

HCTAK 利用・保守マニュアル

2009年8月

青木 保夫

小沢 顕

理化学研究所

筑波大学

仁科加速器センター

数理物質科学研究科

重イオン用 CDCC プログラム hctak について記す。

理論的な背景は、Progress of Theoretical Physics Supplement Vol89 1986, pp 37-45 を参照の事。今後この論文は PTP と略記する。CDCC 初心者、先ず上記論文を、次に [3] hctak の概念的理解に向けての前半を読まれる事を勧めます。

入射粒子は粒子 1 と 2 で構成された複合粒子であり、標的核を粒子 3 と呼ぶ。上記論文の機能の内、粒子 (1 + 2) と粒子 3 の間のスピン依存力は無視し、そのかわり粒子 1 と 2 の結合形式は、LS 結合以外に、j-j 結合も許す。1-2 間ポテンシャルを与えた時、正エネルギーの共鳴も取り入れられる。上記論文ではチャンネルスピンを用いた表現になっているが、j-j 結合を想定した利用には、[3] の内の j-j 結合の CDCC に目を通して下さい。

hctak を利用するならば、[0] 構成とコンパイル、[1] 入力と入力例、[2] 入力例に対する出力と簡単なコメントを読むのが良いと思う。プログラムの内部に関する知識を得たり、プログラムを変更・改造したければ、[4] 内部構造を参考に。[5] MPI メモ は、MPI (Message Passing Interface) を利用して hctak を並列に動作させたい時の最も単純な場合の説明がなされている。

hctak は S 行列要素を計算する。弾性散乱の予備計算、ポテンシャル共鳴の有無、hctak が出力する S 行列要素を用いての弾性散乱や三重微分断面積の計算をしたければ、[6] おまけのプログラムに関する記述を読むと良いだろう。主に、以下の項目に付いて述べる。

0 構成とコンパイル

1 入力と入力例

2 入力例に対する出力と簡単なコメント

3 hctak の概念的理解に向けて

4 hctak.f の内部構造

5 MPI メモ

6 おまけのプログラム。mpis2s.f, h2s.pl opm.f, jlmpot.f, wv2.f, wsf.f, fjl.f, exl.f, trix.f, ft.f, pickff.f, picks.f, qval.f。この部分の記述は、他の部分と重複しているところもある。他の部分を探さずに読めるので、重複したままにしておこう。

代表的なプログラムの機能は以下の通りである。

opm.f スピン依存力が無い光学ポテンシャルの下での弾性散乱微分断面積を計算する。光学ポテンシャルを与えた時、どの様なパラメータを採用するのが妥当かを考えるよすがとした。

もしも、原子核反応に関する数値計算の経験が無いならば、先ず default 値を利用し opm.f を走らせ、その後 default 値の近くでパラメータを変えて、パラメータ依存性を調べるのを勧めます。

ここで提供するプログラム (の一部) を改造したいならば、可能な限り opm.f ソースプログラムを読み、プログラミングスタイルに慣れておく事が望ましいと思う。

wv2.f 光学ポテンシャルを想定した動径方向の関数値表を与えて、これを Woods-Saxon 型やその微分型関数で展開するプログラム。

wsf.f 中心力と LS 力ポテンシャルを与えて、束縛状態や散乱状態の波動関数を計算する。束縛状態波動関数のフーリエ展開をする。散乱状態に共鳴の有無、あればそのエネルギーや幅を計算する。位相のずれのエネルギー依存性を計算する。後付けの機能が沢山あるので、このプログラムは非常に読みにくい。特に WSRES は書き換えた方が良さそう。< -- 10/01/18 書き換えた。

ft.f 動径部分波動関数や行列要素を読み込んで Fourier 変換をする。

pickff.f, picks.f hctak の出力するポテンシャルの行列要素や S 行列要素から特定の成分を抜き出す。

elx.f hctak の与える S 行列を用いて、弾性散乱微分断面積を計算する。

trix.f hctak の与える S 行列を用いて、三重微分断面積を計算する。三重微分断面積を用いて、二重微分断面積を計算する。これらにより、分解後の粒子のエネルギー・運動量分布を計算する。

qval.f 対話的に、反応の Q 値を返す。

7 数値積分メモ。ここで提供したプログラム群の中では、各種の数値積分手法が利用されている。中には一般的ではないと思われる手法もあるので、数値積分手法を概観しておいた。

8 openMP の利用に向けて。この部分は、丁寧に書いたが実際は利用しなかった。MPI メモの方を頑張って書いた方が良かったとも思うが ...

ここに提示したプログラムは全て、青木がゼロから書き下したものです。教育と研究用に限って、著作権者である青木に無断でも、自己責任下での使用を認めます。

このプログラム開発にあたり、計算機環境整備に特に協力して戴いた二人の名前を挙げて謝意を示します。

奥村 紀浩： 長野高等工業専門学校・准教授

木村 博美： 筑波大学研究基盤総合センター加速器部門・技術専門職員

目 次

第 1 章	hctak	5
1.1	構成とコンパイル	5
1.2	入出力ファイル	7
1.3	入出力例に対する簡単なコメント	18
1.4	hctak 概念的理解に向けて	29
1.5	hctak.f の内部構造	57
第 2 章	おまけのプログラム	91
2.1	mpis2s	92
2.2	h2s	96
2.3	kin3b	96
2.4	opm	105
2.5	bgpot	142
2.6	wv2	150
2.7	wsf, ft プログラム	152
2.8	elx プログラム	169
2.9	trix プログラム	175
2.10	pickff, picks プログラム	200
2.11	picks	204
2.12	qval	212
2.13	数値積分メモ	213
2.14	openmp メモ	229

