

Sveučilište u Zagrebu

Prirodoslovno-matematički fakultet

Marko Imbrišak

**Primjena aproksimacijske
metode mnogostrukosti s rubom
u nuklearnoj fizici**

Zagreb, 2017.

Ovaj rad izrađen je na Fizičkom odsjeku Prirodoslovno-matematičkog fakulteta Sveučilišta u Zagrebu, pod vodstvom prof. dr. sc. Tamare Nikšić te je predan na natječaj za dodjelu Rektorove nagrade u akademskoj godini 2016./2017.

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Aproksimacijska metoda mnogostrukosti s rubom	3
2.1	Fisherova informacijska metrika	3
2.2	Optimalno računanje Christoffelovih simbola	6
2.3	Geodezijska jednađba	7
3	Test modela i numeričke implementacije	9
4	Primjena aproksimacijske metode mnogostrukosti s rubom u nuklearnoj fizici	15
4.1	Struktura Lagrangiana	15
4.2	Komponente Diracove jednađbe	16
4.3	Funkcional DD-PC1	18
5	Zaključak	31
6	Sažetak	33
7	Summary	34
8	Zahvala	35
	Literatura	36

1 Uvod

Opis većine prirodnih pojava temelji se na modelima koji uključuju određeni broj slobodnih parametara. Parametre modela možemo odrediti postupkom prilagodbe teorijskih predviđanja modela empirijskim podacima. Pritom najčešće nemamo na raspolaganju dovoljno podataka da bimo mogli razlučiti sve stupnjeve slobode modela te će stoga neke kombinacije parametara modela biti slabo određene. Modele koji pokazuju eksponencijalni raspon osjetljivosti predviđanja na promjene parametara zovemo aljkavi modeli ¹. Unatrag nekoliko godina pokrenuta su sustavna istraživanja mogućnost eliminiranja slabo određenih stupnjeva slobode modela, ali uz zadržavanje odgovarajuće kvalitete opisa promatrane pojave. Ukoliko bi se ovakav postupak pokazao uspješnim, imao bi izrazito velik potencijal za primjene u raznim područjima, od prirodnih preko biomedicinskih pa sve do društvenih znanosti [1, 2, 3, 4].

Ovaj rad predstavlja nastavak nedavnih istraživanja mogućnosti primjene koncepta informacijske geometrije, odnosno aproksimacijske metode mnogostrukosti s rubom, u analizi semi-empirijskih nuklearnih energijskih funkcionala gustoće. Nedavno je takva analiza uspješno provedena na primjeru beskonačne nuklearne materije [5], no kako je to umjetan sustav nužno je ispitati mogućnost primjene u stvarnim atomskim jezgrama. Stoga smo razvili numeričku implementaciju aproksimacijske metode mnogostrukosti s rubom koja je prilagođena modelima za koje predviđanja nije moguće izraziti jednostavnom analitičkom formulom. Preciznost razvijenog računalnog koda smo provjerili na primjeru modela kemijske kinetike α -pinena koji je detaljno opisan u literaturi. Posebno smo promotrili nuk-

¹eng. sloppy models

learnni energijski funkcional gustoće DD-PC1 te smo pokazali mogućnosti njegove redukcije na jednostavniji oblik.

U poglavlju *Aproksimacijska metoda mnogostrukosti s rubom* opisujemo teorijsku pozadinu korištene metode, u poglavlju *Test modela i numeričke implementacije* provjeravamo preciznost razvijenog računalnog koda na modelu kemijske kinetike α -pinena, a u poglavlju *Primjena aproksimacijske metode mnogostrukosti s rubom u nuklearnoj fizici* opisujemo primjenu aproksimacijske metode mnogostrukosti s rubom u redukciji energijskog funkcionala gustoće DD-PC1. U zadnjem poglavlju dajemo pregled rada i smjernice za daljnja istraživanja.

2 Aproksimacijska metoda mnogostrukosti s rubom

Kompleksni modeli koji se koriste u različitim granama znanosti za opis složenih problema uključuju određeni broj slobodnih parametara koje moramo prilagoditi empirijskim podacima. Pritom često nemamo jasnu predodžbu koji su parametri nužni za precizan opis problema. Aproksimacijska metoda mnogostrukosti s rubom² (MBAM) [4] koristi se za razdvajanje onih parametara koji su doista potrebni u modelu³ od onih parametara koji ne utječu bitno na konačne rezultate⁴. Model s manjim brojem parametara općenito će biti pogodniji za numeričke proračune, a dat će nam i bolji uvid u danu problematiku.

U potpoglavlju *Fisherova informacijska metrika* (FIM) izvodimo metriku na prostoru parametara, u potpoglavlju *Optimalno računanje Christoffelovih simbola* pomoću nje izvodimo Christoffelove simbole koje zatim u potpoglavlju *Geodezijska jednadžba* koristimo kako bi opisali geodezike u prostoru parametara.

2.1 Fisherova informacijska metrika

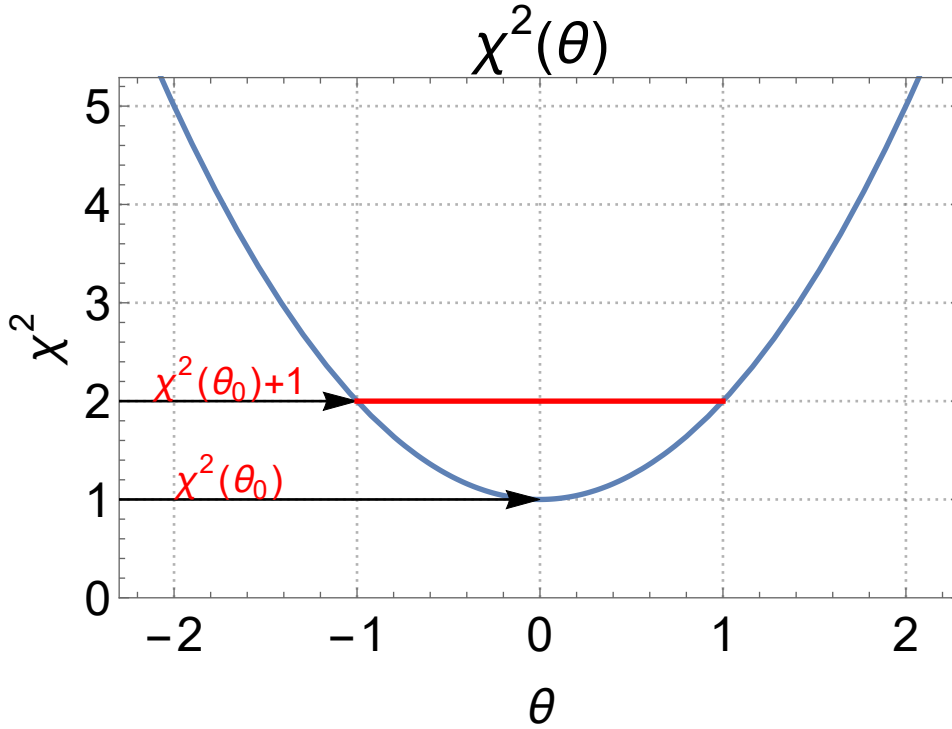
Za dati model koji ima N_p parametara promatra se N_p -dimenzionalni vektorski prostor pri čemu svaki parametar p^α predstavlja jednu dimenziju tog vektorskog prostora. Taj prostor općenito nije ravan, već je snabdjeven metrikom koja uključuje i parametre modela i rezultate korištenih mjerenja.

Označimo li sa N_d broj mjerenja, a vrijednosti izmjerenih opservabli sa

²*The Manifold Boundary Approximation Method.*

³tkv. *stiff parameters.*

⁴tkv. *soft parameters.*



Slika 1: Shema ovisnosti funkcije $\chi^2(\theta)$ o jednodimensionalnom parametru θ . Točka najbolje prilagodbe je označena s θ_0 . Crvenom je linijom prikazan interval s prihvatljivom vrijednosti parametra θ , $\chi^2(\theta_0) \leq \chi^2(\theta) \leq \chi^2(\theta_0) + 1$. Slika prilagođena iz [6].

\mathcal{O}_i , možemo konstruirati funkciju procjene kvalitete modela:

$$\chi^2 = \sum_i^{N_d} \frac{(\mathcal{O}_i(p) - \mathcal{O}_i^{exp})^2}{\Delta \mathcal{O}_i^2}, \quad (1)$$

pri čemu je \mathcal{O}_i teorijski predviđena vrijednost, \mathcal{O}_i^{exp} eksperimentalno određena vrijednost, a $\Delta \mathcal{O}_i^2 = (\Delta \mathcal{O}_i^{exp})^2 + (\Delta \mathcal{O}_i^{num})^2 + (\Delta \mathcal{O}_i^{the})^2$ je rezultantna nepouzdanost uzrokovana eksperimentalnom, numeričkom i teorijskom nepouzdanosti. Kako bi prostoru parametara pridijelili metriku, koja je simetrični tenzor reda dva, koristimo Taylorov razvoj χ^2 oko njezinog minimuma, odnosno točke najbolje prilagodbe. Okolina u kojoj funkcija procjene ima prihvatljivu vrijednost određuje se uvjetom $\chi^2(p) \leq \chi^2(p_0) + 1$. Potom ra-

zvijemo χ^2 do drugog reda, koristeći Einsteinovu konvenciju o sumaciji:

$$\chi^2(p) - \chi^2(p_0) = \partial_\alpha \chi^2(p_0)(p^\alpha - p_0^\alpha) + \frac{1}{2} \partial_{\alpha\beta} \chi^2(p_0)(p^\alpha - p_0^\alpha)(p^\beta - p_0^\beta) + \dots, \quad (2)$$

iz čega dobivamo Hessijan od χ u točki najbolje prilagodbe

$$g_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \partial_{\alpha\beta} \chi^2(p_0). \quad (3)$$

Metriku možemo pojednostaviti ako χ^2 zapišemo pomoću reziduala

$$f_i(p) = \frac{\mathcal{O}_i(p) - \mathcal{O}_i^{exp}}{\Delta \mathcal{O}_i}. \quad (4)$$

