

2023.9.26 组会

刘隽喆

基本问题

Post-form 形式的source term收敛性很差

散射波函数不可归一，难以积分

能否使用离散谱的束缚态波函数去表示连续谱问题

1. Continuum bin states
2. Pseudo states

Bin state 方法

Bin state 的定义

$$u_l^{\text{bin}} = \sqrt{\frac{2}{\pi N_p}} \int_{k_{n-1}}^{k_n} dk g(k) u_l(k, r)$$

Delta 函数归一化

$$\int_0^{+\infty} dr u(k', r) u(k, r) = \frac{\pi}{2} \delta(k - k')$$

Bin state 归一化

$$N_p = \int_0^{\infty} |g(k)|^2 dk$$

插入完备基

$$\langle \chi_b(k) | V_{\text{post}} | \chi_a(k) \phi_a(r_a) \rangle = \sum_n \langle \chi_b(k) | \chi_n^{\text{bin}} \rangle \langle \chi_n^{\text{bin}} | V_{\text{post}} | \chi_a(k) \phi_a(r_a) \rangle$$

Bin state 方法

由于散射态波函数的delta函数归一化关系，只有落在对应的bin区间内的k才会有内积贡献

基变换

$$\begin{aligned}\langle u_l^*(k, r) | u_l^{\text{bin}(r)} \rangle &= \int dr u_l^*(k, r) \sqrt{\frac{2}{\pi N_p}} \int_{k_{n-1}}^{k_n} dk' g(k') u_l(k', r) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi N_p}} \int dk' g(k') \int dr u_l^*(k, r) u_l(k', r) \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi N_p}} \int dk' g(k') \frac{\pi}{2} \delta(k - k') \\ &= \sqrt{\frac{\pi}{2 N_p}} g(k)\end{aligned}$$