第1章 hctak

1.1 構成とコンパイル

プログラム本体は、hctak.f という名前の 4 0 0 0 行弱の単一プログラムである。memory allocation を利用しているので、FORTRAN 9 0 以上のコンパイラーが必須である。大きな配列はほとんど allocate コマンドで準備されるので、入力データによりプログラムサイズや実行時間は大きく変動する。

個別の計算結果の識別と計算所要時間を与える為、現在時刻を出力している。この為に、2 行の C プログラム tt.c が追加されている。あらかじめ、gcc -c -o tt.o tt.c という様なコマンドを用いて、目的プログラム tt.o を作っておく事。tt.c を利用しないならば、hctak.f 中の全ての DATIME 副プログラムを呼ばない様に変更しなければならない。即ち、CALL CURTIM、CALL DATIME という文をコメント文とする。こうしても、計算結果に影響はない。

次に、例えば ifort や frt という FORTRAN compiler を用いて、実行形式のプログラムを作成する。次の様なコマンドを使用する。

```
frt [-O3 -Kfast -x vnexp,vcexp,vucal] -o hctak hctak.f tt.o
```

ここで、[と] に囲まれた部分は frt に対する最適化のオプションであり、必ずしも必要という訳ではない。-x vnexp,vcexp,vucal は、vnexp, vcexp, vucal という 3 個の副プログラムをインライン展開せよという意味である。-x - としてもほぼ等価な効果が実現される。

-o hctak という部分は、実行形式の名前は hctak とせよという意味である。

hctak.f は、source code が書かれたファイルの名前である。

tt.o は、実行形式のプログラムに組み込む object file name を示す。

ifort を用いて実行プログラム作成を行う事もできる。

```
ifort -O3 -o hctak hctak.f tt.o
```

ここでも、-O3 は最高レベルの最適化をせよという意味である。multicore cpu を利用可能ならば、“-parallel” という option を利用すると、計算時間を有意に短縮出来た。

gfortran というコンパイラーでも動作する。2008 年 12 月現在では最適化オプション [-O3] は正しく働いているように見える。

計算速度を上げる為の補足的助言。

FORTTRAN コンパイラーは、unrolling, vectorize, parallelize 等の機能を自動的にしてくれる場合がある。これらは利用してみる価値がある。高速化の一つに inline 展開があり、これは内部構造を知る必要がある。次の副プログラムを inline 展開するのが良いと思う。

- 1 VUCAL この副プログラムが最優先で inline 展開さるべきである。
- 2 VNEXP, VCEXP。 入力データに大きく依存するが、UGSOC, HSPDEC の方が呼び出し回数が多いかもしれない。但し、呼び出し回数は VUCAL よりはかなり少ない。
- 3 WSINT。 最後にゆとりがあれば、この副プログラムも展開してもよいだろう。

openmp の利用

複数の CPU を実装した PC や WORKSTATION が利用出来るならば、負荷分散を試みたくなる。もしも FORTTRAN コンパイラーが openmp を支援しているならばこれを試用する事価値はあるかも知れない。以下の作業を並列化する事が考えられる。

- 1 離散化を含む 1-2 系の波動関数計算。各スピン状態を並列的に計算する。
- 2 ポテンシャルの行列要素の計算。PTP 式 (2.27c) の R に対して並列的に計算する。
- 3 連立微分方程式、PTP 式 (2.16) を J に対して並列的に計算する。

上記 3 が最も価値のある挑戦だろう。但し、計算時間と通信時間を考慮する必要がある。努力に価するかどうかは計算機環境に依存するだろう。特に cache memory を取り合いする様な構成になっていると、悔しい思いをする場合があるようだ。

粗結合の計算機で MPI (Message Passing Interface) を利用するならば、各 J に対して連立微分方程式を解く部分を並列化するのは当然だろう。更に、 J だけでなくパリティに対して並列化を考える事も可能である。 J とパリティとを同時に並列化するには、この二つの DO ループを一つのループに統一する必要がある。この DO ループは HCTK40 の DO 50 JT2=JTMIN, JTMAX, JTINC 及び DO 49 JPAR=1, -1, -2 の文である。

次に考えられるのは、行列要素、PTP 式 (2.22c) $f(CE; c, c'; \lambda)$ 、の計算だろう。この量は R 依存の部分の並列計算が可能である。但し、 r_{12} の最大値が大きくなければ、通信コストとの兼ね合いがあるので、単純には勧められない。

ここで提供するプログラムは、一つの cpu による計算を想定している。しかし、 J とパリティに関する並列化を MPI を利用して実現するには、次の二つの変更をすればよい。

- 1) OPEN(6,FILE= ...) 及び OPEN(7,FILE= ...) という文を コメント文とする。
- 2) C MPI で始まる注釈行で挟まれたコメント文を活かす。

注意：MPI を用いて、 J^π での並列化により、特定に番号の cpu には正パリティ、他の cpu には負パリティの状態の S 行列計算が割り当てられる場合がある。結合するチャネルの数 KCC は全系の角運動量 J とパリティ Π に依存するので、異なるパリティでの計算時間が大きく異なり、非常に多くの計算資源を浪費する場合があります。即ち、負パリティの計算は全て終了しているのに、正パリティの計算は終わっていない場合、負パリティを分担した cpu は、全体の計算が終わるまで dynamic stop 状態になるようなシステム設計になっている場合がある。この対策として、以下の規則を設けている。

