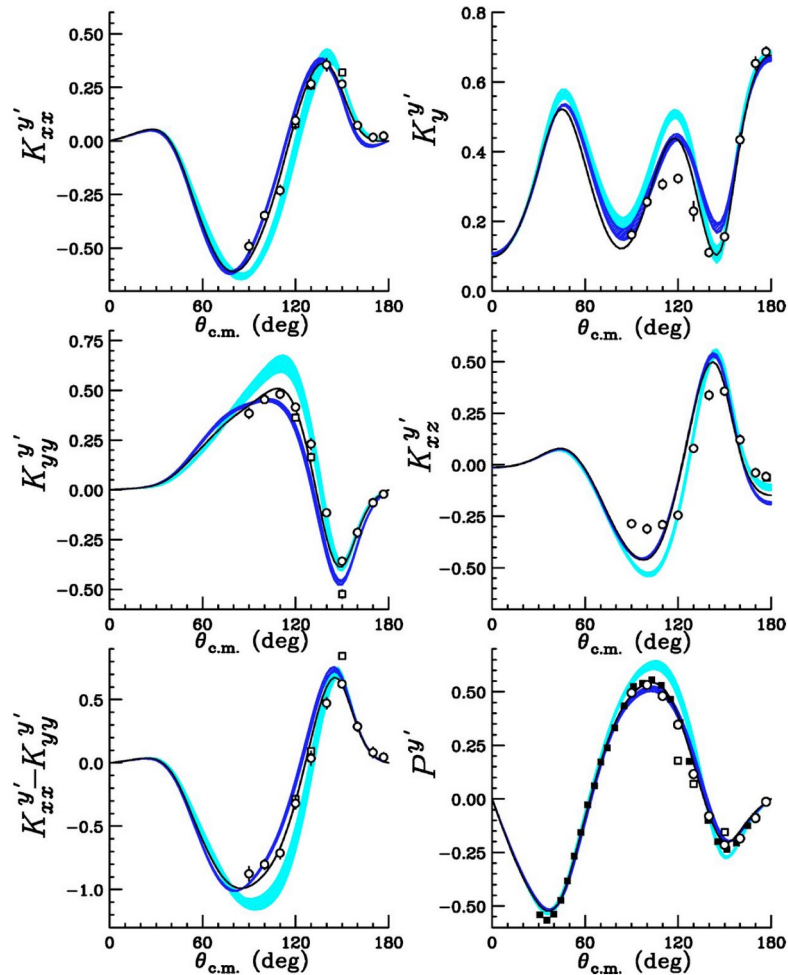
Rozpraszanie elastyczne Nd dla $E = 135$ MeV

Tutaj potencjał 3N wyraźnie poprawia opis danych

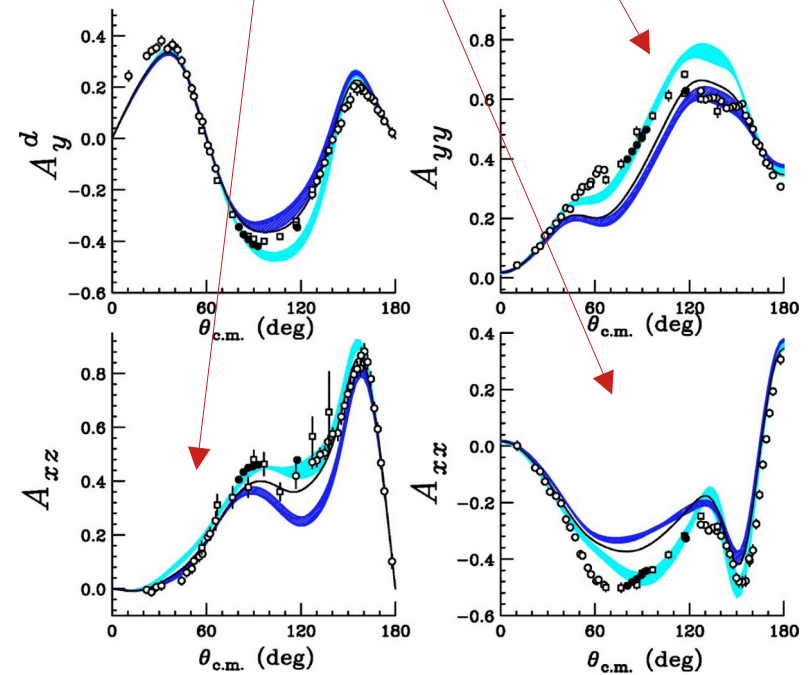


Rozpraszanie elastyczne Nd dla $E=135$ MeV

K. Sekiguchi *et al.*, Phys. Rev. C **70**, 014001 (2004)



Tutaj potencjał 3N nie poprawia opisu danych !



Wyniki są niezadowolające:
nie potrafimy opisać danych przy wyższych energiach.

To prawdopodobnie oznacza, że doszliśmy do granicy możliwości modeli sił jądrowych bazujących na obrazie wymiany mezonowej !

Te modele mimo wielu sukcesów nie potrafią generować konsystentnych potencjałów 2- i 3-nukleonowych !

Dalszy postęp wymaga nowego podejścia do sił jądrowych.

Obraz bazujący na wymianie kilku mezonów, który nie prowadzi do konsystentnych sił 2- i wielo-nukleonowych, powinien być zastąpiony poprzez nowe podejście

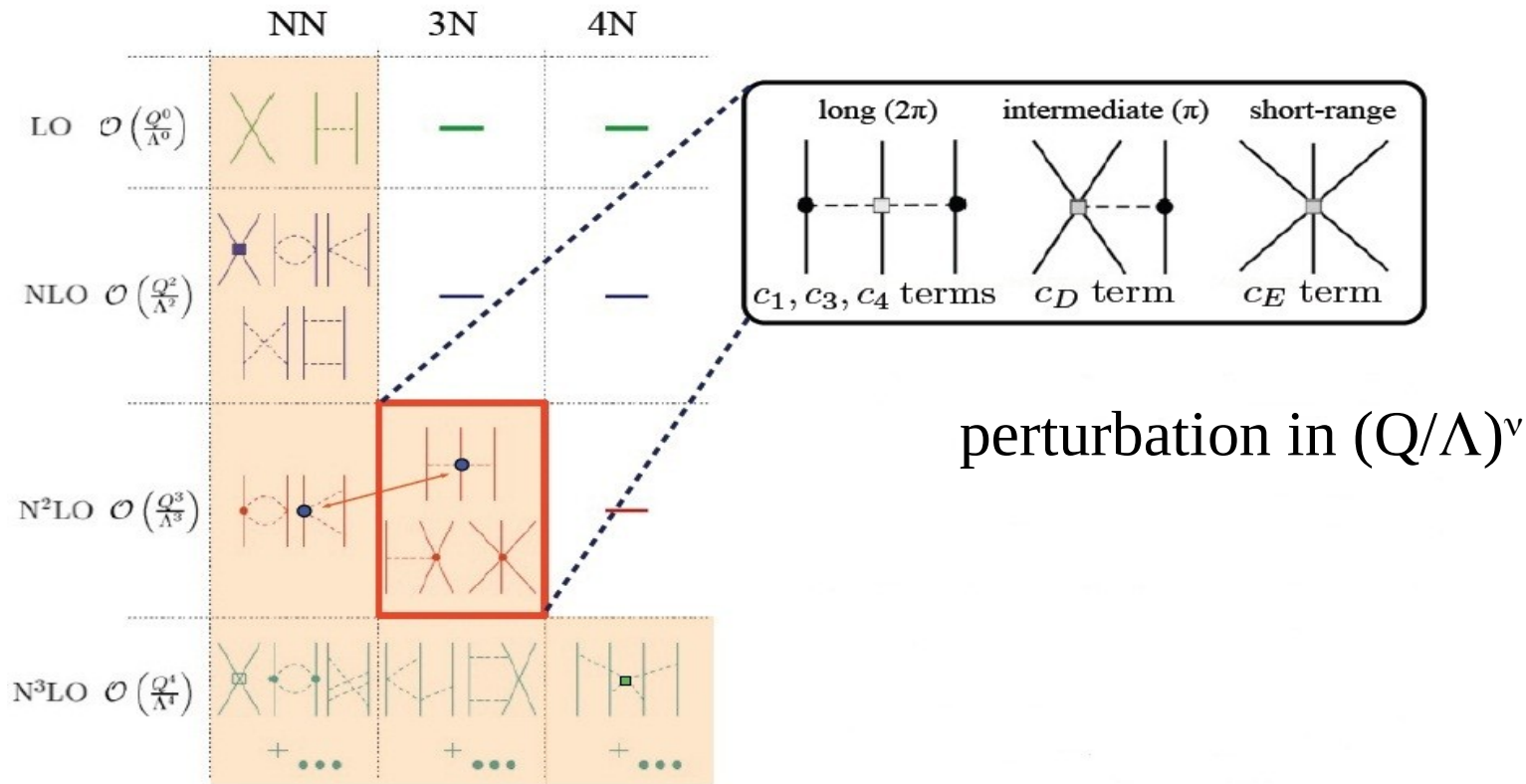
→ chiralna efektywna teoria pola (χ EFT).

Wydaje się rzeczą nieuniknioną zbadać przewidywania dla kontinuum trzynukleonowego otrzymane w ramach **chiralnej efektywnej teorii pola ! To podejście** uważa się obecnie jako najlepszą teorię sił jądrowych.