U tom je slučaju metrika dana s

$$g_{\alpha\beta} = \sum_i^{N_d} (\partial_\alpha f_i \partial_\beta f_i + f_i \partial_{\alpha\beta} f_i), \quad (5)$$

gdje su parcijalne derivacije derivacije po parametrima, $\partial_\alpha = \frac{\partial}{\partial p^\alpha}$. Uzimajući u obzir da f_i izvrjednujemo u p_0 , dobivamo izraz

$$g_{\alpha\beta} = \sum_i^{N_d} \partial_\alpha f_i \partial_\beta f_i. \quad (6)$$

Vidimo da smo dobili simetrični tenzor reda 2 koji je određen mjerenjima i teorijskim predviđanjima opservabli. Pomoću nje možemo odrediti udaljenost između dviju infinitezimalno bliskih točaka u prostoru parametara

$$ds^2 = g_{\alpha\beta} dp^\alpha dp^\beta, \quad (7)$$

iz čega vidimo da prostor parametara možemo snabdjeti Fisherovom metrikom. Uočavamo da će za *sloppy* problem distribucija svojstvenih vrijednosti Fisherove metrike biti eksponencijalna. Odredi se najmanja svojstvena vrijednost jer ona ima najveću nepouzdanost kako bi se odredio geodezik u smjeru njezinog svojstvenog vektora. Geodezik određujemo rješavajući geodezijsku jednadžbu

$$\dot{\theta}^\alpha \nabla_\alpha \dot{\theta}^\beta = 0, \quad (8)$$

gdje je ∇_α kovarijantna derivacija, a točka označava derivaciju po parametru τ kojim opisujemo geodezijsku krivulju. Treba napomenuti kako se τ ne odnosi se na vremensku ovisnost, koju fizikalni model može imati ⁵. Jednadžba (8) nam govori o tome da je tangentni vektor $\dot{\theta}^\beta$ konstantno duž tangentnog vektora $\dot{\theta}^\alpha$, odnosno da je tangentni vektor transportiran paralelno sebi samom [7]. Kako bismo napravili paralelni transport u zakrivljenom prostoru, potrebni su nam Christoffelovi simboli, objekti po formi slični tenzoru sačinjeni od prvih derivacija metrike.

Po geodeziku se gibamo sve dok metrika izvrijednjena u točkama geodezika ne postane singularna. Singularnost metrike nam ukazuje na to da je geodezik došao do ruba mnogostrukosti.

U sljedeća dva potpoglavlja pokazujemo kako za gore diskutiranu metriku najbrže integrirati jednadžbu geodezika. U tu svrhu, u potpoglavlju *Optimalno računanje Christoffelovih simbola* dajemo optimizaciju računa Christoffelovih simbola, a u potpoglavlju *Geodezijska jednadžba* opisujemo način integracije geodezijske jednadžbe.

2.2 Optimalno računanje Christoffelovih simbola

Budući da rješavanje geodezijske jednadžbe značajno opterećuje računalne resurse, prvo moramo naći optimalni način računanja Christoffelovih simbola, $\Gamma_{\mu\nu}^\beta$, za metriku danu jednadžbom (6). Definijski izraz za Christoffelove simbole glasi

$$\Gamma_{\mu\nu}^\beta = \frac{1}{2}g^{\alpha\beta}(\partial_\nu g_{\mu\alpha} + \partial_\mu g_{\nu\alpha} - \partial_\alpha g_{\mu\nu}). \quad (9)$$

⁵Primjerice problem opisan u sljedećem poglavlju.

Ovaj generalni izraz možemo pojednostaviti koristeći izraz (6)

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\beta} = \frac{1}{2} \sum_i^{N_d} g^{\alpha\beta} (\partial_{\nu}(\partial_{\alpha} f_i \partial_{\mu} f_i) + \partial_{\mu}(\partial_{\alpha} f_i \partial_{\nu} f_i) - \partial_{\alpha}(\partial_{\mu} f_i \partial_{\nu} f_i)) \quad (10)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_i^{N_d} g^{\alpha\beta} [\partial_{\alpha\nu} f_i \partial_{\mu} f_i + \partial_{\mu\nu} f_i \partial_{\alpha} f_i + \partial_{\alpha\mu} f_i \partial_{\nu} f_i \quad (11)$$

$$+ \partial_{\mu\nu} f_i \partial_{\alpha} f_i - \partial_{\alpha\mu} f_i \partial_{\nu} f_i - \partial_{\alpha\nu} f_i \partial_{\mu} f_i], \quad (12)$$

iz čega slijedi

$$\Gamma_{\mu\nu}^{\beta} = \sum_i^{N_d} g^{\alpha\beta} \partial_{\alpha} f_i \partial_{\mu\nu} f_i \quad (13)$$

Budući da ovdje izvedeni oblik Fisherove metrike sadrži Jacobijan, $\partial_{\alpha} f_i$, i Hessijan, $\partial_{\mu\nu} f_i$, valja primijetiti da je on jednostavniji za računalnu implementaciju od sekvencijalne primjene prvih derivacija koje bi se računale ako bismo koristili definicijski oblik Christoffelovih simbola dan izrazom (9).

2.3 Geodezijska jednadžba

Gibanje po geodeziku opisujemo geodezijskom jednadžbom (8), a nju možemo transformirati u pogodan oblik raspisujući kovarijatnu derivaciju

$$\dot{\theta}^{\alpha} (\partial_{\alpha} \dot{\theta}^{\beta} + \Gamma_{\alpha\mu}^{\beta} \dot{\theta}^{\mu}) = 0. \quad (14)$$

Primjećujući da je

$$\dot{\theta}^{\alpha} \partial_{\alpha} \dot{\theta}^{\beta} = \ddot{\theta}^{\beta}, \quad (15)$$

uz zamjenu imena indeksa, dobivamo koordinatni oblik geodezijske jednadžbe

$$\ddot{\theta}^{\alpha} + \Gamma_{\mu\nu}^{\alpha} \dot{\theta}^{\mu} \dot{\theta}^{\nu} = 0. \quad (16)$$

Vidimo da je geodezijska jednađba jednađba drugog reda u τ , ali je mo-
 žemo rastaviti u sustav $2N_p$ diferencijalnih jednađbi prvog reda

$$\dot{\theta}^\alpha = y^\alpha \quad (17)$$

$$\dot{y}^\alpha = -\Gamma_{\mu\nu}^\alpha y^\mu y^\nu, \quad (18)$$

s početnim uvjetima izabranim prema točki najbolje prilagodbe i smjeru
 zadanom pomoću (normiranog) svojstvenog vektora, v_{min}^α koji odgovara
 najmanjoj svojstvenoj vrijednosti Fisherove metrike, odnosno

$$\theta^\alpha(\tau = 0) = \theta_{bf}^\alpha \quad (19)$$

$$y^\alpha(\tau = 0) = v_{min}^\alpha. \quad (20)$$

Budući da nas zanima samo kvalitativno ponašanje na rubu mnogost-
 rukosti, visoka preciznost nije od presudne važnosti. Manja preciznost
 olakšava rješavanje ovog sustava diferencijalnih jednađbi jer se vrijeme
 između dva koraka integracije povećava kako dolazimo bliže rubu mno-
 gostrukosti.

3 Test modela i numeričke implementacije

Geodezijsku jednadžbu moguće je riješiti samo numerički, a u tu smo svrhu razvili računalni kod u *Python*-u koji koristi *scipy* biblioteku kako bi numerički riješio geodezijsku jednadžbu. Kod ćemo prvo testirati na jednostavnom modelu kemijske kinetike α -pinena.

Promotrimo model kemijske kinematike α -pinena. Molekula α -pinena se termalno izomerizira u dipenten i alo-ocimen, α i β -pironen te dimer α -pinena [8]. Nazovimo koncentraciju α -pinena y_1 , dipentena y_2 , alo-ocimena y_3 , oba pironena y_4 te dimera y_5 . Model možemo opisati sustavom od pet vezanih običnih diferencijalnih jednadžbi koje uključuju pet parametara modela ($\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ i θ_5):

$$\frac{dy_1}{dt} = (\theta_1 + \theta_2)y_1 \quad (21)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = \theta_1 y_1 \quad (22)$$

$$\frac{dy_3}{dt} = \theta_2 y_1 - (\theta_3 + \theta_4)y_3 + \theta_5 y_5 \quad (23)$$

$$\frac{dy_4}{dt} = \theta_3 y_3 \quad (24)$$

$$\frac{dy_5}{dt} = \theta_4 y_3 - \theta_5 y_5. \quad (25)$$

MBAM metodu testiramo na α -pinenu koristeći podatke iz baze problema MINPACK-2 [9].

Prvo smo parametre modela prilagodili podacima iz MINPACK-2 baze. Potom smo, polazeći od točke najbolje prilagodbe, interirali geodetsku jednadžbu dok nismo došli do ruba mnogostrukosti. Ustanovili smo da parametri θ_4 i θ_5 divergiraju, ali su međusobno linearno ovisni. Na slici 2 prikazana je ovisnost parametara o parametru geodezika, τ (različit od vremena t definiranog u jednadžbama (21-25)). Sa slike 3 vidimo da smo reproducirali međuovisnost ponašanja parametara θ_3 i θ_4 koje je opisano u [4].