先ず、 J_{min} , J_{max} , ΔJ が与えられたとし、この J に対して取り得るパリティも考慮して通し番号 id を割り振る。入射粒子のスピンとパリティを I_0 , Π_0 とする。 $I_0 \neq 0$ ならば、全ての J に対して \pm 二つのパリティともに許されると考える。従って、 id を与えた時、 $J(id) = J_{min} + (\Delta J/2) \times (id)$, $\Pi(id) = (-1)^{id}$ とする。一方、 $I_0 = 0$ ならば、一方のパリティのみが許されるから、 $J(id) = J_{min} + (\Delta J) \times (id)$, $\Pi(id) = \Pi_0 \times (-1)^{J(id)}$ とする。

こうして id が与えられた時、MPI の下での作業分配は次の様にする。cpu 数を NPROCS、個別の cpu の識別番号を MY(0 から NPROCS-1) とする。

MPI を用いた hctak 計算の後では、mpis2s.f を用いて、S 行列を一つのファイルに統合しておく必要がある。

ここでの最後の忠告

伊理正夫・藤野和建はその著書「数値計算の常識」の中で特に章を設けて「たった一回の計算なんて・・・」と言っている。僕の苦い経験も基にして、以下の助言をしておきたい。パラメータを変更し、沢山の出力を見比べ計算結果を良く吟味されることを！

1.2 入出力ファイル

標準入(出)力ファイルは論理機番が 5 (6)、ファイル名は hctak.in (hctak.out) とする。S 行列を出力するファイルは論理機番が 7、ファイル名は hctksmat である。

hctak の利用に先立ち、hctak.in は必ず存在していなければならない。内部で umtab というファイル名の原子核データファイル利用している。このファイルも、hctak.in と同じ directory に存在しなければならない。hctak.out, hctksmat は存在しなければ新しく作り、存在すれば上書きされる。後者の場合、既存のファイル 内容は消される。

CDCC 方程式のチャネル結合行列要素の入出力をするならば、FFDUMP というファイルを論理機番 9 で利用する。このファイルは書式無しだから、通常は読めない。

もしも MPI を利用するならば、個別の CPU からの出力は個別のファイルに出力される。この時は、論理機番が 6 の標準出力ファイルは、hco?????、論理機番 7 の S 行列ファイルは smt????? という名前が付けられる。ここで ?????? は 5 桁の数値であり、MYRANK の値がとられる。もしも、MYRANK の値が 5 桁以下ならば、上の桁には 0 が詰められ

る。MYRANK の値が 6 桁以上だと、この部分はトラブルが発生するだろう。MPI を利用する場合でも、hctak.in、umtab は一つのファイルである。即ち、計算実行開始時に個別 CPU 配下のファイルへ自動的に (複製して) 送られる事を想定している。

入力形式

入力は論理機番 5、ファイル名 hctak.in から、一行の長さが 80 文字のカード形式で一行毎に行う。以下に、各行 (カードイメージ) 順に入力変数とその意味を説明する。第 0、1 行を例外として、書式は全て FORTRAN の意味での自由形式である。即ち、複数の数値を区切り記号で区切って並べる。区切り記号は単数又は複数の空白や一つのコンマを使用する。スラッシュを読み込むとこれ以降の桁から数値を読み込む事を止める。もう少し詳しくは、hctak 解説の後ろにある FORTRAN の自由形式の入力形態に関するメモを参照。

ここで使用する変数の属性、整数変数と実数変数の区別、は FORTRAN の暗黙の宣言による。因みに、プログラムは IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z) という宣言文が全てのプログラム単位に入れてあるので、全ての実数型変数は倍精度変数である。

特に言及しない限り、このプログラムで使用する単位は、長さは fm(10^{-13} cm)、エネルギーは MeV(10^6 eV)、角運動量は \hbar である。

0 行 桁識別のデータ 入力書式は A50

第 1 行目の 10I2 という書式を見やすくするために最初の 20 桁を使用している。その後ろは、忘備メモでも書いておくのが良いだろう。この行の内容は計算には無関係である。

以下に、各行で定義される変数とその意味を説明する。

1 行 KNTL(1,...,12), TITLE、入力書式は、FORMAT(12I2,1X,A50)

KNTL(1) 1-2 系の角運動量の結合方式

= - 1 ならば、内部的に固有スピンを 0 と置き換え、 $S = 0$ の LS 結合の計算とする。このオプションは計算時間の節約の為に導入した。核子スピンがあると、結合すべきチャンネルの数がほぼ 2 倍となる。CDCC 連立微分方程式を解くのに要する時間はチャンネル数の 3 乗に比例するから、これで計算時間が 8 倍変化する！

= 0 ならば LS 結合 (チャンネルスピン)

= 1 ならば j-j 結合表現

= 9 ならば、反応に関与する質量等は外部入力とする。

KNTL(2) 固有スピン又は全角運動量の異なる 1-2 系の状態の数。エネルギーの相違は数えない。当面の最大値は 15 である。この値は NLSJ という変数名で何度も登場する。

KNTL(3) クーロン力の取り扱い

=1 クーロン分解過程を考慮する。

=2 ならば、真空偏極ポテンシャル (Uehling potential) を (1+2) 重心と 3 の間に加える。

=3 ならば、上の 1 と 2 のオプションを同時に実行する。

KNTL(4) 1-2 系の動径部分波動関数 \hat{u} を、KNTL(4) 点毎に出力する。更に、 $\langle \hat{u}_i | \hat{u}_j \rangle$ も出力する。この重なり積分の対角成分は、原理的には 1 とならなければならない。KNTL(4) < 0 ならば、波動関数は出力しないが、重なり積分は出力する。