- Jest powiązana z QCD
- Daje konsyistentne potencjały dwu- i wielo-nukleonowe oraz operatory prądu (elektromagnetycznego, słabego)
- Pozwala na systematyczne poprawki otrzymanych wyników
- χ EFT tłumaczy (S. Weinberg, Phys. Lett. B **295**, 114 (1992)), dlaczego siły 2N są ważniejsze niż oddziaływania 3N, siły 3N ważniejsze od oddziaływań 4N itd. (hierarchia sił jądrowych)

Nowość: można podać niepewności (błędy) teoretyczne spowodowane obcięciem rozwinięcia chiralnego do danego rzędu (pominięcie wyższych rzędów rozwinięcia) !

Chiral expansion of nuclear forces and Weinberg counting



LENPIC (Low Energy Nuclear Physics International Collaboration): “to understand nuclear structure and reactions with chiral forces”



Sven Binder, Kai Hebeler,
Joachim Langhammer, Robert Roth

**IOWA STATE
UNIVERSITY**

Pieter Maris, Hugh Potter, James Vary



JAGIELLONIAN UNIVERSITY
IN KRAKÓW

Jacek Golak, Roman Skibiński,
Kacper Topolnicki, Henryk Witała



Evgeny Epelbaum,
Hermann Krebs



Richard J. Furnstahl,



Andreas Nogga



TRIUMF

Angelo Calci



Veronique Bernard



Kyutech
Kyushu Institute of Technology

Hiroyuuki Kamada

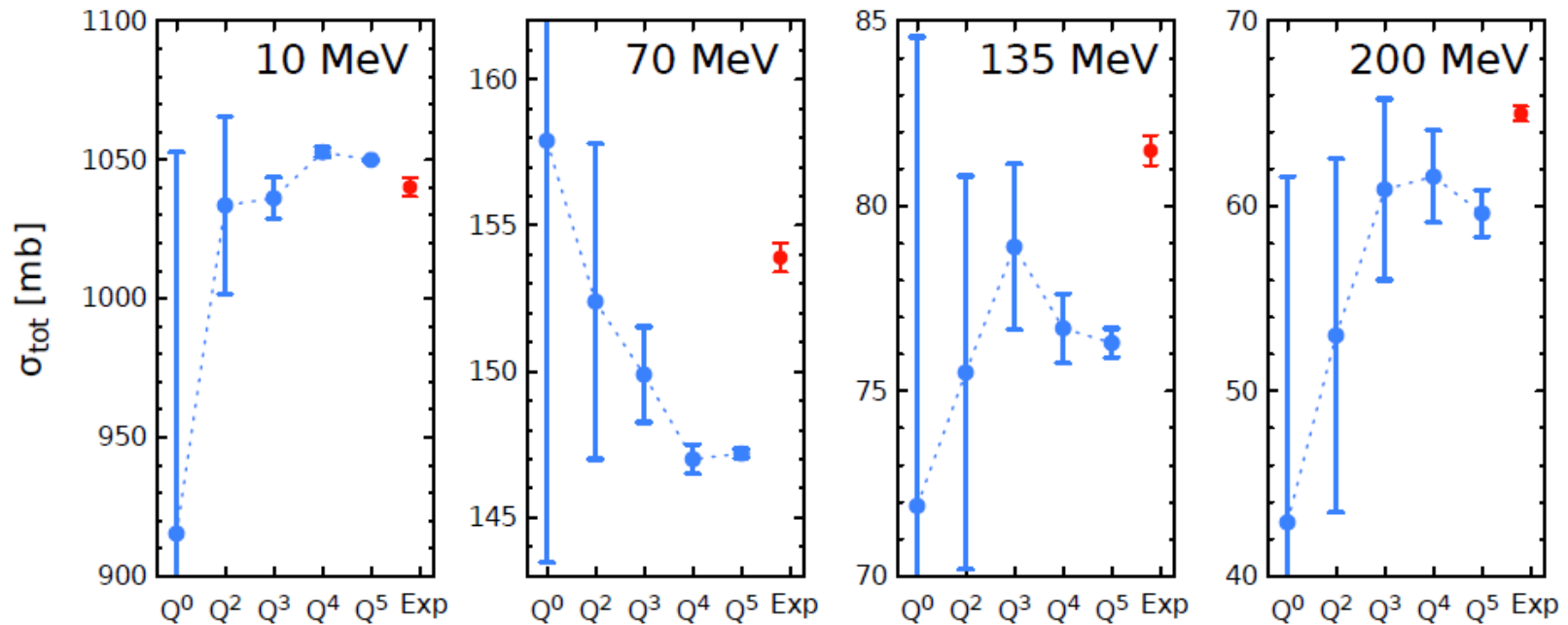


universität**bonn**

Ulf-G.Meißner

Improved chiral SCS forces: 3N system

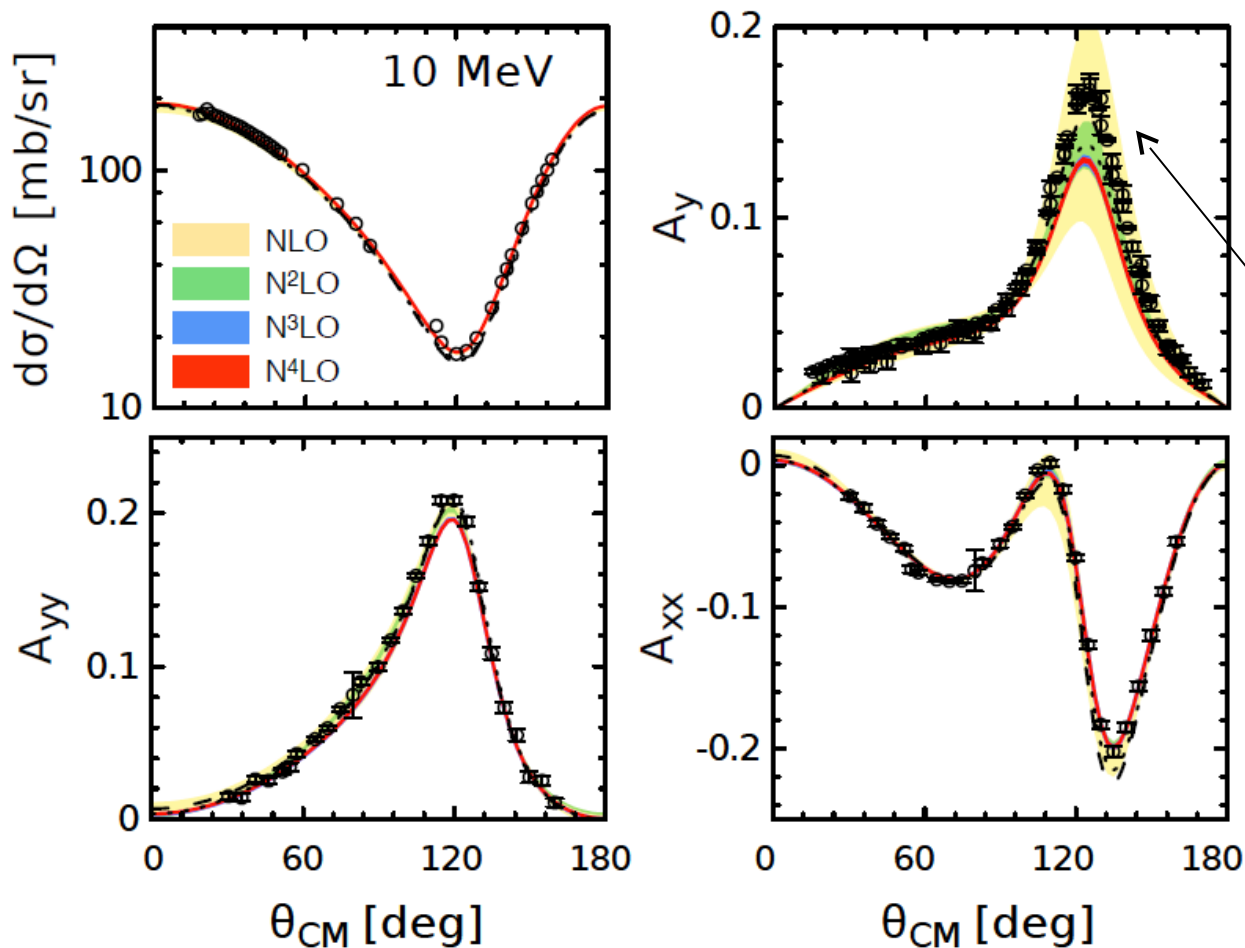
Neutron-deuteron total cross section based on NN forces only $R=0.9\text{fm}$ (preliminary)



- Unambiguous evidence for missing three-nucleon forces (within our scheme)
- The size of the missing 3NF contribution agrees well with power counting ($N^2\text{LO}$)