Iskoristimo vezu θ_3 i θ_4 tako da uvedemo sustav od 4 parametra

$$\phi_1 = \theta_1, \quad \phi_2 = \theta_2, \quad \phi_3 = \theta_4, \quad \phi_4 = \theta_5/\theta_4. \quad (26)$$

Vidimo da jednadžbu (25) možemo podijeliti s θ_5 i promotriti granične vrijednosti $\theta_4 \rightarrow \infty$ i $\theta_5 \rightarrow \infty$, pri čemu ϕ_4 ima konstantnu vrijednost. Odatle slijedi

$$y_5 = \phi_4 y_3. \quad (27)$$

S druge strane, zbrajajući jednadžbe (23) i (25) i primjenjujući jednadžbu (27) dobivamo sljedeći reducirani sustav s 4 parametra ϕ_1, \dots, ϕ_4

$$\frac{dy_1}{dt} = (\phi_1 + \phi_2)y_1 \quad (28)$$

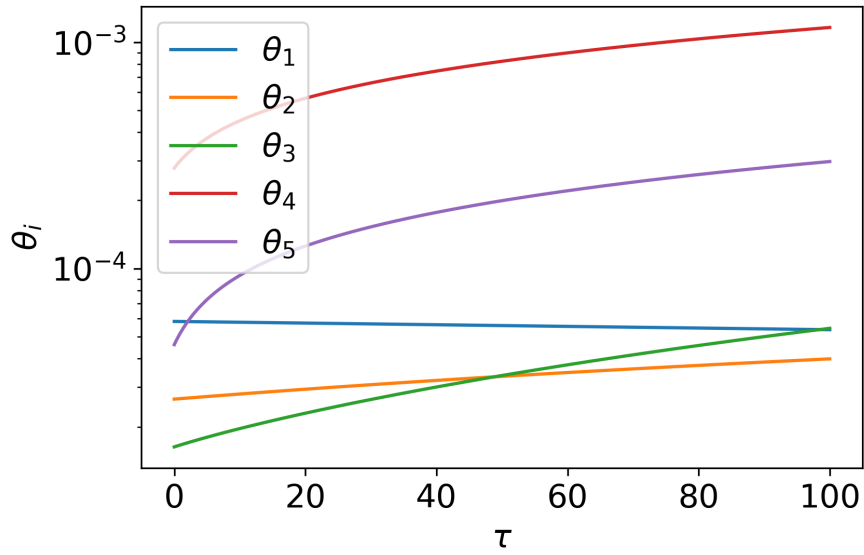
$$\frac{dy_2}{dt} = \phi_1 y_1 \quad (29)$$

$$\frac{dy_3}{dt} = \frac{\phi_2}{1 + \phi_4} y_1 - \frac{\phi_3}{1 + \phi_4} y_3 \quad (30)$$

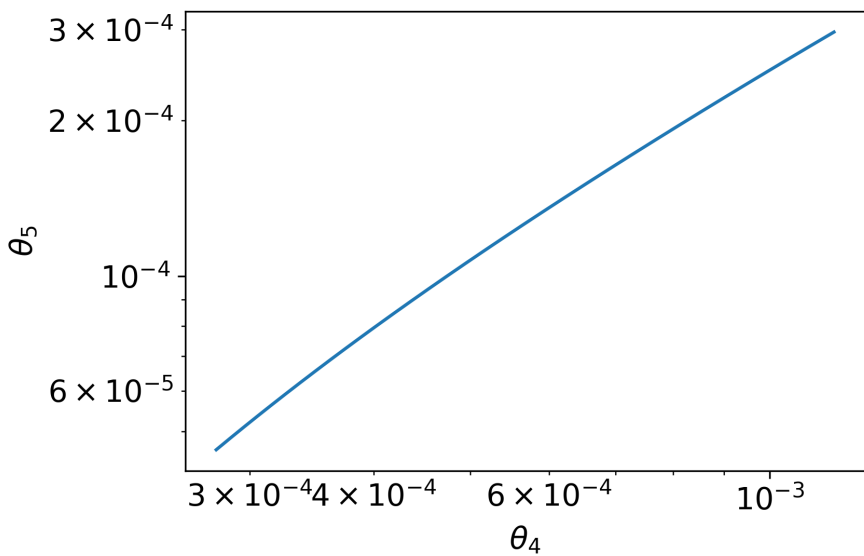
$$\frac{dy_4}{dt} = \phi_3 y_3 \quad (31)$$

$$\frac{dy_5}{dt} = \frac{\phi_2 \phi_4}{1 + \phi_4} y_1 - \frac{\phi_3 \phi_4}{1 + \phi_4} y_3. \quad (32)$$

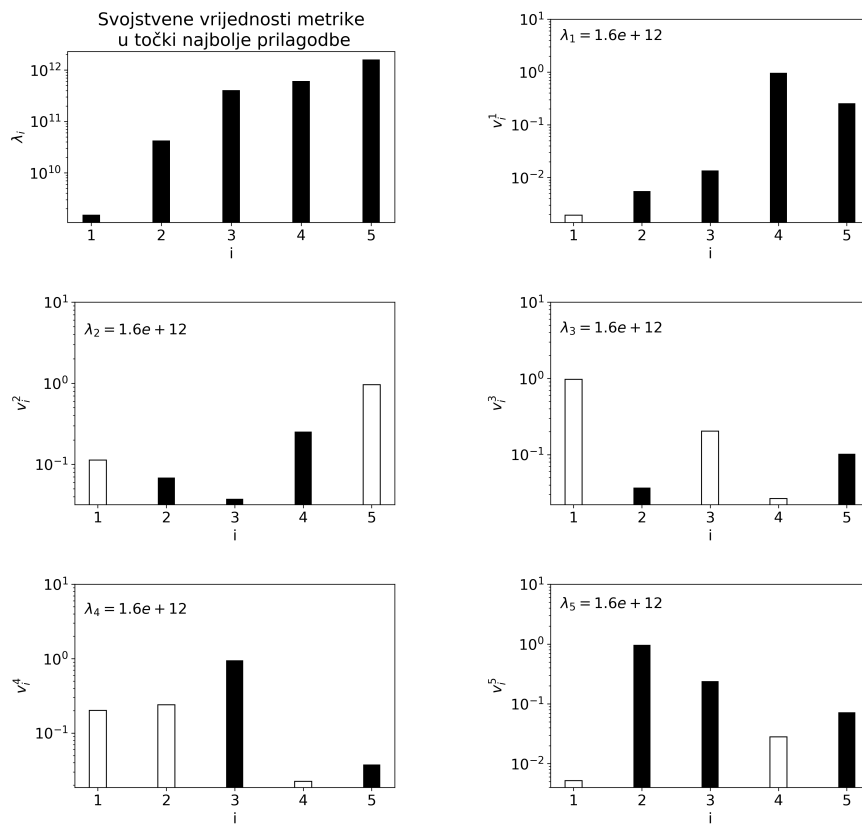
Parametre modela opet prilagođavamo podacima, a potom tražimo svojstvene vrijednosti i vektore metrike. Svojstvene vrijednosti metrike modela s 5 parametara u točki najbolje prilagodbe te njezine svojstvene vrijednosti prikazane su na slici 4.



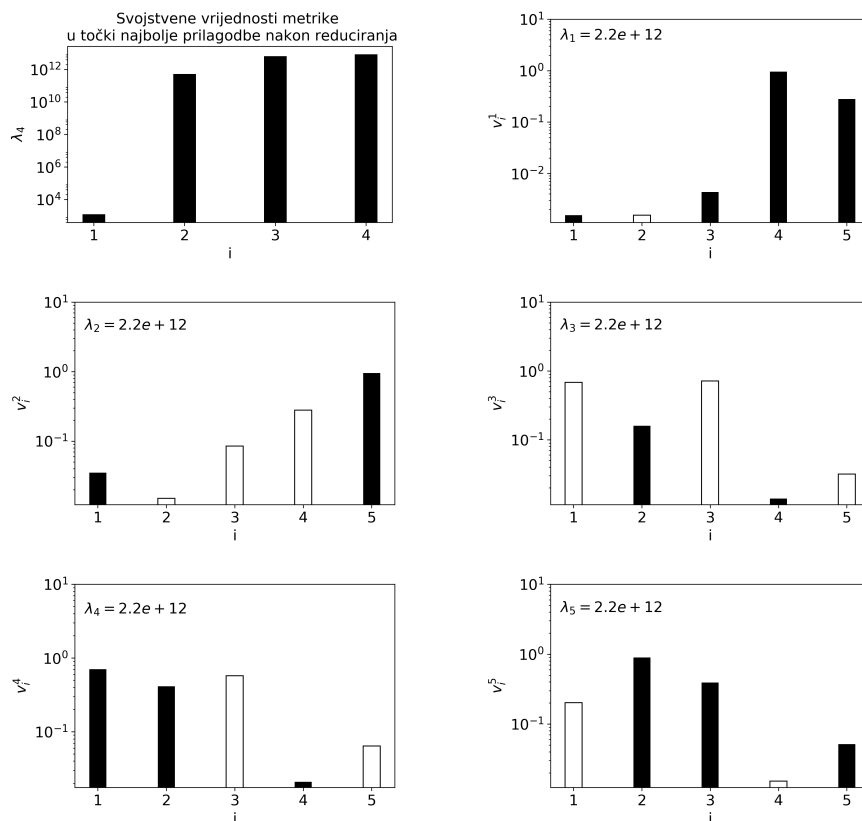
Slika 2: Ovisnost parametara $\theta_1, \dots, \theta_5$ o parametru τ kojim parametriziramo geodezike.



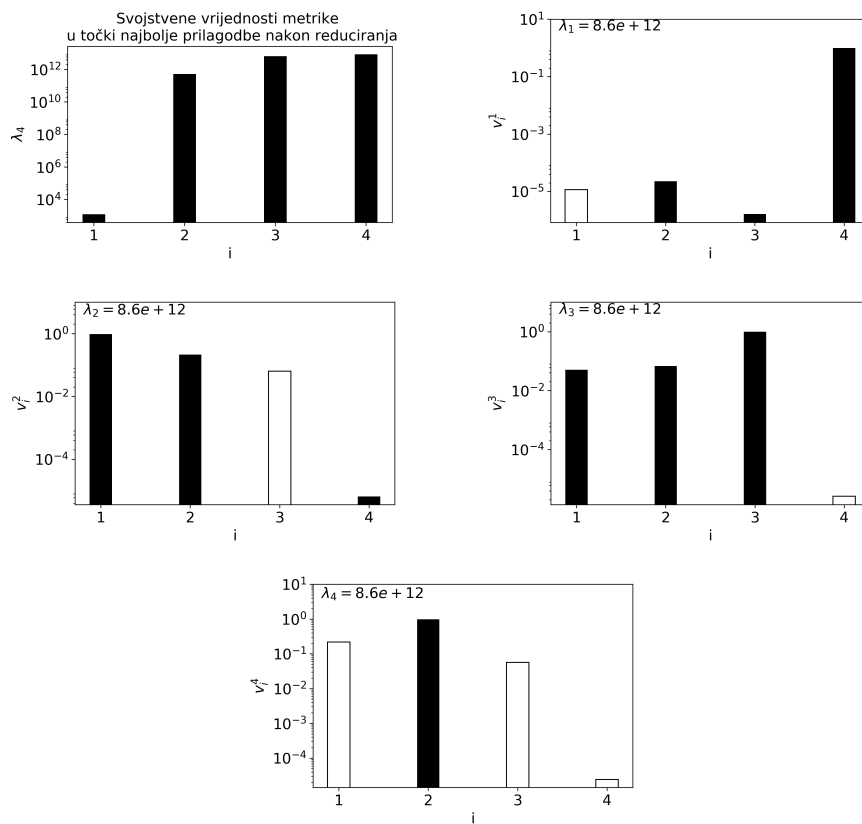
Slika 3: Međuovisnost parametara θ_4 i θ_5 o parametru τ kojim parametriziramo geodezike.