KNTL(5) V_{13}, V_{23} ポテンシャルを出力する。但し、 r_{13}, r_{23} の大きさは出力された値を注意深く見る事。

KNTL(6) $\langle \hat{u}_f | v_{13}^\lambda + v_{23}^\lambda | \hat{u}_i \rangle$ を KNTL(6) 点毎に出力する。

KNTL(7) 連立微分方程式に対する、結合行列要素を出力する。

実際に出力されるのは、 $(V - E)_{cc'}$ である。但し、遠心力ポテンシャルは含まない。KTRL(6), KTRL(7) に対する出力量は膨大になる場合もある。

KNTL(8) FFTAB の書式無し入出力。

= 1 ならば HCTK20 副プログラム内で定義している変数の内容を FFDUMP ファイルに出力する。この場合、計算は続行される。即ち出力後 HCTK40 副プログラムが呼ばれる。

= 2 ならば、FFDUMP から上記データを読み込み、即ち既に計算されたチャネル結合行列要素を利用して、CDCC 方程式を解く。結合行列要素の計算に多くの時間を要し、各種の全角運動量毎に並列に CDCC 方程式を解くのにこの機能を利用すればよいだろう。

KNTL(9) S 行列の出力

= 1 ならば、S 行列を標準出力に出力する。

= 2 ならば、hetksmat ファイルに出力する。

= 3 ならば、双方に出力する。

但し、散乱状態に対する S 行列要素は、出力に先立ち、 $1/\sqrt{(\text{波数ビンの幅})}$ が掛けてある。PTP (2.19b) 式を参照。

KNTL(10) 当面、使用していない

KNTL(11) 計算を高速化するために、 $|S|$ が小さなチャネルは無視する。

= n ならば、S 行列の絶対値が 2 度続けて 10^{-n} ならば、このチャネルは、以後

の連立微分方程式を解く時に無視する。即ち、強制的に $S = 0$ とする。この機能を使うためには、第 7 行目の入力 JTINC は正でなければならない。

$|S|$ としては、次の式を利用している。

$$\sum_{L_{in}} \{|Real(S_{l_c}^J L_{in})| + |Im(S_{l_c}^J L_{in})|\} \quad (1.1)$$

即ち、スピン I ・波数 k ・軌道角運動量 L を固定し、入口チャンネルの軌道角運動量で和をとっている。 S 行列要素の絶対値は実部の虚部の絶対値の和で定義している。

KNTL(12) 当面、使用していない

TITLE : 粒子とエネルギー情報を以下の例の形式で書く。

(p+22Mg)+12C, E(23A1)=1830 MeV

この例は、陽子を粒子 1、 ^{22}Mg を粒子 2、この粒子 1 と 2 の複合粒子と、 ^{12}C を粒子 3 とする時、複合粒子 (1+2) が、静止した粒子 3 に実験室系の運動エネルギー 1830 MeV で衝突する散乱問題を取り扱う。

核種記号が登場する順に粒子番号 1、2、3 が割り当てられる。

実際に解釈しているのは、3 個 (必須) の核種と等号と MeV 単位で表した運動エネルギーを表す実数である。

核種名は、質量数と元素記号をくっつけて書いたもの。3 個の核種名の間には、単数又は複数の空白 (及びコンマを一つ) の様な区切り記号を置く。括弧の様な特殊記号も区切りの役目をしている。

エネルギーは、等号を書き、その直後に常識的な意味での正の実数 (+ 記号は書かない) を書く。いわゆる科学的な記法 (1.123E+02) は不可。

ここに入力した文字列は上で説明した規則により解釈され、核データファイル umtab の内容と比較して各粒子の質量・電荷・スピン等が決定される。

ここで登場したが、(1+2) という記号はは粒子 1 と 2 を (仮想的に) 合体させてひとつの粒子と見る時に使用し、(1-2) という記号は、粒子 1 と 2 の内部構造を対象とする場合に使用する。少しくらい、混用している？

KNTL(1)=9 の時のみ、次の 3 行 (1-2,1-3,1-4) が第 1 行の直後に来る。

1-2,1-3 行 (IZ(I), IA(I), IS(I), JP(I), EM(I), I = 1, 2)

I=1, 2 は粒子 1、2 に対応する。

IZ 原子番号

IA 質量数

IS スピンの2倍 [\hbar]

JP パリティ ± 1 のどちらか

EM 質量。 ^{12}C を原子核とする中性原子の質量を 12 exact とする原子質量単位。

1-4 行 IZ(3), IA(3), IS(3), JP(3), EM(3), ELAB

粒子3に対応するパラメータを入力する。変数の意味は粒子1、2に対応するものと同じ。ELAB は、実験室系での入射粒子 (粒子1と2の束縛系) の運動エネルギー [MeV]

第1-第2-1行の間には、1行の空行が入る。この行は読み飛ばされるから、何が書いてあってもよい。

次からは、(粒子1)-(粒子2)系 (1-2) の情報 (2-1行から2-4行) を KNTL(2)(=NLSJ) 組み入力する。2-1 から 2-4 行の N は1から NLSJ まで変化する。この NLSJ は、異なるスピン状態の数である。即ち、2-1 から 2-4 迄の入力は N で指定される特定のスピン状態に対する情報を入力する。個別のスピン状態の付加的量子数として、波数を考える。

(1+2)系の基底状態を含む状態を必ず最初に入力する事。このスピン状態が N=1 に対応する。

2-1 行 LSTAB(N), ISTAB(N), JSTAB(N), NBND(N), NRES(N), IDVS(N)

LSTAB(N) 粒子1-2の内部運動の軌道角運動量

ISTAB(N) 粒子1-2のチャンネルスピンの2倍 (KNTL(1)=0の時)、又は
内部軌道角運動量と粒子1の固有スピンの和の2倍 (KNTL(1)=1の時)