Improved chiral SCS forces: 3N system

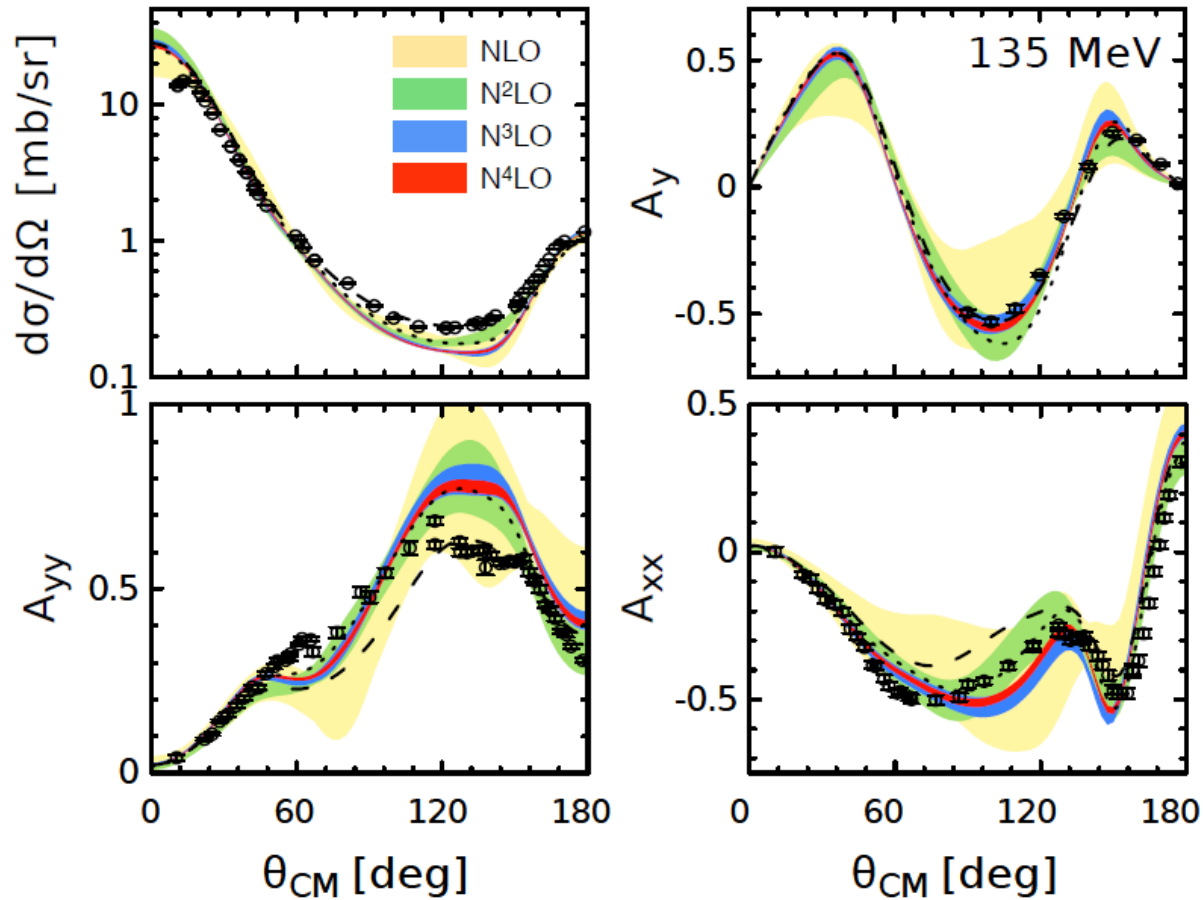
Elastic Nd scattering at N⁴LO at 10 MeV based on NN forces only $R=0.9\text{fm}$



little room for 3NF except for A_y

Improved chiral SCS forces: 3N system

Elastic Nd scattering at N⁴LO at 135 MeV based on NN forces only $R=0.9\text{fm}$



A lot of
room for
3NF !
N⁴LO
calculations
are needed

Zastosowanie chiralnych potencjałów NN skonstruowanych przez grupy w Bochum-Bonn oraz Idaho pokazało, że poprawny opis danych w układzie NN dla energii poniżej progu na produkcję pionów (~ 300 MeV) wymaga rozwinięcia chiralnego aż do rzędu **N4LO**.

E.Epelbaum, H.Krebs, U.-G.Meißner, Phys. Rev. Lett. **115**, 122301 (2015)

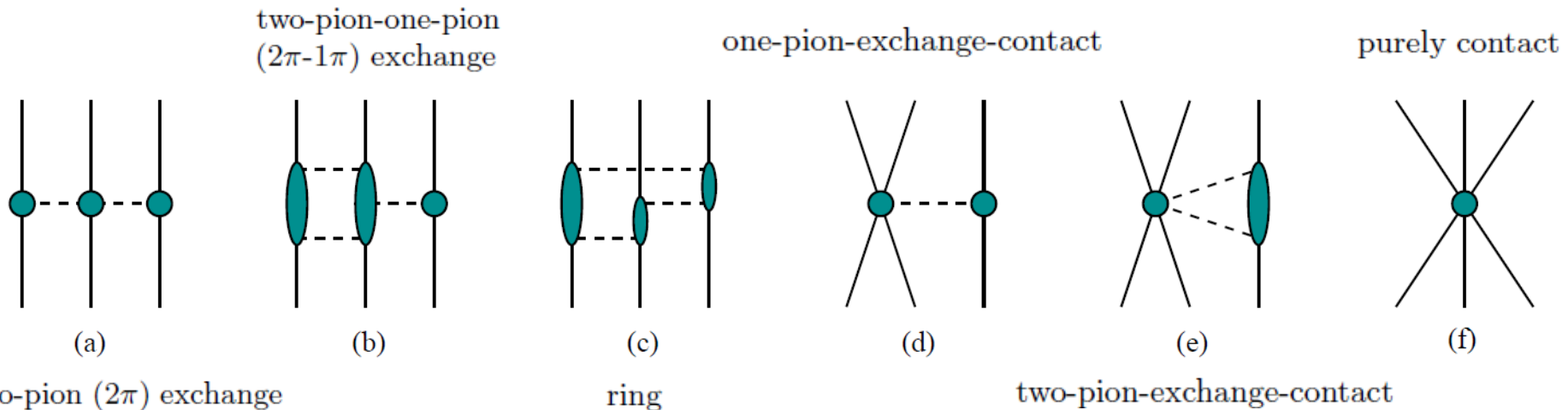
P. Reinert, H. Krebs, and E. Epelbaum, Eur. Phys. J. A **54**, 86 (2018)

D.R. Entem, R. Machleidt and Y. Nosyk, Phys. Rev. C **96**, 024004 (2017)

Zatem włączając do obliczeń kontinuum trzynukleonowego siłę trzyciałową trzeba rozważyć wkłady do niej aż do rzędu N4LO rozwinięcia chiralnego.

Jakie są wkłady do chiralnej siły trzynukleonowej (3NF) w różnych rzędach rozwinięcia chiralnego ?

Various topologies contributing to the 3NF up to and including N⁴LO



□ N²LO: (a) + (d) + (f) (E.Epelbaum et al., PR C66, 064001 (2002))

□ N³LO: (a) + (b) + (c) + (d) + (e) + (f) + rel

V.Bernard et al., PR C77, 064004 (2008) - long range contributions (a), (b), (c)

V.Bernard et al., PR C84, 054001 (2011) - short range terms (e)

and leading relativistic corrections

N³LO contributions do not involve any unknown low energy constants !

The full N³LO 3NF depends on two parameters c_D and c_E coming with (d) and (f) terms, respectively.

They are adjusted to two chosen 3N observables.

□ N⁴LO (longest range contributions): (a) + (b) + (c) + (d) + (e) + (f)
(H.Krebs et al., arXiv:1203.0067)

Przyczynki krótkozasięgowe (człony kontaktowe) w sile 3NF N4LO:

L. Girlanda, A. Kievsky, M. Viviani, and L. E. Marcucci, *Phys. Rev. C* **99**, 054003 (2019).

L. Girlanda, A. Kievsky, and M. Viviani, *Phys. Rev. C* **84**, 014001 (2011).

L. Girlanda, A. Kievsky, and M. Viviani, *Phys. Rev. C* **102**, 019903(E) (2020).

$$\begin{aligned}
 V_{3N}^{N4LO} \equiv & \sum_{i \neq j \neq k} E_1 \vec{q}_i^2 + E_2 \vec{q}_i^2 \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + E_3 \vec{q}_i^2 \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + E_4 \vec{q}_i^2 \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + E_5 (3 \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_i \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \vec{q}_i^2 \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j) \\
 & + E_6 (3 \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_i \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \vec{q}_i^2 \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j) \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + i E_7 \vec{q}_i \times (\vec{K}_i - \vec{K}_j) \cdot (\vec{\sigma}_i + \vec{\sigma}_j) + i E_8 \vec{q}_i \times (\vec{K}_i - \vec{K}_j) \cdot (\vec{\sigma}_i + \vec{\sigma}_j) \vec{\tau}_j \cdot \vec{\tau}_k \\
 & + E_9 \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_i \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_j + E_{10} \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_i \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_j \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + E_{11} \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_i + E_{12} \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_i \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + E_{13} \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_i \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_k
 \end{aligned}$$

Ponieważ rozkłady na fale cząstkowe wkładów E_9 i E_{11} jak również E_{10} and E_{12} są identyczne, liczba niezależnych współczynników natężeń tych członów E_i wynosi 11.

W powyższych pracach grupa z Pisy pokazała, że człony te są istotne dla opisu wielkości polaryzacyjnych w elastycznym rozpraszaniu pd poniżej progu na breakup deuteronu.