Slika 4: Svojtvene vrijednosti i komponente svih 5 svojstvenih vektora metrike sustava opisanog jednadžbama (21-25) u točki najbolje prilagodbe. Sa i je označena komponenta vektora, a sa gornjim indeksom kojoj on svojstvenoj vrijednosti odgovara. Crni pravokutnici prikazuju pozitivne, a bijeli negativne vrijednosti.



Slika 5: Svojtvene vrijednosti i komponente svih 5 svojstvenih vektora metrike sustava opisanog jednađbama (21-25) na rubu geodezika. Sa i je označena komponenta vektora, a sa gornjim indeksom kojoj on svojstvenoj vrijednosti odgovara. Crni pravokutnici prikazuju pozitivne, a bijeli negativne vrijednosti.



Slika 6: Komponente sva 4 svojstvena vektora metrike sustava opisanog jednadžbama (28-31) u točki najbolje prilagodbe. Sa i je označena komponenta vektora, a sa gornjim indeksom kojoj on svojstvenoj vrijednosti odgovara. Crni pravokutnici prikazuju pozitivne, a bijeli negativne vrijednosti.

4 Primjena aproksimacijske metode mnogostrukosti s rubom u nuklearnoj fizici

Modeliranje atomske jezgre predstavlja zahtjevan posao jer se zapravo radi o problemu mnoštva čestica. Jedan od najčešće korištenih modela u opisu nuklearne materije i atomskih jezgara je model energijskih funkcionala gustoće ⁶ [10, 11]. Glavne prednosti ovog modela su jednostavnost i mogućnost opis širokog spektra atomskih jezgara, od lakih sve do super-teških, kao i egzotičnih jezgara udaljenih od doline stabilnosti.

U potpoglavlju *Nuklearni energijski funkcional gustoće DD-PC1*, opisujemo koje sve komponente nuklearnog Lagrangiana uzimamo u razmatranje, u potpoglavlju *Komponente Diracove jednadžbe* opisujemo varijaciju Lagrangiana, a u potpoglavlju *Funkcional DD-PC1* opisujemo korišteni funkcional gustoće i rezultate njegove primjene.

4.1 Struktura Lagrangiana

Relativistički Lagrangian temelji se na osnovnim bilinearnim strujama Diracovog spinora ψ kojim opisujemo nukleone u atomskoj jezgri

$$\bar{\psi} \mathcal{O}_\tau \Gamma \psi, \mathcal{O}_\tau \in 1, \tau_i, \Gamma \in \{1, \gamma_\mu, \gamma_5, \gamma_5 \gamma_\mu, \sigma_{\mu\nu}\}. \quad (33)$$

τ_i predstavljaju izospinske Paulijeve matrice, a Γ općenito označava Diracove matrice. Članovi međudjelovanja Lagrangiana su produkti tih bilinearnih kombinacija. U principu, općeniti efektivni Lagrangian možemo zapisati kao razvoj po strujama i njihovim derivacijama. Za ovaj model razmatramo sljedeće četiri fermionske komponente međudjelovanja: izoskalar-skalar: $(\bar{\psi}\psi)^2$ izoskalar-vektor: $(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi)$ izovektor-skalar: $(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) \cdot$

⁶EDF - Energy Density Functional.

$(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi)$ izovektor-vektor: $(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi)$. Vektori u izospinskom prostoru su označeni strelicama. Bitno je naglasiti da svakom od elemenata iz skupa $\bar{\psi}\mathcal{O}_\tau\Gamma\psi$ pridjeljujemo funkciju vrha ($D_S, D_V, G_S, G_V, G_{TS}$ i G_{TV}) kojom ih vežemo u jedan Lagrangian, pri čemu funkcije vrha ovise o barionskoj gustoći $\hat{\rho} = \bar{\psi}\psi$. Model je definiran gustoćom Lagrangiana [12]

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{free} + \mathcal{L}_{4f} + \mathcal{L}_{der} + \mathcal{L}_{em} \quad (34)$$

sa sljedećim komponentama

$$\mathcal{L}_{free} = \bar{\psi}(i\gamma_\mu\partial^\mu - M)\psi, \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{4f} = & -\frac{1}{2}G_S(\hat{\rho})(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}G_V(\hat{\rho})(\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) \\ & -\frac{1}{2}G_{TS}(\hat{\rho})(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) - \frac{1}{2}G_{TV}(\hat{\rho})(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma_\mu\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi), \end{aligned} \quad (36)$$

$$\mathcal{L}_{der} = -\frac{1}{2}D_S(\hat{\rho})(\partial_\nu\bar{\psi}\psi)(\partial^\nu\bar{\psi}\psi) - \frac{1}{2}D_V(\hat{\rho})(\partial_\mu\bar{\psi}\gamma_\mu\psi)(\partial^\nu\bar{\psi}\gamma_\nu\psi) + O(\partial^2), \quad (37)$$

$$\mathcal{L}_{em} = eA^\mu\bar{\psi}\frac{1+\tau_3}{2}\gamma_\mu\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}. \quad (38)$$

4.2 Komponente Diracove jednadžbe

Jednadžbu (34) možemo varirati po $\bar{\psi}$, što nam daje Diracovu jednadžbu

$$[\gamma_\mu(i\partial^\mu - V^\mu) - (M + S)]\psi = 0, \quad (39)$$

gdje su

$$S = \Sigma_S + \vec{\tau} \cdot \vec{\Sigma}_{TS} + \Sigma_{rS}, \quad (40)$$

$$V^\mu = \Sigma^\mu + \vec{\tau} \cdot \vec{\Sigma}_S + \Sigma_{rS}, \quad (41)$$

pri čemu je

$$\Sigma^\mu = G_V(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) - eA^\mu\frac{1+\tau_3}{2}, \quad (42)$$

$$\vec{\Sigma}_T^\mu = G_{TV}(\bar{\psi}\vec{\tau}\gamma^\mu\psi), \quad (43)$$

$$\Sigma_S = G_S(\bar{\psi}\psi) - D_S\Box(\bar{\psi}\psi), \quad (44)$$

$$\vec{\Sigma}_{TS} = G_{TS}(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi), \quad (45)$$

$$\Sigma_{rS} = -\frac{\partial D_S}{\partial \hat{\rho}}(\partial_\nu j^\mu)u_\mu(\partial^\nu(\bar{\psi}\psi)), \quad (46)$$

$$\Sigma_r^\mu = \frac{u^\mu}{2}\left(\frac{\partial G_S}{\partial \hat{\rho}}(\bar{\psi}\psi)(\bar{\psi}\psi) + \left(\frac{\partial G_{TS}}{\partial \hat{\rho}}(\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) \cdot (\bar{\psi}\vec{\tau}\psi) + \frac{\partial D_S}{\partial \hat{\rho}}(\partial^\nu(\bar{\psi}\psi))(\partial_\nu(\bar{\psi}\psi))\right)\right). \quad (47)$$

U ovim smo jednažbama koristili notaciju $u^\mu = (1 - v^2)^{-1/2}(1, \vec{v})$, kojime opisujemo struju

$$\hat{\rho}u^\mu = \bar{\psi}\gamma^\mu\psi. \quad (48)$$

Uz izoskalarni-vektorski Σ^μ , izoskalarni-skalarni Σ_S , izovektorski-vektorski Σ_T^μ i izovektorski-skalarni Σ_{TS} doprinos, ovisnost funkcija o gustoći daje još dva doprinosa, Σ_{rS} i Σ_r^μ , koji potječu od varijacije funkcije vrha po gustoći.

Gustoće odgovaraju očekivanim vrijednostima u osnovnom stanju atomske jezgre $|\Phi\rangle$

$$\rho_S = \langle \Phi | \bar{\psi}\psi | \Phi \rangle = \rho_s^p + \rho_s^n, \quad (49)$$

$$\rho = \langle \Phi | \bar{\psi}\gamma^0\psi | \Phi \rangle = \rho^p + \rho^n, \quad (50)$$

$$\rho_{s3} = \langle \Phi | \bar{\psi}\tau_3\psi | \Phi \rangle = \rho_s^p - \rho_s^n, \quad (51)$$

$$\rho_{tv} = \langle \Phi | \bar{\psi}\tau_3\gamma^0\psi | \Phi \rangle = \rho^p - \rho^n. \quad (52)$$

Problem se rješava samosuglasno tako da u svakoj iteraciji koristimo gustoće izračunate s valnim funkcijama iz prethodne iteracije. Pritom se koristi programski paket DIRHB [13].

4.3 Funkcional DD-PC1

Funkcional DD-PC1 definiran je pomoću sljedećih funkcija vrha [5]

$$G_s(\rho) = a_s + (b_s + c_s)e^{-d_s x}, \quad (53)$$

$$G_v(\rho) = a_v + b_v e^{-d_v x}, \quad (54)$$

$$G_{tv}(\rho) = b_{tv} e^{-d_{tv} x}, \quad (55)$$

gdje indeksi s , v i tv označavaju izoskalar-skalar, izoskalar-vektor i izovektor-vektor kanale. Također smo definirali i varijablu x kao omjer, $x = \frac{\rho}{\rho_{sat}}$, gdje je ρ_{sat} nukleonska gustoća kod saturacije u simetričnoj nuklearnoj materiji. Funkcional DD-PC1 smo odabrali jer on omogućuje izvrstan opis atomskih jezgara u cijelom periodnom sustavu [14, 15]. Usprkos tome, daljnje razmatranje se može primijeniti i na bilo koji drugi funkcional. Funkcional DD-PC1 uključuje deset parametara koji su prilagođeni prema podacima iz nuklearnih mjerenja. Dani skup mjerenja (prikazan u tablici (1)) sastoji se od svojstava osam sferičnih atomskih jezgri u osnovnom stanju: energija vezanja i radijusa jezgre. Skup svih mogućih parametara definira mnogostrukost dimenzije 10 koja je uronjena u N -dimenzionalni prostor podataka (pri čemu je $N = 29$). Za danu točku u prostoru podataka, to jest, za dani skup podataka koji se nalazi u tablici (1), devet parametara određuje kako funkcional gustoće ovisi o funkcijama vezanja, uz parametar od člana $\delta(\partial_\nu \bar{\psi} \psi)(\partial^\nu \bar{\psi} \psi)$; optimizirani su tako da minimiziramo funkciju procjene $\chi^2(\mathbf{p})$ na zadanoj mnogostrukosti od modela koji je uronjen u prostor podataka:

$$\chi^2(\mathbf{p}) = \sum_{n=1}^N r_n^2(p), \quad (56)$$

Tablica 1: Svojstva osnovnog stanja osam sferičnih atomskih jezgri. U postupku prilagodbe koriste se: i uključuje energije vezanja BE , radijuse raspodjele naboja r_{ch} i razliku radijusa raspodjele neutrona i protona $r_n - r_p$.