当面、使用しているポテンシャルの下では、チャンネルスピンは保存するので、基底状態と異なるチャンネルスピンを入力しない事。

JSTAB(N) 粒子1+2の全角運動量の2倍

NBND(N) 粒子1-2の束縛状態の数

NRES(N) 粒子1-2の共鳴状態数

但し、エネルギー範囲は0から最大障壁エネルギーの区間に限定する

IDVS(N) 粒子1-2の内部運動を記述するポテンシャルのID番号。ポテンシャルは第[4行]で定義される。

ポテンシャルに関する注意。1-2系の波動関数は直交していなければいけない。そのため、1-2系のポテンシャルは一つに確定していなければならない。IDVSを使う時はこの事を念頭において、自分が何を意識して下さい。

2-2 行 (NODS(I), ISBE(I), BES(I), I=1, NBND(N))

この行は $\text{NBND}(N) > 0$ の時のみ $\text{NBND}(N)$ 行に分けて入力される。

NODS(I) 束縛状態の動径方向波動関数の節の数。最小は 0 とする。

ISBE(I) 調節パラメータの指標

= 0 ならば、ポテンシャルの深さを調節し、

= 1 ならば束縛エネルギーを調節して、束縛状態を計算する。

BES(I) 束縛エネルギー (MeV) を正の値として入力する。ISBE(I) = 1 の場合でも妥当な推定値を入力しておくのが効率的である。

推定できなければ、何回か推定値を変えて、出力を眺めるのが良いだろう。この目的には、wsf プログラムの使用を推奨する。

束縛状態の数の総和の上限は 10 としている ($\sum_N \text{NBND}(N) \leq 10$)。

2-3 行 (FKR(I), WKR(I), I=1, NRES(N))

この行は、 $\text{NRES}(N) > 0$ の時のみ $\text{NRES}(N)$ 行に分けて入力される。

FKR(I) 共鳴状態の中心波数 [/fm]。

WKR(I) 共鳴状態の波数幅 [/fm]。

これらは、wsf によりあらかじめ計算しておく事。ここで入力される幅は、PTP (2,10c) 式の意味での波数積分を注意深く行う波数の半幅である。従って、この幅は 2-4 行で指定される波数積分幅の中に含まれていなければならない。

共鳴状態の数は最大 10 ($\sum_N \text{NRES}(N) \leq 10$) である。

波数ビン幅の決定での注意点。波数ビン法では、与えられたビン幅の中で散乱状態波動関数を k 積分している。プログラム中では、数値的に波数積分をしている。離散化後の 1-2 系波動関数はうなり (ビート) を伴いながら、振幅が r_{12} と共に小さくなる。PTP (2.11) 式が成立しているかどうか確認しておくのが良いだろう。確認の為に、重なり積分の値を出力しておくのが良い。

波数ビン法の長所の一つは、異なる波数の波動関数を重ね合わせて、遠方での波動関数の振幅を相殺的に干渉させて、 \hat{u} の遠方での振舞いを抑制している。従って、波数ビン幅が狭すぎると、非常に遠くまで積分しないと、散乱状態波動関数のノルムが 1 にならない。

最大波数を幾らにするべきかに付いては、古典的な軌道角運動量に対応する部分波に対し、最大値を変えながら S 行列の大きさが波数にどの様に依存するかを調べるのが良いだろう。

この hctak が出力する S 行列要素を用いて、入射粒子破碎反応 (elastic breakup) に対するエネルギースペクトルを計算したいならば、波数の最大値が覆う放出粒子の運動量スペクトルの範囲も考慮に入れておくのが良いだろう。例えば、trix.f を用いて、1-2 系の相対運動の最大波数を設定して、 $T = 1$

とにおいて波数終状態の状態密度だけを考慮した時のエネルギースペクトルの波数依存性を計算しておくのが一つの下準備だろう。

大がかりな計算をする前に小規模な計算を行い、この点を確認しておく事を勧めます。

wsf が出力する共鳴幅は、位相のずれ (phase shift) δ が、共鳴点を中心として $\pm\pi/4$ だけ変化する意味での半幅であり、ここでの入力 WKR は wsf で与えられる共鳴幅よりは広い方が良いと思う。

重なり積分以外に、1-2 系波動関数や行列要素のグラフを描いてみるのも良い方法だと思います。

共鳴幅は、2010/01/18 以降は、エネルギーが共鳴エネルギーよりも低い側での半幅 (即ち、位相のずれを δ として、 $|\cos \delta| = 1/\sqrt{2}$ となるエネルギー) のみを計算している。過去には、共鳴エネルギーの両側の平均を使用していた。

2-4 行 NKSBIN(N), FKSMIN(N), FKSMAX(N)

NKSBIN(N) 粒子 1-2 の散乱状態の波数ビンの数

FKSMIN(N) 粒子 1-2 の散乱状態の波数の最小値 [/fm]

FKSMAX(N) 粒子 1-2 の散乱状態の波数の最大値 [/fm]

共鳴幅 WKR が (FKSMAX(N)-FKSMIN(N))/NKSBIN(N) よりも大きいと、対応する共鳴は無視して、波数幅 Δk は計算される。

(1-2) 系の波動関数を計算する為に、ポテンシャルが必要である。複数のポテンシャルが登録されている事を想定して、IDVS によりこれらを識別する。この IDVS で指定されるポテンシャルに、束縛状態や共鳴状態が存在するとしよう。更に、このポテンシャルの深さは束縛エネルギーを再現するように調節される (ISBE =0) とする。この場合には、深さを調節するポテンシャルに対応する スピン状態を最初に入力しておく事。同一のポテンシャルに対する共鳴状態は、束縛状態計算の後に計算される。