Również w E. Epelbaum *et al.*, *Eur. Phys. J. A* **56**, 92 (2020) pokazano, że wkłady E_1 i E_7 dają znaczący efekt w wielkościach polaryzacyjnych w rozpraszaniu Nd przy pośrednich energiach.

Wyniki tych badań implikują, że opis rozpraszania Nd poniżej progu na produkcję pionów prawdopodobnie będzie wymagać rozwinięcia chiralnego 3NF przynajmniej do rzędu N4LO !

Zatem ostatecznym wyzwaniem jest przeprowadzenie obliczeń kontinuum 3N z chiralnym potencjałem NN i chiralną siłą 3NF, oba w rozwinięciu chiralnym przynajmniej do rzędu N⁴LO !

Taka siła 3NF będzie zawierać oprócz części wolnej od parametrów dodatkowo 15 krótkozasięgowych wkładów o 13 nieznanach natężeniach (D, E, E_i), które muszą zostać określone poprzez dopasowanie do danych w układzie 3N !

Czy jest możliwym określenie w sposób jednoznaczny 13-tu nieznanach współczynników (natężeń) dla członów krótkozasięgowych w chiralnej sile 3NF poprzez dopasowanie przewidywań teorii do dostępnych danych 3N ?

Jest oczywistym, że czynnik czasowy w obliczeniach Faddeeva kontinuum trzynukleonowego będzie decydujący dla odpowiedzi na to pytanie.

Ile potrzeba czasu by rozwiązać 3N równanie Faddeeva z siłą 3NF ?

Formalizm 3N równań Faddeeva:

Hamiltonian 3N zawiera oddziaływania par nukleonów: $v_{NN} = v_{12} + v_{23} + v_{31}$ oraz siłę 3NF: $V_{123} = V^{(1)} + V^{(2)} + V^{(3)}$, którą można rozłożyć na trzy składowe Faddeeva $V^{(i)}$, symetryczne we wskaźnikach cząstek $j, k \neq i \in \{1, 2, 3\}$.

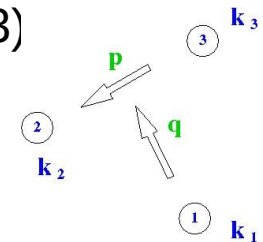
Ponieważ nukleony traktujemy jako cząstki identyczne (formalizm izospinu) wyróżniamy podukład (2,3) i używamy jedynie $V^{(1)}$ w równaniu całkowym typu Faddeeva dla operatora breakupu T, który opisuje rozpraszanie Nd:

$$T|\phi\rangle = tP|\phi\rangle + (1 + tG_0)V^{(1)}(1 + P)|\phi\rangle + tPG_0T|\phi\rangle + (1 + tG_0)V^{(1)}(1 + P)G_0T|\phi\rangle.$$

$|\phi\rangle = |\vec{q}_0\rangle|\phi_d\rangle$ opisuje swobodny ruch nukleonu i deuteronu z pędem względnym \mathbf{q}_0

Rozwiązujemy równanie Faddeeva w bazie pędowych stanów cząstkowych $|pq\tilde{\alpha}\rangle$ określonych przez wielkości pędów Jacobiego p i q oraz zbiór dyskretnych liczb kwantowych $\tilde{\alpha}$ dla nukleonu spektatora 1 oraz podukładu (2,3)

$$|pq\tilde{\alpha}\rangle \equiv \left| pq(ls)j \left(\lambda \frac{1}{2} \right) I(jI)J \left(t \frac{1}{2} \right) T \right\rangle$$



Amplituda przejścia dla elastycznego rozpraszania do stanu końcowego Nd $|\phi'\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle\phi'|U|\phi\rangle &= \langle\phi'|PG_0^{-1}|\phi\rangle + \langle\phi'|V^{(1)}(1+P)|\phi\rangle \\ &+ \langle\phi'|V^{(1)}(1+P)G_0T|\phi\rangle + \langle\phi'|PT|\phi\rangle\end{aligned}$$

a amplituda przejścia dla reakcji rozszczepienia deuteronu przez :

$$\langle\vec{p}\vec{q}|U_0|\phi\rangle = \langle\vec{p}\vec{q}|(1+P)T|\phi\rangle$$

gdzie końcowy stan breakupu z trzema swobodnymi nukleonami $|\mathbf{p}\mathbf{q}\rangle$ dany jest poprzez (względne) wektory pędów Jacobiego \mathbf{p} oraz \mathbf{q} .

By rozwiązać to równanie Faddeeva dla danej kombinacji potencjału NN i siły 3NF oraz policzyć obserwable w rozpraszaniu elastycznym i reakcji breakupu potrzeba **~2 godzin** czasu komputerowego.

Taki długi czas wymaga drastycznego przyspieszenia obliczeń i wymusza, w celu przeprowadzenia wydajnego i efektywnego dopasowania do danych 3N, opracowanie schematu szybkich rozwiązań równań Faddeeva !

Podstawowe pytanie: czy da się zredukować czas potrzebny do otrzymania przewidywań teoretycznych z **2 godzin** do **kilku sekund** ? Odpowiedź jest : **tak**.

Emulator : szybkie rozwiązania 3N równań Faddeeva

[30] H. Witała, J. Golak, R. Skibiński, and K. Topolnicki, *Few-Body Syst.* **62**, 23 (2021).

[31] H. Witała, J. Golak, and R. Skibiński, *Eur. Phys. J. A* **57**, 241 (2021).

Przyspieszenie obliczeń bazuje na możliwości zastosowania podejścia perturbacyjnego w celu włączenia członów kontaktowych chiralnej siły 3NF do obliczeń kontinuum 3N.

Członki kontaktowe są ograniczone do małych wartości całkowitego krętu J układu 3N i są niezerowe jedynie w kilku pierwszych stanach fal cząstkowych dla danego J^π układu 3N.

Rozłóżmy chiralną 3NF $V^{(1)}$ w danym rzędzie rozwinięcia chiralnego na część niezależną od parametrów $V(\theta_0)$ oraz na sumę N członów kontaktowych $c_i \Delta V_i$ z natężeniami c_i :

$$V^{(1)} = V(\theta_0) + \Delta V(\theta) = V(\theta_0) + \sum_{i=1}^N c_i \Delta V_i$$

with $\theta_0 = (c_i = 0, i = 1, \dots, N)$ and $\theta = (c_i, i = 1, \dots, N)$

Podzielmy stany cząstkowe 3N na dwa zbiory: β i α , gdzie zbiór β zawiera stany z niezerowymi $\Delta V(\theta)$ i stany najmocniej z nimi sprzężone poprzez operator permutacji P .

Wprowadzając $T(\theta_0)$ i $\Delta T(\theta)$: $T \equiv T(\theta) = T(\theta_0) + \Delta T(\theta)$

otrzymamy z równania Faddeeva następujące równania na elementy $\langle \alpha | T(\theta_0) | \phi \rangle$ i $\langle \alpha | \Delta T(\theta) | \phi \rangle$ ($\langle \beta | T(\theta_0) | \phi \rangle$ i $\langle \beta | \Delta T(\theta) | \phi \rangle$) :

Emulator : szybkie rozwiązania 3N równań Faddeeva

$$\begin{aligned}\langle\alpha|T(\theta_0)|\phi\rangle &= \langle\alpha|tP|\phi\rangle + \langle\alpha|(1+tG_0)V(\theta_0)(1+P)|\phi\rangle \\ &+ \langle\alpha|tPG_0T(\theta_0)|\phi\rangle \\ &+ \langle\alpha|(1+tG_0)V(\theta_0)(1+P)G_0T(\theta_0)|\phi\rangle\end{aligned}\quad (1)$$

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\Delta T(\theta)|\phi\rangle &= \langle\alpha|tPG_0\Delta T(\theta)|\phi\rangle \\ &+ \langle\alpha|(1+tG_0)V(\theta_0)(1+P)G_0\Delta T(\theta)|\phi\rangle\end{aligned}\quad (2)$$

$$\begin{aligned}\langle\beta|T(\theta_0)|\phi\rangle &= \langle\beta|tP|\phi\rangle + \langle\beta|(1+tG_0)V(\theta_0)(1+P)|\phi\rangle \\ &+ \langle\beta|tPG_0T(\theta_0)|\phi\rangle \\ &+ \langle\beta|(1+tG_0)V(\theta_0)(1+P)G_0T(\theta_0)|\phi\rangle\end{aligned}\quad (3)$$

$$\begin{aligned}\langle\beta|\Delta T(\theta)|\phi\rangle &= \langle\beta|(1+tG_0)\Delta V(\theta)(1+P)|\phi\rangle \\ &+ \langle\beta|(1+tG_0)\Delta V(\theta)(1+P)G_0T(\theta_0)|\phi\rangle \\ &+ \langle\beta|(1+tG_0)V(\theta_0)(1+P)G_0\Delta T(\theta)|\phi\rangle \\ &+ \langle\beta|(1+tG_0)\Delta V(\theta)(1+P)G_0\Delta T(\theta)|\phi\rangle \\ &+ \langle\beta|tPG_0\Delta T(\theta)|\phi\rangle.\end{aligned}\quad (4)$$