Jezgra	BE (MeV)	r_{ch} (fm)	$r_n - r_p$ (fm)
^{16}O	-127.619	2.73	
^{48}Ca	-415.991	3.484	
^{72}Ni	-613.173		
^{90}Zr	-783.893	4.272	
^{116}Sn	-988.681	4.626	0.12
^{132}Sn	-1102.860		
^{208}Pb	-1636.446	5.505	0.20
^{214}Pb	-1663.298	5.562	

pri čemu $r_n(\mathbf{p})$ označava rezidual

$$r_n(\mathbf{p}) = \frac{\mathcal{O}_n^{mod}(p) - \mathcal{O}_n}{\Delta\mathcal{O}_n}, \quad (57)$$

gdje su \mathcal{O}_n^{mod} teorijska predviđenja modela koja ovise o setu parametra p . Za $\Delta\mathcal{O}_n$ je uzeto 0.1%. Za dane podatke parametre modela prilagođavamo minimizacijom χ^2 funkcije. Pritom smo koristili programski paket MINUIT [16]⁷. U sljedećem koraku tražimo rub mnogostrukosti rješavajući geodezijsku jednadžbu. Parametre ćemo prvo transformirati u bezdimenzionalni oblik

$$a_s = a_{s,bf}p_{a_s}, \quad b_s = b_{s,bf}p_{b_s}, \quad c_s = c_{s,bf}p_{c_s}, \quad d_s = d_{s,bf}p_{d_s} \quad (58)$$

$$a_v = a_{v,bf}p_{a_v}, \quad b_v = a_{v,bf}p_{b_v}, \quad d_v = d_{v,bf}p_{d_v} \quad (59)$$

$$b_{tv} = b_{tv,bf}p_{b_{tv}}, \quad d_{tv} = d_{tv,bf}p_{d_{tv}} \quad (60)$$

⁷Paket MINUIT dostupan je na web-stranici <https://www.cern.ch/minuit>.

$$\delta_s = \delta_{s,bf} p_{\delta_s}, \quad (61)$$

gdje indeksi bf označavaju vrijednost najbolje prilagodbe koja je dobivena minimizacijom funkcije procjene $\chi^2(\mathbf{p})(SET|1)$. Time su vrijednosti svih parametara u početnoj točki:

$$p_\mu(0) = 1, \mu \in \{a_s, b_s, c_s, d_s, a_v, b_v, d_v, b_{tv}, d_{tv}, \delta_s\}. \quad (62)$$

Početne brzine su određene sa odgovarajućim amplitudama svojstvenih vektora od Hessijana ($\mathcal{M} = \mathcal{A}\mathcal{D}\mathcal{A}^T$)

$$\dot{p}_\mu(0) \sim \mathcal{A}_\mu. \quad (63)$$

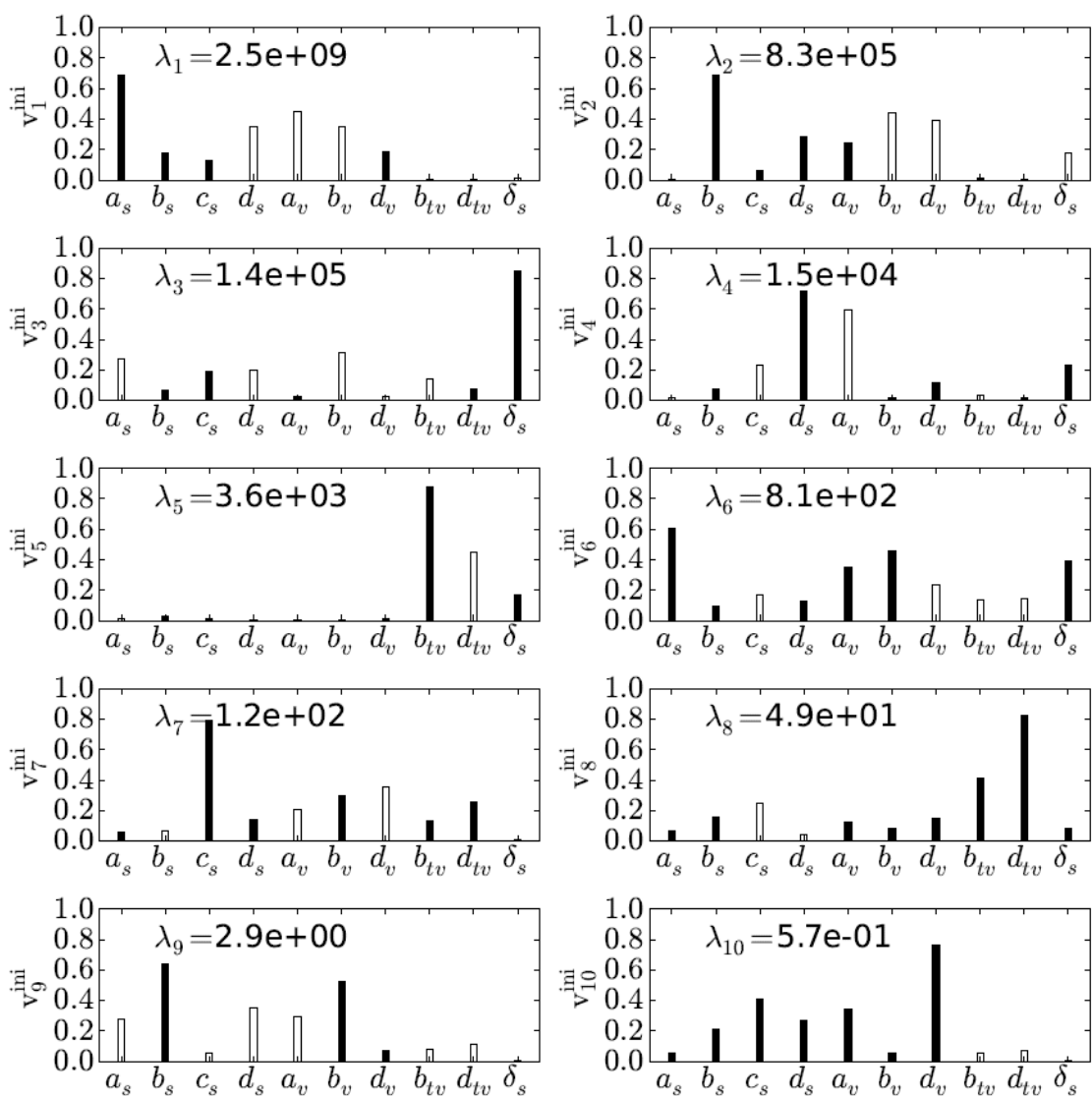
Faktor normiranja odabran je tako da u prostoru podataka vektor brzine ima jediničnu normu

$$\sum_{\mu,\nu} g_{\mu\nu} \dot{p}_\mu \dot{p}_\nu = 1, \quad (64)$$

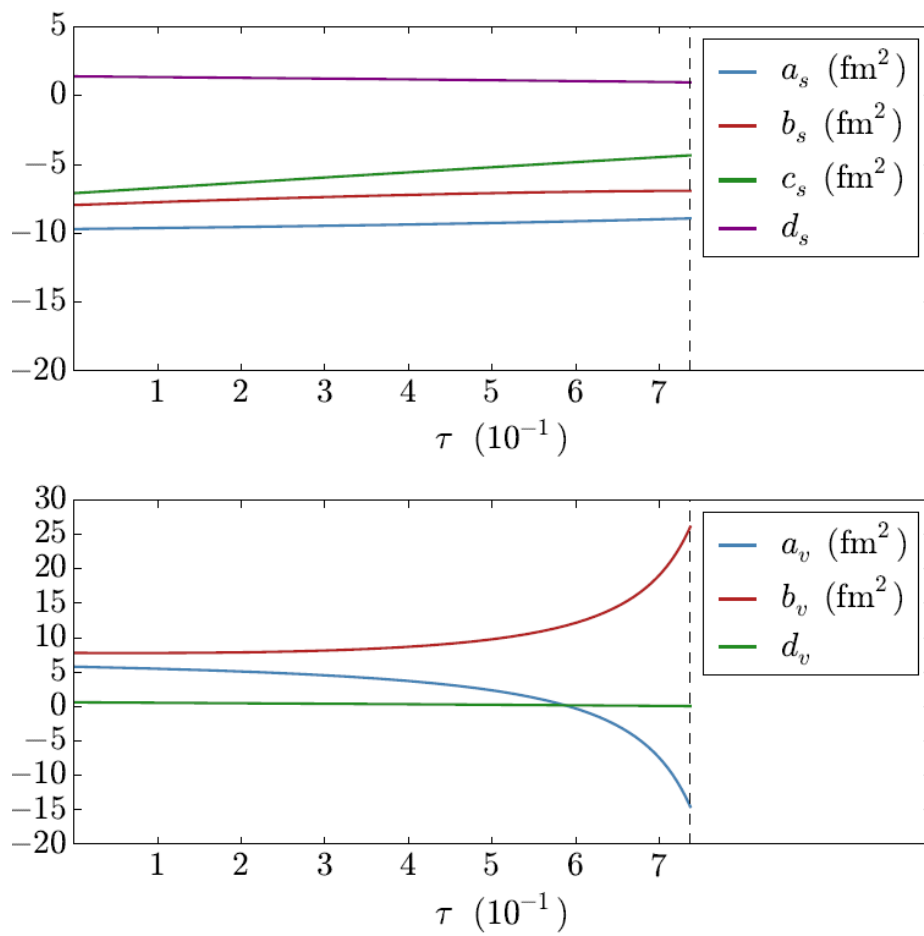
pri čemu je $g_{\mu\nu}$ metrički tenzor. Budući da je svojstveni vektor definiran do na globalnu fazu, geodezijsku jednadžbu možemo integrirati u dva smjera. Za svaki smjer geodezijska jednadžba se integrira do ruba mnogostrukosti i s obzirom da je norma brzine u prostoru podataka konstantna, duljina puta u prostoru podataka jednaka je širini mnogostrukosti u smjeru danog svojstvenog vektora Hessijana. Ako bismo uzeli u obzir sve svojstvene vektore Hessijana, odgovarajuće širine bi pokazivale eksponencijalnu distribuciju, što je karakteristika *sloppy* modela [4]. Redukcijom *sloppy* modela, odnosno eliminacijom najslabije određene kombinacije parametaram dolazimo do modela niže dimenzije koji i dalje uspješno opisuje zadani problem.