三重微分断面積等の分解後の粒子に関する物理量を計算したいならば、FKSMIN, FKSMAX, NKBIN の入力にはそれなりの注意が必要である。

分解過程の運動学を良く認識しておくべきである。

三重微分断面積等を計算する場合は、NKSBIN, FKSMIN, FKSMAX は、各チャンネルで共通にしておくのが良いと思う。(もっとも、三重微分断面積を計算するプログラムを一見すると、これらの値は個別のチャンネル毎に異っても良いように思える。)

NKSBIN の値は、弾性散乱のみの計算ならば小さくても良いが、三重微分断面積の計算をするならば、ある程度の大きさが必要である。粒子 1, 2 を Ω_1, Ω_2 の方向で同時検出し、粒子 1 の運動エネルギースペクトルを E_{1min} から E_{1max} の範囲で計

算したいならば、(1) 1-2 間の相対運動の波数 k の値の範囲、(2) この波数区間内で、任意の波数に対する S 行列を内挿公式を用いて内挿するために、何個程度の節点が必要か？ 等が判断の基準となろう。

3 行 NVPS, NR12, DR12, LAMMIN, LAMMAX

NVPS 独立な 1-2 系ポテンシャルの数。最大は 6 組である。

NR12 1-2 系のポテンシャルを計算する動径方向の点数

NR12=0 と入力すると、内部的に決める。この内部的にきめた値は一応の目安程度に思って下さい。

DR12 同上、刻み幅 [fm]。DR12=0 と入力すると、FKSMAX(N) の最大値を FKSX として、DR12=1/(8×FKSX) とする。この場合、他の場合もだが、出力される Norm**2 の値に注意をしておいて下さい。

LAMMIN 相互作用の多重極展開の最低次数

λ は PTP (2.21) 式の λ であり、このメモではいつもこの記号で登場する。

各チャネルの光学ポテンシャルに対応する行列要素の最も大切な部分は、 $V_{13} + V_{23}$ の対角要素の $\lambda = 0$ 成分である。従って LAMMIN > 0 と入力すると、いわゆる folded potential の部分が欠落した計算になる。内部的にいつも 0 とした。

LAMMAX 相互作用の多重極展開の最高次数。

1-2 系の軌道角運動量とパリティ保存則からの制限があるので、やたらに大きな値を入力しても、この保存則の上限値で置き換えられる。-1 をいれると、最初からこの上限値が使用される。

数値計算的な制限があるが、該当する副プログラムを読んだ範囲では LAMMAX の上限は無制限だと思う。あまり次数を高くすると数値積分の誤差が発生する。この時は、VNEXP 副プログラムの AR2 を減らすか NL を増やすと良いだろう。

4 行 (VPS(J,I,N), J=1, 6) 粒子 1-2 間の相互作用ポテンシャルのパラメータ。異なるスピン状態に対して、異なるポテンシャルを与える可能性を認めて、NVPS 組のポテンシャル定義パラメータを与える。

一組みのポテンシャルパラメータデータは、最大 5 行であり (即ち、I の最大値は 5)、個別の I で区別されるポテンシャルは、重ね合わされる。

一つの組の最後の行は空白か又は先頭データ VPS(1,I,N) が負の数である。

N の最大値は 6 であり、この N で一組みのポテンシャルを識別する。この組みは、(2-1 行) で与えた IDVS を用いて識別・引用される。

VPS(1,*,*) ポテンシャルの属性

- = ± 1 ならば固定的なポテンシャルであり、
 - = ± 2 ならば深さを調節して束縛エネルギーを再現する対象とする。
- ISBE=1 ならば VPS(1,*,*) が 1 でも 2 でも動作は同じである。

VPS(2,*,*) ポテンシャルの型

- = 1 ならば Woods-Saxon
- = 2 ならば Woods-Saxon の微分の 4 倍
- = 3 ならば 修正 Thomas 型の関数形を利用する。

VPS(3,*,*) ポテンシャルの深さ V_0 [MeV]

VPS(4,*,*) ポテンシャルの半径 R_N [fm]

VPS(5,*,*) ポテンシャルのぼやけ (diffuseness) a [fm]

VPS(6,*,*) ポテンシャルの電荷半径 R_C [fm]

実際の関数形

Woods-Saxon	$V(r) = V_0 / (1 + E)$
Woods-Saxon の微分の 4 倍	$V(r) = 4 \times V_0 \times E / (1 + E)^2$
修正 Thomas 型	$V(r) = 2 \times V_0 \times \vec{\ell} \cdot \vec{s} \times E / (a \times R_N \times (1 + E)^2)$

ここで、 $E = \exp \{(r - R_N)/a\}$ と略した。半径の表現に $A^{1/3}$ が登場しない事に注意。

ポテンシャルの深さに対応するパラメータ V_0 は、符号にも注意する事。引力にしたければ、たとえ微分型でも、負号が必要である。Thomas 型を修正した理由は、原点付近での発散を避けるためである。この式で、 $\vec{\ell} [\hbar]$ は粒子 1-2 間の相対運動軌道角運動量であり、 $\vec{s} [\hbar]$ は、KNL(1)=0 ならばチャネルスピンであり、KNL(1)=1 ならば粒子 1 のスピンである。これらのポテンシャル以外に、半径が R_C の一様帯電球のクーロンポテンシャルがある。クーロンポテンシャルに使用される半径パラメータ R_C は、最大 5 行の一组のポテンシャルパラメータ行の中で最初に現れた 1.0^{-2} fm よりも大きな数値の R_C が採用される。従って、 1.0^{-2} fm 以下のクーロン半径はありえないと仮定している事になる。