- (1) i (3) są równaniami Faddeeva dla $T(\theta_0)$
- (4) dla $\langle\beta|\Delta T(\theta)|\phi\rangle$ można rozwiązać w ramach stanów $|\beta\rangle$
- korzystając z niego $\langle\alpha|\Delta T(\theta)|\phi\rangle$ jest następnie obliczone z (2) :

Emulator : szybkie rozwiązania 3N równań Faddeeva

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \Delta T(\theta) | \phi \rangle &= \left\langle \alpha | t P G_0 \sum_{\beta} \int_{p'q'} |p'q'\beta \rangle \right\rangle \langle p'q'\beta | \Delta T(\theta) | \phi \rangle \\ &+ \langle \alpha | (1 + t G_0) V(\theta_0) (1 + P) G_0 \sum_{\beta} \int_{p'q'} |p'q'\beta \rangle \langle p'q'\beta | \Delta T(\theta) | \phi \rangle \end{aligned} \quad (5)$$

Krótko, następujące kroki tworzą ten perturbacyjny schemat obliczeniowy :

- rozwiązujemy 3N równanie Faddeeva z potencjałem NN oraz z siłą 3NF ograniczoną do części wolnej od parametrów (set $\theta_0 = (0, \dots, 0)$). Ten krok wykonujemy tylko raz bez względu na ilość wymaganych zmian parametrów natężeń członów kontaktowych.
- w następnym kroku wykonujemy podejście perturbacyjne, rozwiązując najpierw (4) dla $\langle \beta | \Delta T(\theta) | \phi \rangle$ obliczając następnie $\langle \alpha | \Delta T(\theta) | \phi \rangle$ z (5).
- w ostatnim kroku wyznaczamy $\langle \tilde{\alpha} | T(\theta) | \phi \rangle$.

Pozwala to zredukować czas obliczeń o faktor ~ 4 (~ 30 minut) w porównaniu do czasu wymaganego na ściśle rozwiązanie równań Faddeeva (~ 2 godzin). Otrzymane rozwiązania zadziwiająco dobrze odtwarzają dokładne przewidywania dla obserwabli elastycznego rozpraszania. (zbiór β z $j < 3$ i pozostały zbiór α z $j < 6$).

Zbyt mała redukcja czasu by wykonać dopasowanie do danych 3N !

Emulator : szybkie rozwiązania 3N równań Faddeeva

Czas obliczeń można dalej drastycznie zmniejszyć zauważając, że człon $\langle \beta | (1 + tG_0) \Delta V(\theta) (1 + P) G_0 \Delta T(\theta) | \phi \rangle$ w (4) można pominąć ($\Delta V(\theta)$ małe) :

$$\begin{aligned} \langle \beta | \Delta T(\theta) | \phi \rangle &= \langle \beta | (1 + tG_0) \Delta V(\theta) (1 + P) | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | (1 + tG_0) \Delta V(\theta) (1 + P) G_0 T(\theta_0) | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | (1 + tG_0) V(\theta_0) (1 + P) G_0 \Delta T(\theta) | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | (1 + tG_0) \Delta V(\theta) (1 + P) G_0 \Delta T(\theta) | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | t P G_0 \Delta T(\theta) | \phi \rangle . \end{aligned} \tag{6}$$

To równanie pozwala przenieść liniową zależność od natężeń c_i z $\Delta V(\theta)$ na $\Delta T(\theta)$.

Mianowicie, niech $\langle \beta | \Delta T_i | \phi \rangle$ będzie rozwiązaniem (6) dla parametrów $\theta_i = (c_i = 1, c_{k \neq i} = 0)$:

$$\begin{aligned} \langle \beta | \Delta T_i | \phi \rangle &\equiv \langle \beta | (1 + tG_0) \Delta V_i (1 + P) | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | (1 + tG_0) \Delta V_i (1 + P) G_0 T(\theta_0) | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | (1 + tG_0) V(\theta_0) (1 + P) G_0 \Delta T_i | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | t P G_0 \Delta T_i | \phi \rangle . \end{aligned} \tag{7}$$

Emulator : szybkie rozwiązania 3N równań Faddeeva

Mnożąc (7) przez c_i i sumując po „i” otrzymamy:

$$\begin{aligned} \langle \beta | \sum_i c_i \Delta T_i | \phi \rangle &\equiv \langle \beta | (1 + tG_0) \sum_i c_i \Delta V_i (1 + P) | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | (1 + tG_0) \sum_i c_i \Delta V_i (1 + P) G_0 T(\theta_0) | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | (1 + tG_0) V(\theta_0) (1 + P) G_0 \sum_i c_i \Delta T_i | \phi \rangle \\ &+ \langle \beta | t P G_0 \sum_i c_i \Delta T_i | \phi \rangle, \end{aligned} \tag{8}$$

Zatem rozwiązanie (6) dla $\Delta V(\theta) = \sum_{i=1}^N c_i \Delta V_i$ jest dane przez:

$$\langle \beta | \Delta T(\theta) | \phi \rangle = \sum_{i=1}^N c_i \langle \beta | \Delta T_i | \phi \rangle \tag{9}$$

Emulator : szybkie rozwiązania 3N równań Faddeeva

W ten sposób obliczenie obserwabli dla danej energii dla dowolnej kombinacji natężeń c_i redukuje się do jednorazowego rozwiązania $N+1$ równań Faddeeva : jedno dla $T(\theta_0)$ i N dla ΔT_i . Najpierw znajdujemy rozwiązanie dla $\langle \alpha(\beta) | T(\theta_0) | \phi \rangle$. Następnie rozwiązujemy (7) dla $\langle \beta | \Delta T_i | \phi \rangle$ i obliczamy $\langle \alpha | \Delta T_i | \phi \rangle$ z użyciem (5). Dla dowolnej kombinacji natężeń c_i amplitudy $\langle \tilde{\alpha} | T(\theta = (c_i, i = 1, \dots, N)) | \phi \rangle$ są dane przez prostą sumę:

$$\langle \alpha | T(\theta) | \phi \rangle = \langle \alpha | T(\theta_0) | \phi \rangle + \sum_i c_i \langle \alpha | \Delta T_i | \phi \rangle,$$

$$\langle \beta | T(\theta) | \phi \rangle = \langle \beta | T(\theta_0) | \phi \rangle + \sum_i c_i \langle \beta | \Delta T_i | \phi \rangle.$$



Prowadzi to do drastycznej redukcji czasu obliczeń obserwabli rzędu sekund.

Bardzo ważnym dla procesu dopasowania do danych jest fakt znajomości dla każdej obserwabli gradientu względem c_i dla każdej kombinacji natężeń.

Czy jest możliwym wyznaczenie 13 parametrów chiralnej 3NF poprzez dopasowanie teorii do danych?

PHYSICAL REVIEW C **105**, 054004 (2022)

Significance of chiral three-nucleon force contact terms for understanding of elastic nucleon-deuteron scattering

H. Witała , J. Golak, and R. Skibiński 

Equipped with the proposed emulator we investigate the significance of the 3NF contact terms for understanding the Nd elastic scattering

chiral SMS $N^4\text{LO}^+ NN$ potential of the Bochum group with the regularization parameter $\Lambda = 450$ MeV, combined with the $N^2\text{LO}$ chiral 3NF and supplemented by all subleading $N^4\text{LO}$ 3NF contact terms

$$V_{3N}^{N^2\text{LO}} = - \sum_{i \neq j \neq k} \frac{g_A}{8F_\pi^2} D \frac{\vec{\sigma}_j \cdot \vec{q}_j}{\vec{q}_j^2 + M_\pi^2} (\vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j) (\vec{\sigma}_i \cdot \vec{q}_j) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq k} E (\vec{\tau}_j \cdot \vec{\tau}_k).$$

$$\begin{aligned} V_{3N}^{N^4\text{LO}} = & \sum_{i \neq j \neq k} E_1 \vec{q}_i^2 + E_2 \vec{q}_i^2 \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + E_3 \vec{q}_i^2 \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j + E_4 \vec{q}_i^2 \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + E_5 (3\vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_i \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \vec{q}_i^2 \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j) \\ & + E_6 (3\vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_i \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j - \vec{q}_i^2 \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j) \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + iE_7 \vec{q}_i \times (\vec{K}_i - \vec{K}_j) \cdot (\vec{\sigma}_i + \vec{\sigma}_j) + iE_8 \vec{q}_i \times (\vec{K}_i - \vec{K}_j) \cdot (\vec{\sigma}_i + \vec{\sigma}_j) \vec{\tau}_j \cdot \vec{\tau}_k \\ & + E_9 \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_i \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_j + E_{10} \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_i \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_j \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + E_{11} \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_i + E_{12} \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_i \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_j + E_{13} \vec{q}_i \cdot \vec{\sigma}_j \vec{q}_j \cdot \vec{\sigma}_i \vec{\tau}_i \cdot \vec{\tau}_k \end{aligned}$$

To all these contact terms we applied the same nonlocal Gaussian regulator with the cutoff parameter $\Lambda = 450$ MeV.

The strengths D , E , and E_i can be expressed by dimensionless coefficients c_D , c_E , and c_{E_i}

$$D = \frac{c_D}{F_\pi^2 \Lambda_\chi}, \quad E = \frac{c_E}{F_\pi^4 \Lambda_\chi}, \quad E_i = \frac{c_{E_i}}{F_\pi^4 \Lambda_\chi^3} \quad \text{where } F_\pi = 92.4 \text{ MeV is the pion-decay constant and } \Lambda_\chi = 700 \text{ MeV}$$

E. Epelbaum *et al.*, *Eur. Phys. J. A* **56**, 92 (2020)

TABLE II. The data basis used for fixing the strengths of the contact terms c_i .