Polazeći od točke najbolje prilagodbe (p_0) u prostoru parametara, geodezijska jednadžba se integrira u smjeru svojstvenog vektora koji ima najmanju svojstvenu vrijednost Hessijana sve dok se ne dostigne rub mnogostrukosti modela. Budući da je svojstveni vektor definiran do na globalnu

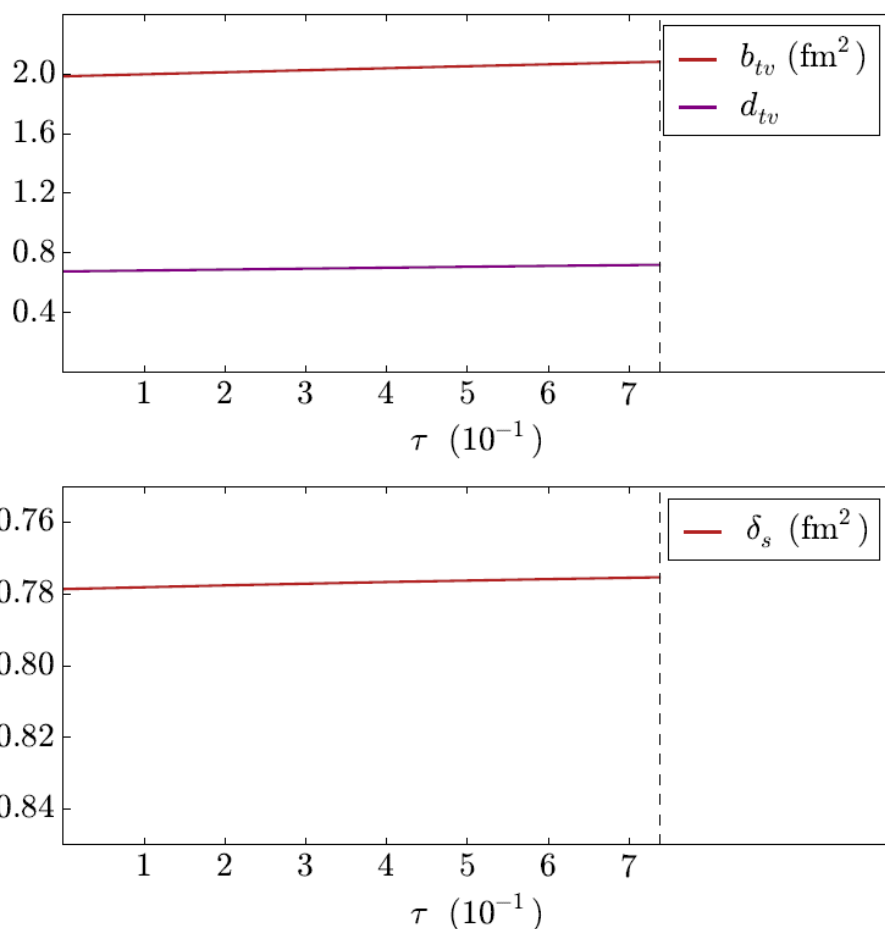
fazu, biramo smjer u kojem će norma brzine vektora $\sum_{\mu} \dot{p}_{\mu}^2$ povećavati. Jednadžbu integriramo do ruba mnogostrukosti na kojem možemo identificirati najslabije određenu kombinaciju parametara te je potom i eliminirati iz modela. Parametre pojednostavljenog modela zatim prilagodimo podacima i ponovimo MBAM postupak. U načelu bismo ovim postupkom mogli eliminirati većinu parametara modela, no pritom moramo voditi računa o kvaliteti opisa empirijskih podataka. Prva iteracija MBAM na početnih deset parametara funkcionala ilustrirana je na slici (8).



Slika 7: Svojsvene energije i vrijednosti Hesijana χ^2 problema u točki najbolje prilagodbe. Crni pravokutnici prikazuju pozitivne, a bijeli negativne vrijednosti.



Slika 8: Ovisnost vrijednosti skalarnih i vektorskih parametara funkcionala o parametru geodezijske krivulje, τ .



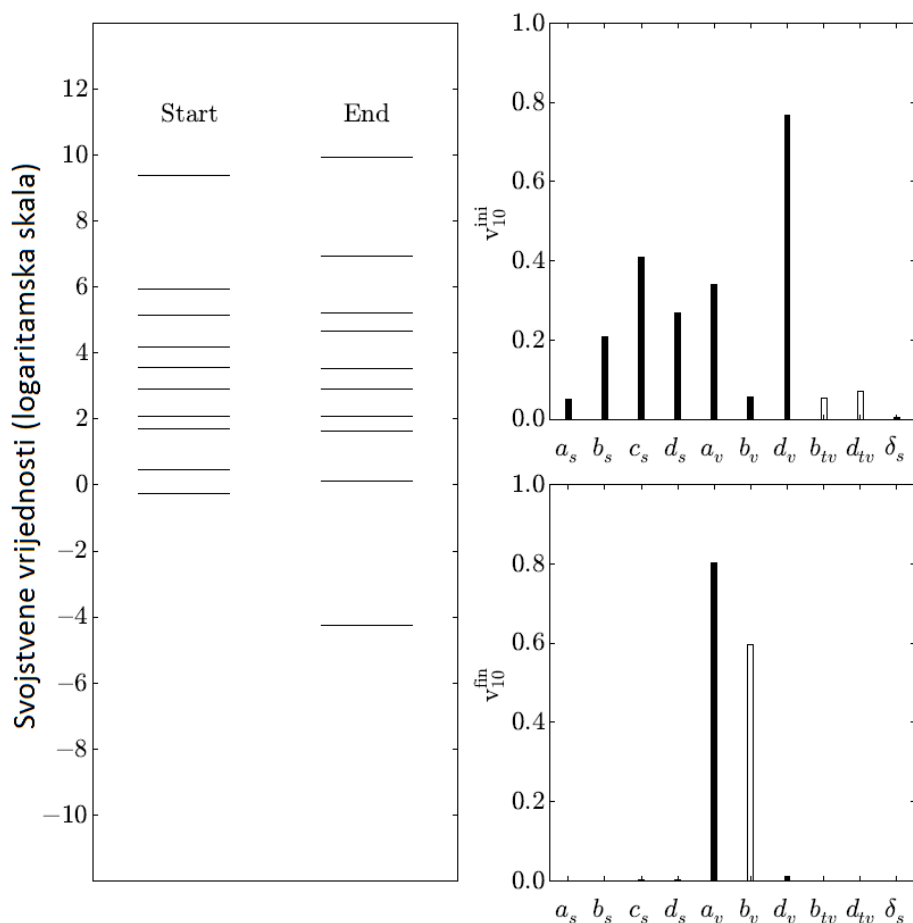
Slika 9: Ovisnost vrijednosti izovektorskih parametara funkcionala te parametra δ_s o parametru geodezijske krivulje, τ .

Evolicija parametara duž geodezika određena je svojstvenim vektorom Hessijana koji odgovara najmanjoj svojstvenoj vrijednosti, kao što prikazuje slika (7). Vidimo da nema značajne promjene parametara u izoskalar-skalar i izovektor-vektor kanalima niti δ_s parametra, no u izoskalar-vektor kanalu primjećujemo da se parametri a_v i b_v počinju divergirati kako se približavamo rubu mnogostrukosti, dok d_v teži nuli. Ovu pojavu možemo

razumjeti promatrajući sljedeću formu:

$$G_v = a_v + b_v e^{-d_v x}, \quad x = \frac{\rho}{\rho_{sat}}. \quad (65)$$

Kada se d_s približava nuli, derivacije $\frac{\partial \alpha_v}{\partial a_v}$ i $\frac{\partial \alpha_v}{\partial b_v}$ su praktički jednake, odnosno redovi (stupci) FIM su praktički jednaki i matrica postaje singularna. Na slici (10) izvrijednili smo početne i krajnje spektralne vrijednosti u rubovima FIM i početne i krajnje vrijednosti svojstvenih vektora koji odgovaraju najmanjim svojstvenim vrijednostima.



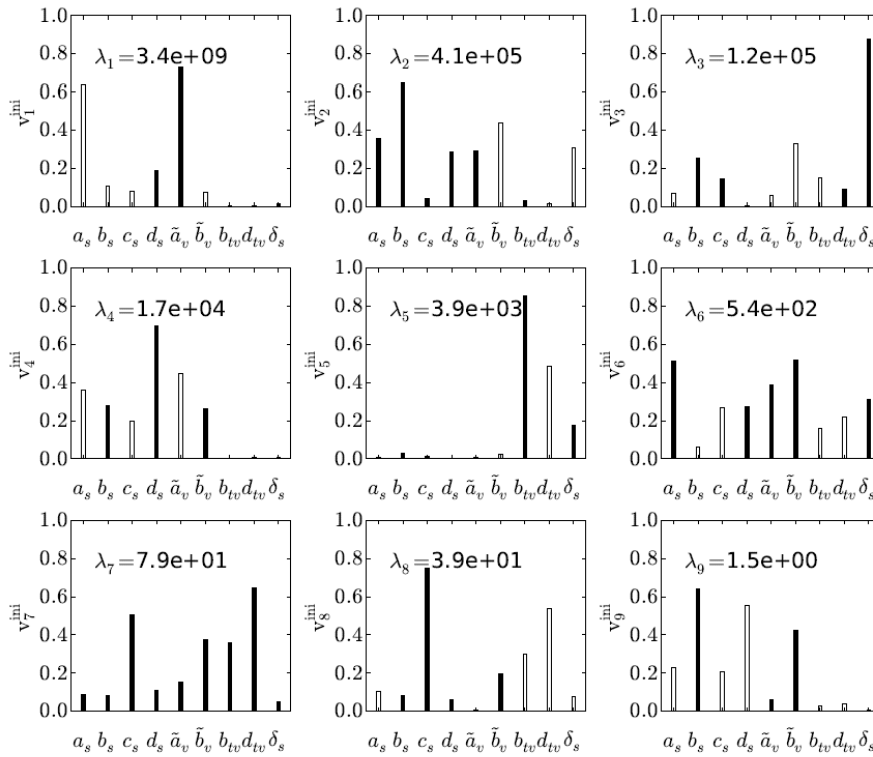
Slika 10: Usporedba svojstvenih vrijednosti te svojstvenih vektora u točki najbolje prilagodbe i na rubu mnogostrukosti. Crni pravokutnici prikazuju pozitivne, a bijeli negativne vrijednosti.