ここに 1 行の空行が入る。

次からは、(粒子 1 + 粒子 2)-粒子 3 の情報を入力する。

5 行 (VPL(J,I,N),J=1,6)

粒子 N(= 1 又は 2) が粒子 3 と相互作用するポテンシャルパラメータを与える。I は最大 10 である。即ち、最大 10 行を用いて粒子 N と粒子 3 のポテンシャルを記

述する。最初の行は必ず $N = 1$ に対応する。 $VPL(1,*,*)$ が 0 (又は空行) か負の整数が現れると、次の行は $N=2$ 又は VPL の入力終了したと解釈する。

パラメータの意味

$VPL(1,*,*)$ 実部又は虚部を表す指標

= ± 1 ならば実部

= ± 2 ならば虚部である。

このパラメータは、内部で絶対値がとられるから、負で入力してもよい。

$VPL(2,*,*)$ ポテンシャルの関数型

= 1 ならば Woods-Saxon

= 2 ならば Woods-Saxon の微分の 4 倍

$VPL(3,*,*)$ ポテンシャルの深さ V_0 [MeV]

$VPL(4,*,*)$ ポテンシャルの半径 R_N [fm]

$VPL(5,*,*)$ ポテンシャルのぼやけ (diffuseness) a [fm]

$VPL(6,*,*)$ ポテンシャルの電荷半径 R_C [fm]

ポテンシャルの定義は、第 4 行と同一であるが、スピン・軌道力は受け付けない。

あまり浅いポテンシャル ($V_0 < 1.0 \times 10^{-5}$ [MeV]) は無視する。

6 行 NRF, (DRF(M), RF(M), M=1, NRF)

ポテンシャルの行列要素に対する r_3 の表を定義する。即ち、 $r_3 = 0$ から $r_3 = RF(1)$ 迄は DRF(1) 刻みに、次は $r_3 = RF(2)$ 迄を DRF(2) 刻みで ... という様に粗いステップで計算する。NRF の最大値は 10 であり、全体では 300 点迄取り得るとする。即ち、 $\sum_M \{ (RF(M) - RF(M-1)) / DRF(M) \} \leq 300$ 。ここで r_3 は、粒子 3 から (粒子 1 と粒子 2 の重心) へ向かう位置ベクトルである。

注：(1) ポテンシャル表を作るのに、3 次のスプラインを利用している。この為、 $RF(1)/DRF(1)$ 及び $(RF(NRF) - RF(NRF-1))/DRF(NRF)$ は 4 以上でなければならない。プログラム内部では、この確認をしていない。

(2) $(NR12 \times DR12)$ で最大値が与えられる粒子 1 と 2 間の距離と、 $RF(NRF)$ で与えられる粒子 3 から見た入射粒子の重心間最大距離とは、ポテンシャルの行列要素を計算する場合に関係がある。粒子 N , ($N=1$ or 2) の質量を m_N とした時、以下の関係がある事が望ましい。

$$[(m_1 + m_2) \times NR12 \times DR12] / \min(m_1, m_2) > RF(NRF)$$

この要求は、粒子 N が必ず V_{N3} を感ずるという要求である。NR12 < 0 として入力すると、この要求に拘らず NR12 の絶対値が使用され、NR12 > 0 として入力されるならば、上の要求を満足する値に置き換えられる。さぼるならば、NR12 \geq 0 としておくといだろう。

7 行 JTMIN, JTMAX, JTINC、DR3

2 \times (全系の角運動量) $[\hbar]$ の取り得る範囲を決める。

即ち、JTMIN から、JTINC 刻みに JTMAX までとする。この機能は、テスト計算の場合に威力を発揮するはずだ。

スピンの半奇数になる場合もあるだろうから、いつも 2 倍して整数として取り扱う。

JTMIN が負ならば、次の行から自由形式で |JTMIN| 個の計算すべき J, Π を表入力 (table input) とする。この場合には、次の表の規則による整数を入力する。

J^π	$1/2^+$	$1/2^-$	$3/2^+$	$3/2^-$...	0^+	0^-	1^+	1^-	...
入力値 (id)	2	3	4	5	...	0	1	2	3	...
hatak JT2	$\{(id)/2\} \times 2$					$\{(id)/2\} \times 2$				
hatak JPAR	$(-1)^{(id)}$					$(-1)^{(id)}$				

DR3 は、連立微分方程式を解く時の刻み幅 [fm]

最大半径迄の点数は NR3=NR/(NR)/DR3 で与えられる。与えられたエネルギーでシュレーディンガー方程式を解く時、刻み幅や最大軌道角運動量をいかほどに設定すべきかの判断が難しければ、opm.f プログラムを用いて小手調べをしておく事を勧める。

クーロン波動関数は、通常の記号で書くと、 $1 - 2\eta/\rho - l(l+1)/\rho^2 = 0$ を満足する値に対して変曲点をもち、それよりも小さな ρ に対しては非常に小さな関数値を持つ。ここで、 l を最大軌道角運動量、 ρ を最大半径 $RF(NR) \times (\text{波数})$ だとすると、ある種の制限 (例えば $l_{max} = \rho_{max} \sqrt{1 - 2\eta/\rho_{max}}$) が成立するだろう。従って、この制限から無闇に離れた値を入力しない方が妥当だろう。HCTK46 から、Cnum という値が出力される。この値が異常に大きいと感じたら、ここらへんを調べてみるのが良いだろう。

```

MYX=(-1)**MY; LOOP=1
DO JX=MY, IDMAX, NPROCS
  JYJX; IF (LOOP < 0) JY=JY+MYX; LOOP=-LOOP
  MY を id として全角運動量とパリティを評価する
  * * * * *
ENDDO