E [MeV]	$\frac{d\sigma}{d\Omega}$	A_y	iT_{11}	T_{20}	T_{21}	T_{22}
10	<i>nd</i> [40], <i>pd</i> [41]	<i>nd</i> [42], <i>pd</i> [41,43]	<i>pd</i> [43,44]	<i>pd</i> [43]	<i>pd</i> [43]	<i>pd</i> [43]
70	<i>pd</i> [45]	<i>pd</i> [46] (65 MeV)	<i>pd</i> [45]	<i>pd</i> [45]	<i>pd</i> [45]	<i>pd</i> [45]
135	<i>pd</i> [45,47]	<i>pd</i> [48,49]	<i>pd</i> [45]	<i>pd</i> [45]	<i>pd</i> [45]	<i>pd</i> [45]
190	<i>pd</i> [48]	<i>pd</i> [48]	<i>pd</i> [50]	<i>pd</i> [50]	<i>pd</i> [50]	<i>pd</i> [50]
250	<i>nd</i> [51], <i>pd</i> [52]	<i>pd</i> [52]	<i>pd</i> [53]	<i>pd</i> [53]	<i>pd</i> [53]	<i>pd</i> [53]

To these data we applied the least-squares method by introducing the $\chi^2(c_i)$ merit function:

$$\chi^2(c_i) = \sum_{\text{Obs}, \theta_k, E} \left[\frac{\text{Obs}^{\text{theor}}(c_j, \theta_k, E) - \text{Obs}^{\text{expt}}(\theta_k, E)}{\Delta \text{Obs}^{\text{expt}}(\theta_k, E)} \right]^2,$$

and looked for minimum of $\chi^2(c_i)$ with respect to the strengths c_i .

To find the minimum we applied the Levenberg-Marquard method



W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, Cambridge, 1992).
D. W. Marquardt, *J. Soc. Ind. Appl. Math.* **11**, 431 (1963).

which, in addition to χ^2 values, requires also the gradient of χ^2 with respect to the parameters c_i . Since the dependence of the elastic-scattering transition amplitude U on c_i has the form

$$U = \bar{U} + \sum_i c_i U_i + \sum_{i,k} c_i c_k U_{ik},$$

the gradient of χ^2 is quickly accessible for any set of strengths c_i .

Przed wykonaniem dopasowania do danych 3N, ze względu na dużą liczbę parametrów, należy sprawdzić czy w ogóle jest możliwym znalezienie w sposób jednoznaczny tych wszystkich parametrów. Jedynie w przypadku pozytywnej odpowiedzi będzie można otrzymać wartościowe przewidywania bazujące na otrzymanym Hamiltonianie 3N.

W pierwszym kroku zbadaliśmy wzorzec przyczynków członów kontaktowych chiralnej siły 3NF dla różnych obserwabi elastycznego rozpraszania Nd.

By znaleźć ten wzorzec czułości obserwabi na konkretną składową krótkozasięgową w 3NF, policzyliśmy dla wybranych energii wszystkie elastyczne obserwable dołączając po kolei do części 3NF wolnej od parametrów jedynie jedną składową kontaktową o natężeniu c_{Ei} między $c_{Ei}=-2.0$ do $c_{Ei}=+2.0$. Dla każdej obserwabi badaliśmy indukowane zmiany kątowe jak również wielkość Δ , która pokazuje znak i wielkość procentowej zmiany przewidywania otrzymanego z niezależną od parametrów składową 3NF, wywołanej tą konkretną składową kontaktową, uśrednione po kątach c.m. :

$$\Delta \equiv \Delta(c_j) = \frac{1}{N_\theta} \sum_{\theta_k} \frac{\text{Obs}(c_j, \theta_k) - \text{Obs}(\theta_0, \theta_k)}{\text{Obs}(\theta_0, \theta_k)} \times 100\%,$$

with $N_\theta = 73$ and step of θ_k equal 2.5° .

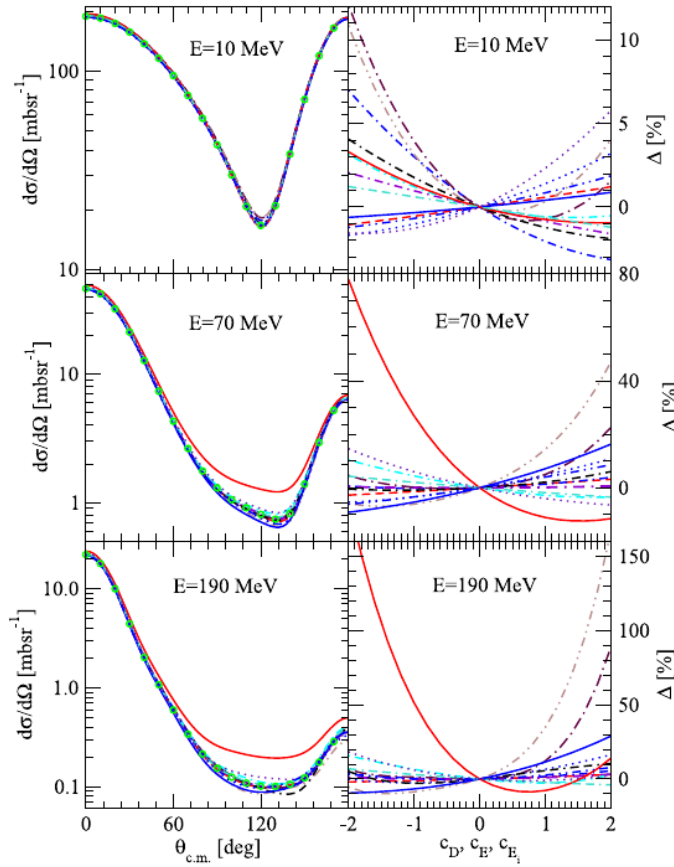
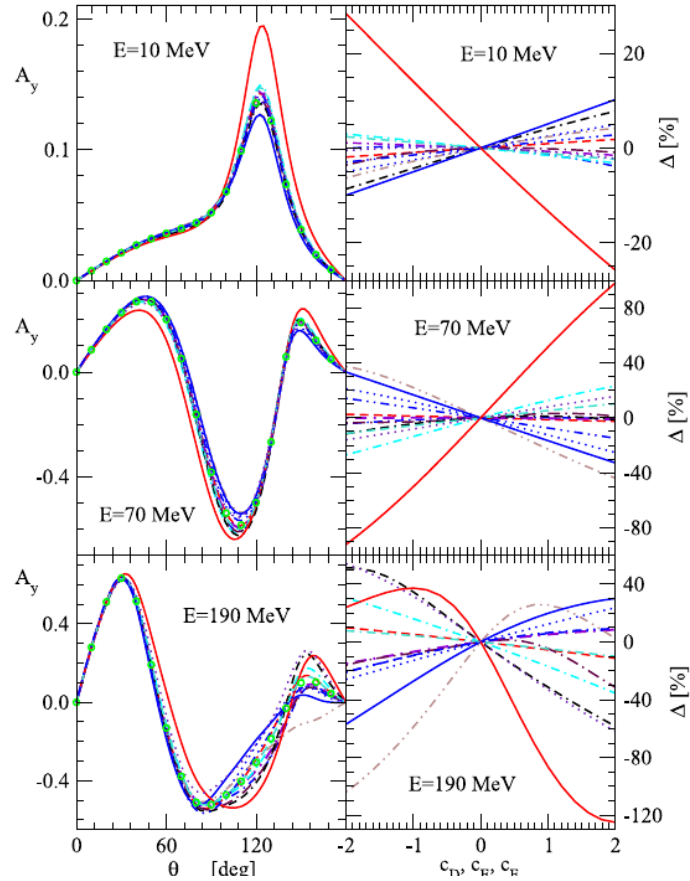


FIG. 1. (left column) The elastic nd scattering differential cross section $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ at the incoming neutron laboratory energies $E = 10, 70,$ and 190 MeV. The lines depicted by (green) circles show the results obtained with the SMS N^4LO^+ NN potential with the regularization parameter $\Lambda = 450$ MeV, supplemented by the parameter-free 2π -exchange N^2LO $3NF$. Other lines are the results when the above dynamics is augmented with a single contact term of strength $c_i = -1.0$: D : (red) short-dashed, E : (blue) short-dashed-dotted, E_1 : (blue) dotted, E_2 : (violet) short-dashed-dotted, E_3 : (cyan)



short-dashed-dotted, E_4 : (maroon) long-dashed-dotted, E_5 : (brown) short-dashed-double-dotted, E_6 : (black) double-dashed-dotted, E_7 : (blue) solid, E_8 : (red) solid, E_9 : (turquoise) double-dashed-dotted, E_{10} : (indigo) dotted, and E_{13} : (blue) dashed-double-dotted. In the right column a percentage deviations Δ (see text) of the single contact term predictions with respect to the parameter-free part of the N^2LO $3NF$ $V(\theta_0)$ is shown as a function of the strength c_i . The lines in the right column correspond to those in the left column.