Na samom rubu mnogostrukosti najmanja svojstvena vrijednost se razlikuje od ostalih u spektru i teži k nuli. Granično ponašanje a_v, b_v i d_v pokazuje da Taylorov razvoj za funkciju vezanja na rubu mnogostrukosti glasi:

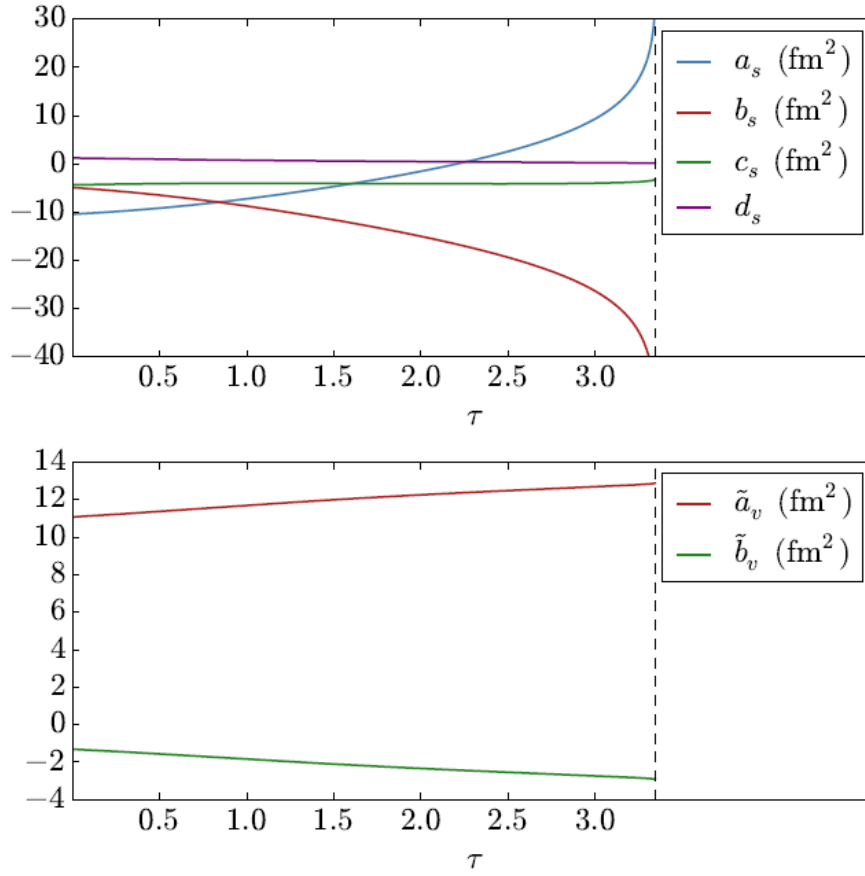
$$G_v(\rho) \approx a_v + b_v(1 - d_v x) = a_v + b_v - b_v d_v x = \tilde{a}_v + \tilde{b}_v x. \quad (66)$$

U prvoj MBAM iteraciji reducirali smo funkcional funkcija vezanja u izoskalarvektor kanalu na linearan oblik, pri čemu je broj parametara smanjen u

tom kanalnu sa dva na tri. U zadnjem koraku, devet parametara modela se ponovo određuje metodom najmanjih kvadrata uz pomoć podataka prikazanih u tablici (1) te ih koristimo kao početne vrijednosti u sljedećoj MBAM iteraciji. Dakle, krećemo sa sljedećim skupom parametara: $a_s, b_s, c_s, d_s, \tilde{a}_v, \tilde{b}_v, b_{tv}, d_{tv}$ i δ_s . Ponovo izračunamo svojstvene vrijednosti i vektore FIM u točki najbolje prilagodbe te konstruiramo geodezijsku jednadžbu i integriramo u smjeru svojstvenog vektora koji pripada najmanjoj svojstvenoj vrijednosti.



Slika 11: Svojstvene energije i vrijednosti Hesijana χ^2 problema dobivenog MBAM metodom u točki najbolje prilagodbe u prvoj iteraciji. Crni pravokutnici prikazuju pozitivne, a bijeli negativne vrijednosti.



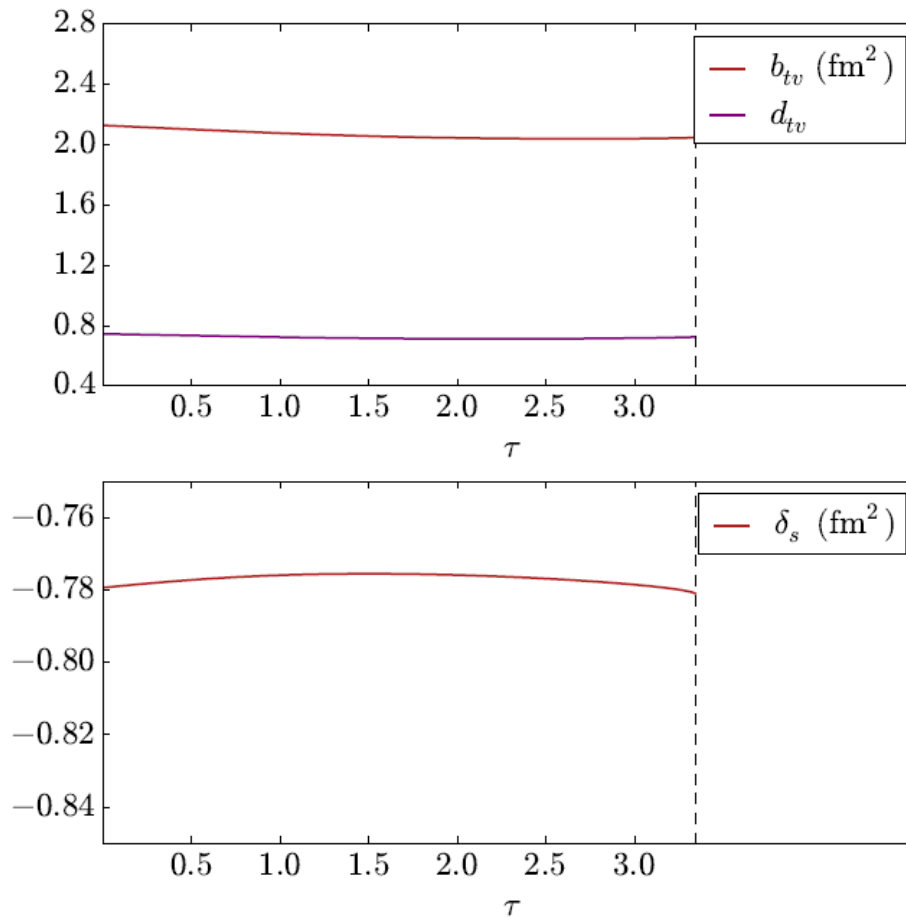
Slika 12: Ovisnost vrijednosti skalarnih i vektorskih parametara funkcionala u problemu dobivenom MBAM metodom u prvoj iteraciji o parametru gibanja po geodeziku, τ .

Ovaj put u izoskalar-skalar kanalu parametar d_s se približava nuli, dok parametri a_s i b_s počinju divergirati. Rezultati su prikazani na (10). Razvijemo sada funkciju vezanja u izoskalar-skalar u Taylorov red da bi dobili:

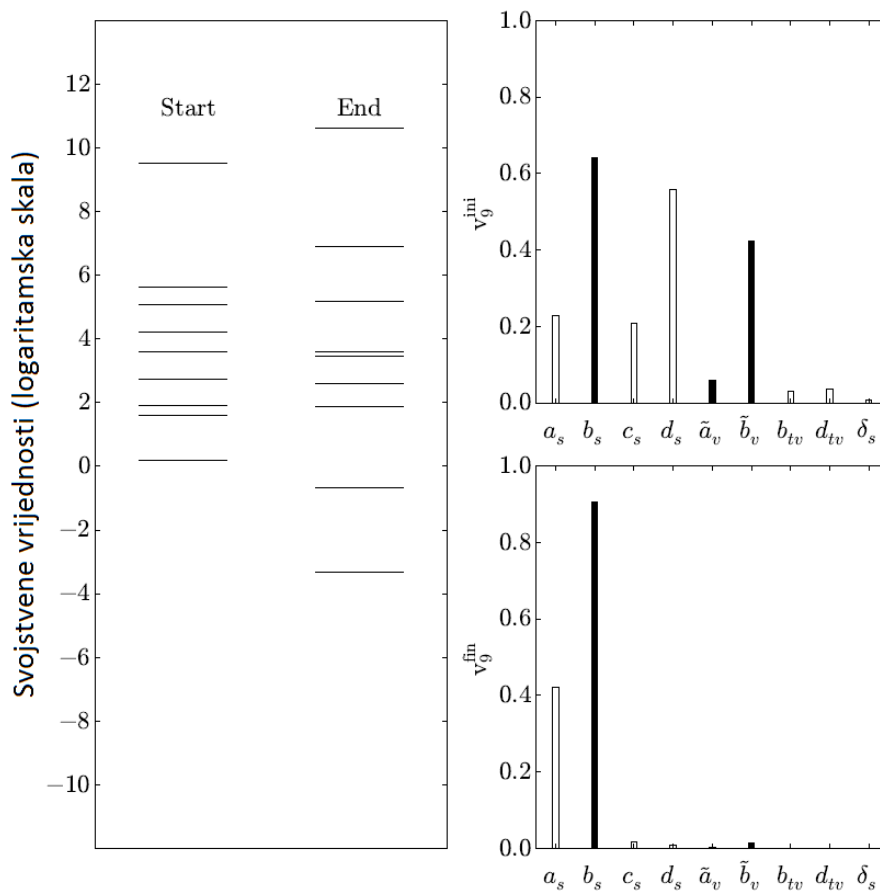
$$G_s(\rho) \approx a_s + (b_s + c_s x)(1 - d_s x) = a_s + b_s + (c_s + b_s d_s)x + c_s d_s x^2 = \tilde{a}_s + \tilde{b}_s x + \tilde{c}_s x^2. \quad (67)$$

Dakle, u sljedećoj iteraciji smo sveli izraz na polinom drugog reda i broj parametara smo smanjili sa devet na osam. Sada novi model ima skup

parametara: $\tilde{a}_s, \tilde{b}_s, \tilde{c}_s, \tilde{a}_v, \tilde{b}_v, b_{tv}, d_{tv}$ i δ_s . Ovo je ujedno i konačan broj parametara jer sljedeća iteracija bitno utječe na preciznost modela.