权重函数的几种选取方式

$$g(k) = 1$$

$$g(k) = e^{-i\delta_l(k)}$$

具体的代码实现

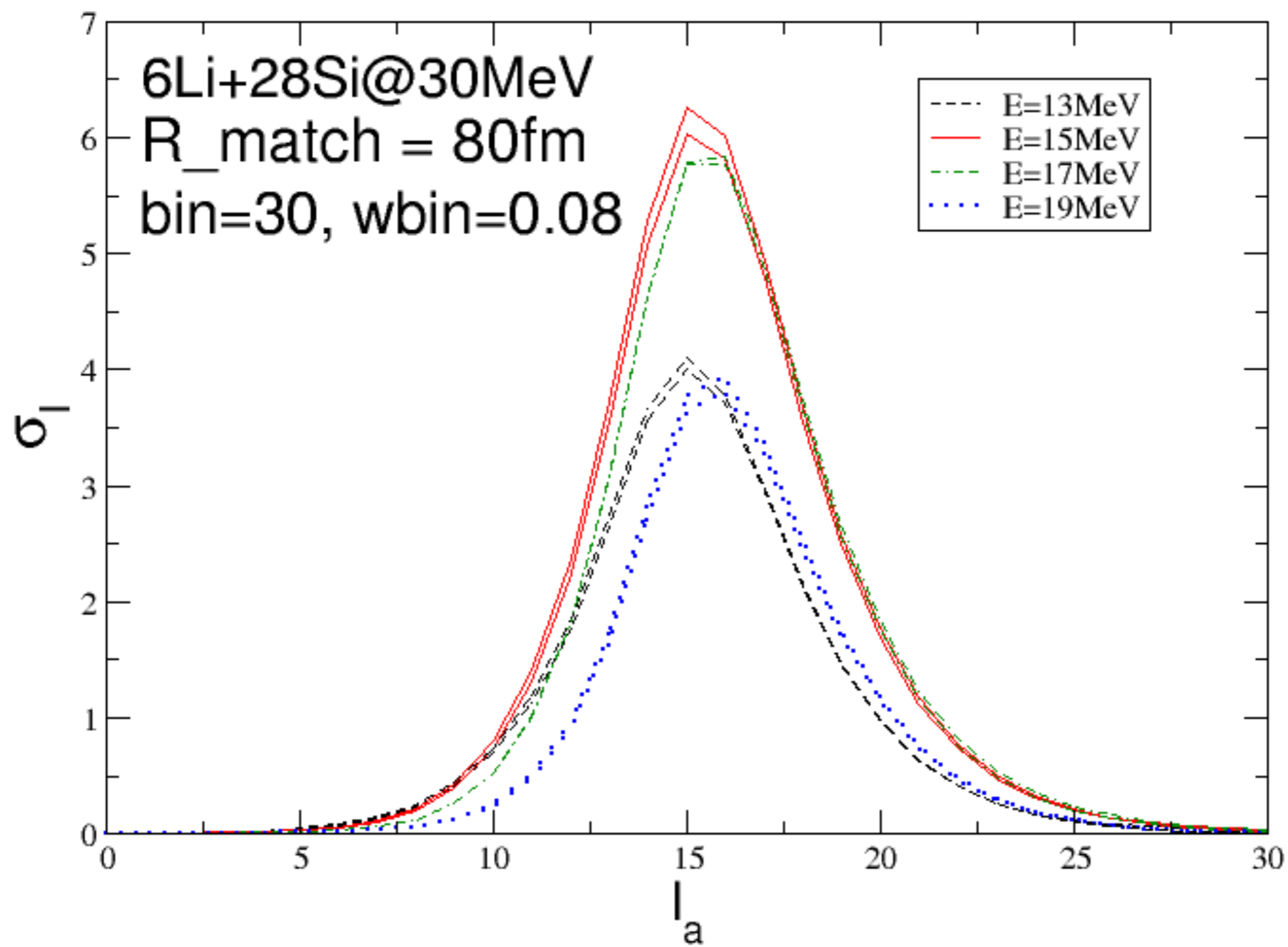
```
do i=1,nbin(counter)
    k=kk(i)
    ecm=(hbarc*k)**2/2/mub
    call chanb(counter,ecm,chi)
    do nch = 1, outspect%nchmax
        weight_func_g = 1./sqrt(S_matrix_l(nch-1))
        write(*,*) weight_func_g
        chi_bin(:,nch) = chi_bin(:,nch) + weight_func_g
        & * chi(:,nch) * kw(i)!carry out the integral
        norm_for_bin(nch) = norm_for_bin(nch) + abs(weight_func_g)**2 * kw(i)
    end do
end do

do nch = 1, outspect%nchmax
    chi_bin(:,nch)=chi_bin(:,nch)*sqrt(2./pi/norm_for_bin(nch))
end do
```

要点:

对一每一个积分格点，存储相关的S矩阵信息，作为权重。权重不仅是动量的函数，也是分波依赖的，同时归一化系数也是分波依赖的。

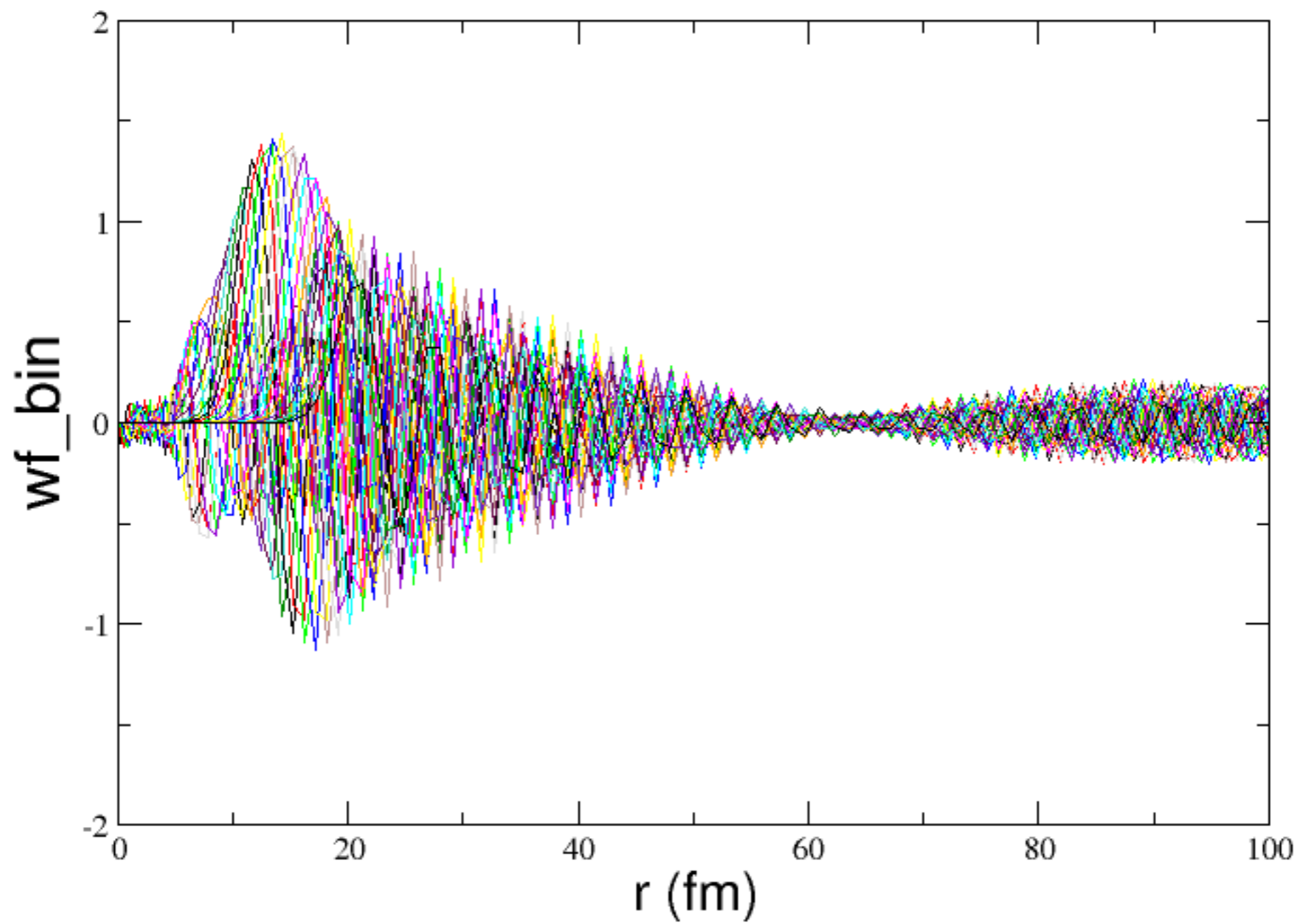
计算结果



调参的困难

1. 宽度不能太大，太大导致涵盖的动量太多，bin state的分割不够细致。但宽度也不能太小，太小收敛性依然特别差
2. Rmatch的选取，最好是在波包的统一节点处，这样的收敛性非常好
3. 通过看截面随分波的依赖，判断收敛性是否足够好
4. 强烈依赖于已经计算出的prior的结果，如果没有prior的结果，很难有调参的标准

调参的困难



Pseudo-state

使用THO basis对哈密顿量进行对角化，得到一些列特征向量：

$$\psi_{i,l} = \sum_i c_{i,n} R_{n,l}^{\text{THO}}$$

我们希望这些特征向量能近似地组成完备性关系：

$$\sum_i |\psi_{i,l}\rangle \langle \psi_{i,l}| = I$$

在source term中插入一个完备基

$$\sum_i \langle \chi_b(k) | \chi_i^{\text{pseu}} \rangle \langle \chi_i^{\text{pseu}} | V_{\text{post}} | \chi_a(k) \phi_a(r_a) \rangle$$

定义变换的系数

$$\langle \chi_b(k) | \chi_i^{\text{pseu}} \rangle = A_i$$