Znaleźliśmy, że wzorzec czułości zmienia się z obserwabłą, energią i z wnoszącym wkład członem kontaktowym. Taki zmienny wzorzec czułości daje nadzieję na jednoznaczne wyznaczenie natężeń c_i poprzez dopasowanie przewidywań teoretycznych do danych rozpraszania elastycznego Nd.

Należy podkreślić, że praktycznie dla większości zbadanych obserwabli i energii, wkłady od członów kontaktowych N^2LO D i E, wyrażone poprzez Δ , nie są najbardziej znaczące.

Obliczenie wartości oczekiwanych członów kontaktowych N^4LO w 3H (biorąc ich $c_i=1.0$), pokazuje, że niemal wszystkie, z wyjątkiem E_7 and E_8 , dają porównywalne i znaczne wkłady do energii potencjalnej trytonu.

Dlatego **człony kontaktowe N^4LO są ważne nie tylko w kontinuum $3N$ ale również w stanach związanych i powinny być włączone do Hamiltonianu $3N$.**

W następnym kroku zbadaliśmy, czy taki zmienny wzorzec dużych czułości wraz z dostępem do danych Nd o dużej jakości, wystarczą do wyznaczenia wszystkich 13-tu parametrów. Wygenerowaliśmy pseudo-dane (przekroje czynne, protonowe i deutronowe zdolności analizujące) dla naszych energii, z użyciem naszej dynamiki i biorąc wszystkie $c_i=1.0$. Do tych pseudo-danych zastosowaliśmy naszą metodę najmniejszych kwadratów.

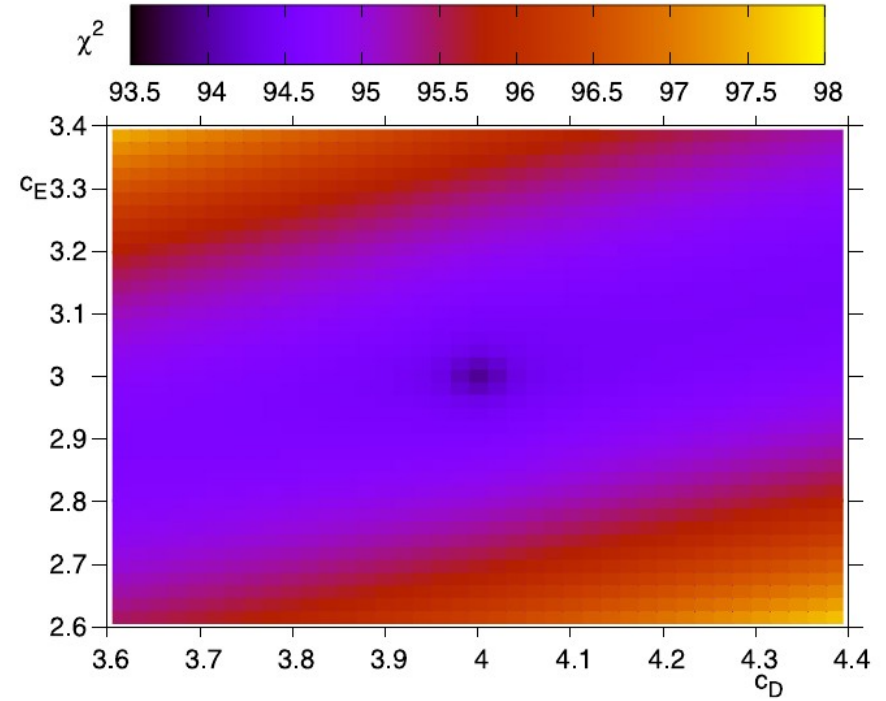
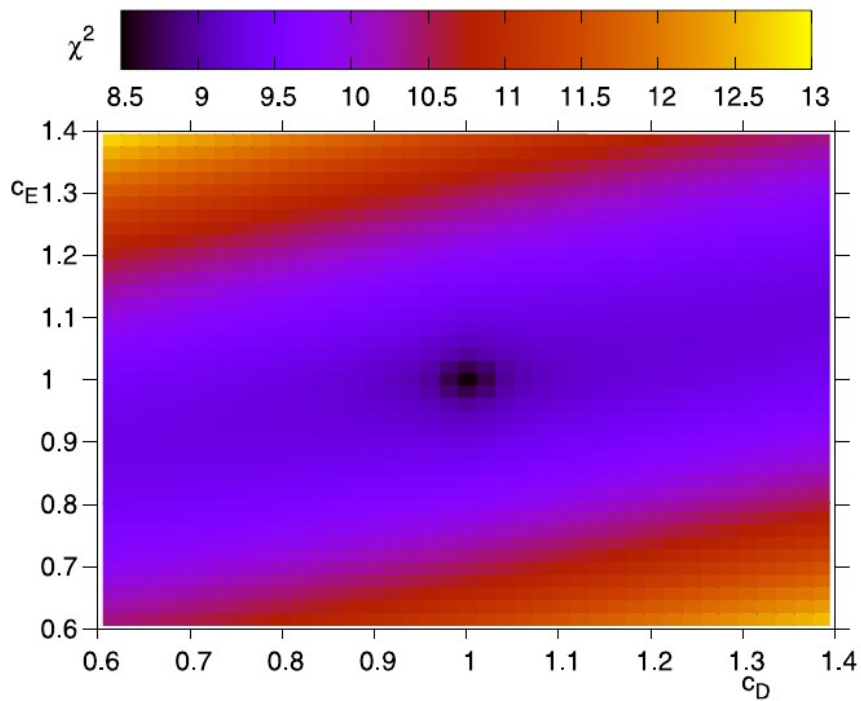
Startując z różnych początkowych wartości natężeń c_i okazało się zadaniem stosunkowo łatwym odtworzyć bardzo dokładnie wartości natężeń, z którymi były wygenerowane pseudo-dane. We wszystkich przypadkach odtworzyliśmy natężenia pseudo-danych poprzez dopasowanie do pseudo-danych dla poszczególnych energii czy też przeprowadzając dopasowanie dla wielu energii włączając wszystkie energie.

Poszliśmy o krok dalej i zbadaliśmy sytuację, w której dane 3N są fitowane z niekompletną teorią, tzn. gdy brakuje pewnych elementów dynamiki. Taka sytuacja ma miejsce np. gdy fitujemy natężenia krótkozasięgowych członów kontaktowych bez włączenia do obliczeń składowych wolnych od parametrów siły 3NF w rzędzie N^3LO (N^4LO).

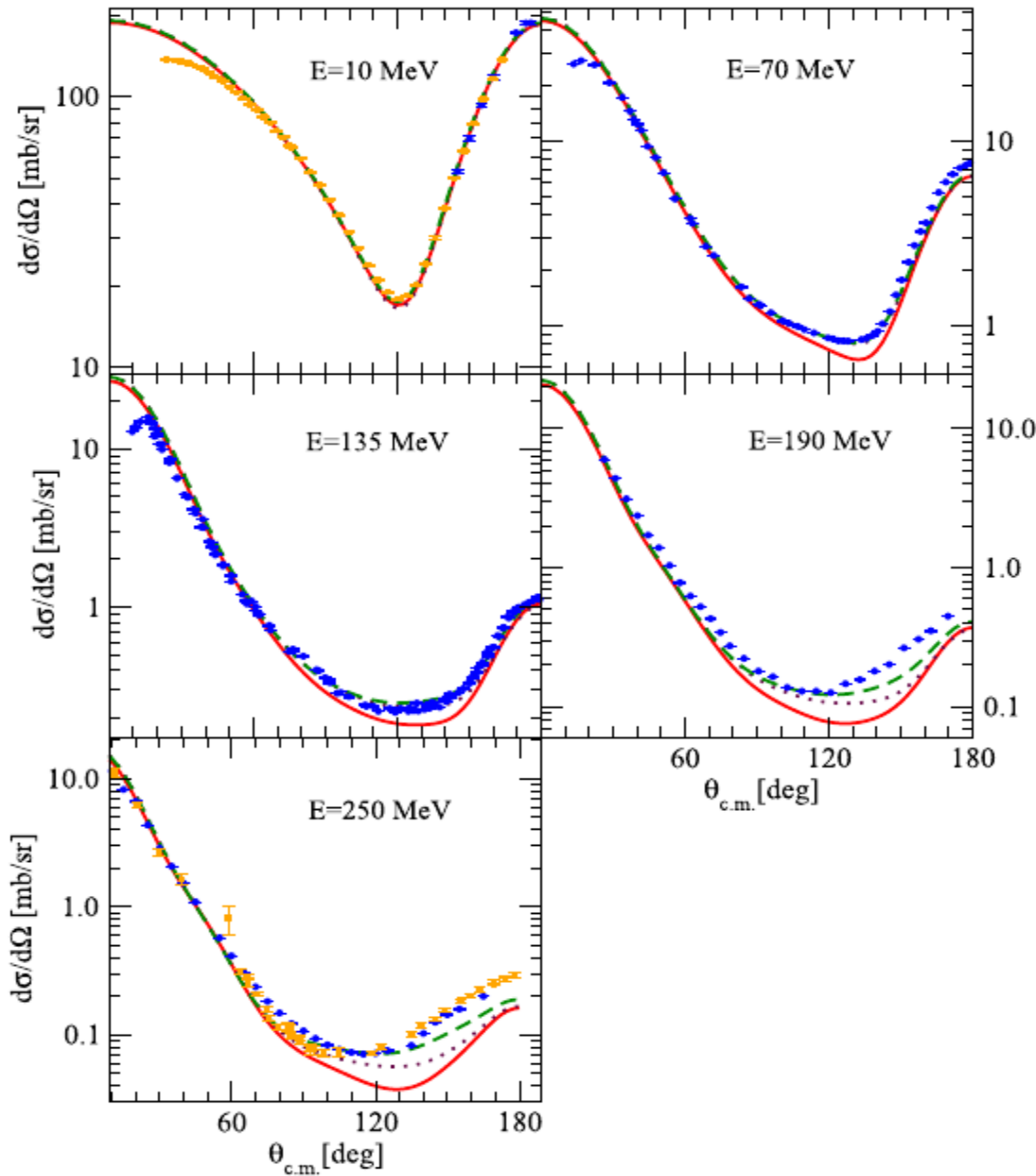
By zbadać taki przypadek wygenerowaliśmy dla $E=70$ MeV pseudo-dane biorąc chiralny potencjał NN N^4LO^+ SMS wraz z pełną siłą 3NF N^2LO 3NF z natężeniami wkładów kontaktowych D i E $c_D=c_E=1.0$. Te pseudo-dane zostały poddane metodzie najmniejszych kwadratów w celu znalezienia natężeń c_D and c_E z użyciem kompletnej dynamiki oraz dynamiki bez wkładu wolnej od parametrów wymiany 2π w sile 3NF N^2LO .