Slika 13: Ovisnost vrijednosti izoskalarnih i izovektorskih parametara funkcionala te parametra δ_s dobivenom MBAM metodom u prvoj iteraciji o parametru gibanja po geodeziku, τ .



Slika 14: Usporedba svojstvenih vrijednosti te svojstvenih vektora u točki najbolje prilagodbe i na rubu mnogostrukosti problemu dobivenom MBAM metodom u prvoj iteraciji. Crni pravokutnici prikazuju pozitivne, a bijeli negativne vrijednosti.

Primjetimo da izovektor-vektor b_{tv} i d_{tv} te δ_s ne pokazuju nikakvu značajnu promjenu nakon izvršavanja MBAM ili fitanja pomoću metode najmanjih kvadrata. To znači da su ti parametri sami po sebi ograničeni podacima koji su korišteni prilikom minimizacije χ^2 funkcije. Također, zanimljiva je činjenica da su izoskalar-skalar i izoskalar-vektor kanali slabije određeni, što se ne može reći i za izovektor-vektor kanal.

5 Zaključak

U ovom radu prikazana je široka primjena aproksimacijske metode mnogostrukosti s rubom (MBAM). Računalnu implementaciju MBAM-a smo testirali na modelu sinteze dimera α -pinena. Usporedbom naših rezultata s dostupnom literaturom [4] provjerili smo visoku preciznost razvijenih kodova. U sljedećem smo koraku u kod uključili model atomske jezgre zasnovan na energijskom funkcionalu gustoće DD-PC1. Pokazali smo da se model može reducirati s 10 na 8 parametara. Ovim smo postupkom funkcije $G_s(\rho)$ i $G_v(\rho)$ iz oblika $G_s(\rho) = a_s + (b_s + c_s)e^{-d_s x}$ i $G_v(\rho) = a_v + b_v e^{-d_v x}$ pojednostavili u $G_s(\rho) = \tilde{a}_s + \tilde{b}_s x + \tilde{c}_s x^2$ i $G_v(\rho) = \tilde{a}_v + \tilde{b}_v x$.

Opisano istraživanje predstavlja temelj za puno šire istraživanje koje istovremeno uključuje atomske jezgre, simetričnu nuklearnu i neutronska materiju. Tijekom tog istraživanja pokušat ćemo još detaljnije analizirati mnogostrukost definiranu energijskim funkcionalima gustoće [17].

Drugi mogući smjer istraživanja je proučavanje zakrivljenosti prostora parametara. Koristeći prve derivacije Christoffelovih simbola, možemo napisati Riemannov tenzor zakrivljenosti

$$R_{\alpha\beta\gamma}^{\sigma} = \partial_{\beta}\Gamma_{\alpha\gamma}^{\sigma} - \partial_{\gamma}\Gamma_{\alpha\beta}^{\sigma} + \Gamma_{\alpha\gamma}^{\rho}\Gamma_{\rho\beta}^{\sigma} - \Gamma_{\alpha\beta}^{\rho}\Gamma_{\rho\gamma}^{\sigma}. \quad (68)$$

Njegove kontrakcija, Riccijev tenzor $R_{\mu\nu} = R_{\mu\sigma\nu}^{\sigma}$, u općoj teoriji relativnosti govori o zakrivljenosti prostorno-vremenskog kontinuuma u prostorima s više od dvije dimenzije:

$$R_{\mu\nu} - \frac{2}{n-2}Rg_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu} = 8\pi T_{\mu\nu}, \quad (69)$$

gdje je R Riccijev skalar, $R = R_{\mu}^{\mu}$, n broj dimenzija, $T_{\mu\nu}$ tenzor stresa-energije a Λ kozmološka konstanta. U slučaju $n = 2$ tenzor stresa-energije proporcionalan je metrici. Primjenjujući na prostor parametara, mogli bismo za svaku metriku izvesti raspodjelu masa i struja u $T_{\mu\nu}$ koja daje takvu

zakrivljenost u prostoru parametara. Ova poveznica je zanimljiva jer bi nam kroz vizualizaciju zakrivljenosti mogla pružiti bolji uvid u gibanje po geodizku prema rubu mnogostrukosti.

6 Sažetak

Kompleksni modeli koji se koriste u različitim granama znanosti uključuju određeni broj slobodnih parametara za koje često nije jasno jesu li nužni za precizan opis problema. Kako bi se razdvojili bitni od nebitnih parametara i/ili njihovih kombinacija, nedavno je razvijena razvijena aproksimacijska metoda mnogostrukosti s rubom (MBAM). U ovome smo radu razvili računalnu implementaciju ove metode i prvo je testirali na modelu sinteze dimera α -pinena. U sljedećem koraku smo primijenili MBAM na modelu atomske jezgre zasnovanom na nuklearnom energijskom funkcionalu gustoće DD-PC1. Pokazali smo da takav model možemo reducirati s deset na osam parametara, uz zadržavanje početne preciznosti modela.

Ključne riječi: aproksimacijska metoda mnogostrukosti s rubom, atomske jezgre, energijski funkcionali gustoće

7 Summary

Complex models are often used in many branches of science often include a certain number of free parameters for which it is uncertain if they are needed for a precise description of the problem. The Manifold Boundary approximation method (MBAM) has been recently developed to determine the necessity of particular combinations of parameters. In this work, we made a computer implementation of this method and applied in on the synthesis model of the α -pinene and on a model of an atomic nucleus based on the energy density functional DD-PC1. We have shown that this model can be reduced from 10 to 8 parameters, without significant loss of precision.

Keywords: The Manifold Boundary Approximation Method, Atomic Nuclei, Energy Density Functionals

8 Zahvala

Ovim bih se putem želio zahvaliti prof. dr. sc. Tamari Nikšić na njezinim prijedlozima, komentarima i strpljenju. Također, zahvalio bih se dipl. ing. mat. Zrinki Vidović-Tisanić na njezinim savjetima i zapažanjima.

Literatura

- [1] B. B. Machta, R. Chachra, M. K. Transtrum, and J. P. Sethna. Parameter Space Compression Underlies Emergent Theories and Predictive Models. *Science*, 342:604–607, November 2013.
- [2] M. K. Transtrum, B. B. Machta, K. S. Brown, B. C. Daniels, C. R. Myers, and J. P. Sethna. Perspective: Sloppiness and emergent theories in physics, biology, and beyond. *J. Chem. Phys.*, 143(1), July 2015.
- [3] M. Buchanan. Wheat from the chaff. *Nature Physics*, 11:296, April 2015.
- [4] Mark K. Transtrum and Peng Qiu. Model reduction by manifold boundaries. *Phys. Rev. Lett.*, 113:098701, Aug 2014.
- [5] Tamara Nikšić and Dario Vretenar. "Sloppy" nuclear energy density functionals: Effective model reduction. *Phys. Rev. C*, 94:024333, Aug 2016.
- [6] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard. Error estimates of theoretical models: a guide. *Journal of Physics G Nuclear Physics*, 41(7):074001, July 2014.
- [7] Charles W. Misner, Kip S. Thorne, and John Archibald Wheeler. *Gravitation*. W. H. Freeman, New York, 1973.
- [8] G. E. P. Box, W. G. Hunter, J. F. MacGregor, and J. Erjavec. Some problems associated with the analysis of multiresponse data. *Technometrics*, 15(1):33–51, 1973.

- [9] Brett M. Averick, Richard G. Carter, and Jorge J. Moré. The minpack-2 test problem collection, 1991.
- [10] D. Vretenar, A. V. Afanasjev, G. A. Lalazissis, and P. Ring. Relativistic Hartree Bogoliubov theory: static and dynamic aspects of exotic nuclear structure. *Phys. Rep.*, 409:101–259, April 2005.
- [11] Michael Bender, Paul-Henri Heenen, and Paul-Gerhard Reinhard. Self-consistent mean-field models for nuclear structure. *Rev. Mod. Phys.*, 75:121–180, Jan 2003.
- [12] P. Finelli, N. Kaiser, D. Vretenar, and W. Weise. Relativistic nuclear model with point-couplings constrained by QCD and chiral symmetry. *Nuclear Physics A*, 735:449–481, May 2004.
- [13] T. Nikšić, N. Paar, D. Vretenar, and P. Ring. Dirhb—a relativistic self-consistent mean-field framework for atomic nuclei. *Computer Physics Communications*, 185(6):1808 – 1821, 2014.
- [14] S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev, D. Ray, and P. Ring. Global performance of covariant energy density functionals: Ground state observables of even-even nuclei and the estimate of theoretical uncertainties. *Phys. Rev. C*, 89:054320, May 2014.
- [15] S. E. Agbemava, A. V. Afanasjev, T. Nakatsukasa, and P. Ring. Covariant density functional theory: Reexamining the structure of super-heavy nuclei. *Phys. Rev. C*, 92:054310, Nov 2015.
- [16] F. James and M. Roos. Minuit - a system for function minimization and analysis of the parameter errors and correlations. *Computer Physics Communications*, 10(6):343 – 367, 1975.

- [17] T. Nikšić, I. Imbrišak, and D. Vretenar. “Sloppy” nuclear energy density functionals (II): Finite nuclei. *Poslano na recenziju u časopis Phys. Rev. C*.