Z kompletną dynamiką łatwo odtworzyliśmy natężenia pseudo-danych otrzymując $c_D=1.00 \pm 0.08$ i $c_E=1.00 \pm 0.03$, oraz wartość χ^2 w minimum $\chi^2=0.0$.

Gdy fitowanie przeprowadzono z niekompletną dynamiką otrzymaliśmy znaczne przesunięcie pozycji minimum χ^2 do większych wartości $c_D = 3.98 \pm 0.08$ i $c_E = 2.99 \pm 0.03$, z równoczesnym pogorszeniem jakości opisu pseudo-danych $\chi^2/N \approx 80$.

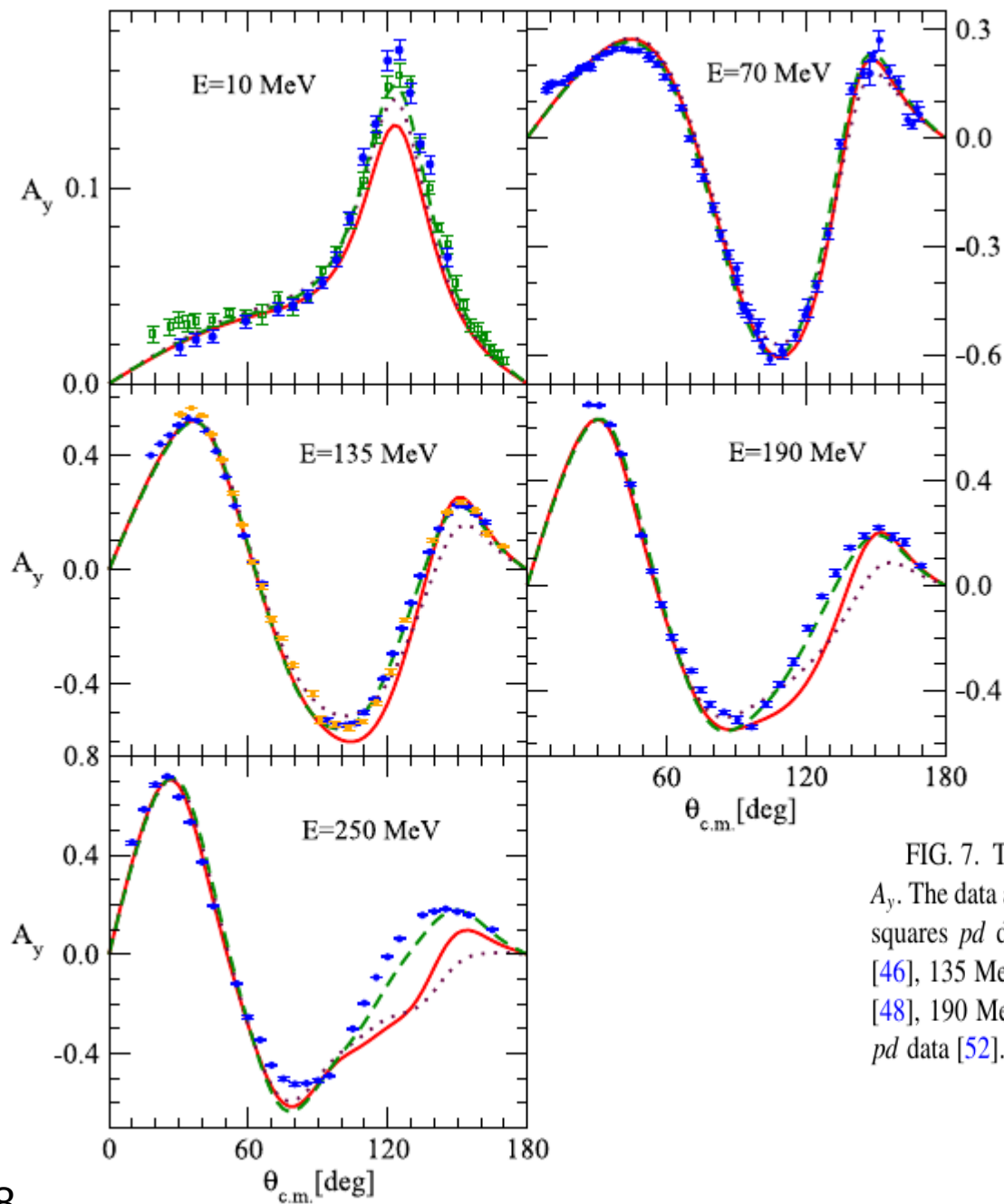


The maps of χ^2 per datum point (χ^2/N) values from fitting the pseudodata at $E = 70$ MeV with complete (left) and incomplete (right) theory.



red solid: _____ NN
 maroon dotted: NN+N2LO 3NF
 green dashed: - - - - fit

FIG. 6. The elastic Nd scattering differential cross section $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ at the incoming nucleon laboratory energies $E = 10, 70, 135, 190,$ and 250 MeV. The (red) solid lines were obtained with the SMS N^4LO^+ NN potential with the regularization parameter $\Lambda = 450$ MeV. When that potential is supplemented with the N^2LO 3NF with the strengths of the contact terms $c_d = 2.0$ and $c_E = 0.2866$ (combination reproducing the 3H binding energy and providing a good description of the 70 MeV pd cross sections) predictions are displayed with the (maroon) dotted lines. The (green) dashed lines show the results obtained with the strengths of contact terms presented in Table III, fixed in the multi-energy least squares fit to data at $E = 10, 70,$ and 135 MeV (shown in Table II). The (blue) circles and (orange) squares are 10 MeV nd data from Ref. [40] and pd data from Ref. [41], respectively. The (blue) circles at other energies are pd data from 70 MeV [45], 135 MeV [45,47], 190 MeV [48], 250 MeV [52]. The (orange) squares at 250 MeV are 248 MeV nd data of Ref. [51].



red solid: _____ NN
 maroon dotted: NN+N2LO 3NF
 green dashed: - - - - fit

FIG. 7. The same as in Fig. 6 but for the nucleon analyzing power A_y . The data are from 10 MeV (blue) circles nd data [42] and (green) squares pd data [43], 70 MeV (blue) circles pd data (at 65 MeV) [46], 135 MeV (blue) circles pd data [49] (orange) squares pd data [48], 190 MeV (blue) circles pd data [48], 250 MeV (blue) circles pd data [52].

Podsumowanie:

1. Zastosowanie zaproponowanego emulatora drastycznie przyspiesza obliczenia Faddeeva z siłami chiralnymi. Umożliwia on wyznaczenie wielkości krótkozasięgowych wkładów do chiralnej siły trzyciałowej poprzez dopasowanie przewidywań teroretycznych do danych eksperymentalnych. Ustalony w ten sposób Hamiltonian jądrowy stanowi podstawę przewidywań teroretycznych dla stanów i procesów jądrowych.
2. Biorąc dane Nd dla przekroju czynnego oraz protonowych i deuteronowych zdolności analizujących dla energii 10, 70, i 135 MeV, znaleźliśmy natężenia wszystkich wkładów kontaktowych, wykonując dopasowanie metodą najmniejszych kwadratów do tych danych z chiralną siłą 3NF zawierającą wolny od parametrów człon N²LO. Biorąc ustalony w ten sposób Hamiltonian 3N otrzymaliśmy:
 - bardziej poprawny opis fitowanych danych
 - znacznie polepszony opis niefitowanych danych przy energii 190 and 250 MeV
 - wyraźną poprawę opisu przy niskich- i pośrednich-energiach zdolności analizujących A_y and it_{11}
 - poprawę opisu przekroju czynnego dla wyższych energii wokół minimum i w obszarze tylnych kątów rozpraszania
3. Otrzymane wyniki są obiecujące i badanie to powinno być przeprowadzone z pełną chiralną siłą trzyciałową N⁴LO, co jest jednym z celów kolaboracji LENPIC