```

hctak では、 J に関する入力は 2 倍にしている。

1.3 入出力例に対する簡単なコメント

PTP pp 43 Table I (b) の先頭に記載された ^{58}Ni による 56 MeV 重陽子弾性散乱の場合。但し、核子光学ポテンシャルの内、スピン・軌道力部分は無視した。

hctak への入力データは以下の通り。但し、日本語のみの行は注釈であり、実際に入力してはいけない。

```
2 4 6 8 10
0 4 0 1 0 0 0 0 3 0      (p+n)+58Ni, Ed=56 MeV
上の 2 行が第 0、1 行に対応する
---- system 1-2 -----   !ここは空行と書いた部分
0 2 2 1 0 1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: Gnd, 3S1 state
0 0 2.22      /NODS, ISBE, BES: depth adjust
4 0.0 1.0      /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
2 2 2 0 0 1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: Gnd, 3D1 state
4 0.0 1.0      /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
2 2 4 0 0 1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: Gnd, 3D2 state
4 0.0 1.0      /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
2 2 6 0 0 1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: Gnd, 3D3 state
4 0.0 1.0      /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
上の 9 行が 2-1 から 2-4 に対応する。共鳴が無いから、2-3 は入れない
1 0 0.1 0 6 /NVPS, NR12, DR12, Lammin, Lammax
上の 1 行が第 3 行である
-2 1 -27.8655 2.4 0.65 2.4/VPS(1-6)
---- sys. 1 or 2-3 Watson,(??) pot. ----
上の 2 行が第 4 及び空行
1 1 -48.76 4.53 0.75 5.03 /VPL(*,*,1)
2 1 -3.460 5.11 0.5341 0.0 /VPL(*,*,1)
-2 2 -5.214 5.11 0.5341 0.0 /VPL(*,*,1)
上の 3 行で 1-3 系の光学ポテンシャルが定義される。
最後の行の先頭が -2 だから次からは 2-3 系の記述となる。
1 1 -46.51 4.53 0.75 0.0 /VPL(*,*,1)
2 1 -4.60 4.88 0.58 0.0 /VPL(*,*,1)
2 2 -5.586 4.88 0.58 0.0 /VPL(*,*,1)
0 /potential 2-3 terminator
```

上の4行が 2-3 系の光学ポテンシャルを与える。

上の最後の行の先頭が 0 だから、次の入力 phase に移行する。

上の 3 行目の先頭を 2 ではなく -2 とすると、4 行目は不要。

```
1 0.5 30.0 1.0 50.0 2.0 100.0 10.0 1000/NRF,(DRF(i),RF(i),i=1,NRF)
0 100 2 0.05D0/ JTmin, JTmax, JTinc, DR3
```

最後の2行が第6、7行である。

1 行目は NRF=1 だから、1 0.5 30.0 迄が有効な入力である。

その後ろ、1.0 以降は読み込まれないから、必ずしも消す必要は無い。

次の11行は、KNTL 変数の意味をメモしている。これらの行も読み込まれないから計算には関係しないが、このメモは書いておく方が良いでしょう。

```
C KNTL(1): =0 for LS: =1 for jj coupling
C KNTL(2): number of indep. spin states NLSJ
C KNTL(3): Coulomb ex. and vacuum pol.
C KNTL(4): sys1-2 wave functions
C KNTL(5): V1-3 and V2-3 potential
C KNTL(6): sys1-2 matrix elements
C KNTL(7): coupling matrix elements
C KNTL(8)
C KNTL(9): S matrix output:=1, print, =2 file
C KNTL(10):
```

$^3S_1, ^3D_{1,2,3}$ の4種類のスピン状態を取り上げている (NLSJ=4)。

波数ビンは $[0, 1] \text{ fm}^{-1}$ の範囲を4等分している。束縛状態も数えると、(1-2)系波動関数は17本となる。

NR12=0 と入力している。従って、ここでは hctak が内部で決定している。

VPL の入力状態遷移に関する二つの手法(先頭が負数と0入力)が例示してある。

次からは、この入力に対する単一 CPU での出力例である。但し、この出力例を書いても hctak は手を加えているので、異なる様子の出力に出喰わす可能性がある。この出力中の日本語文字は、後から付けた注釈である。

date=2008/ 4/10/13:12:30

hctak program version 2008/04/05 by Y. Aoki

上の2行が hctak の開始行である。date= の次の文字が、実際の計算開始時刻であり、次の行は hctak の版と著作権を示す。

```
2 4 6 8 10 title
```

```

0 4 0 1 1 0 0 0 3 0      (p+n)+58Ni, Ed=56 MeV
  sys  Ename  Z   A   J   pi    M[u]
    1    H    1   1  1/2  +    1.0073
    2    N    0   1  1/2  +    1.0087
    3   NI   28  58   0   +   57.9200
              Elab((1+2)-3)=   56.0000 MeV

```

上の数行は、umtab ファイルを参照してタイトルを解釈した内容であり、原子番号・質量(数)・スピン・パリティ、入射エネルギーが返されている。

```

***** system 1-2 in LS coupling*****
Ch LS 2S 2J Nbnd Nkbin  K(min)  K(max)  Pid
  1  0  2  2   1    4   0.0000   1.0000   1
  2  2  2  2   0    4   0.0000   1.0000   1
  3  2  2  4   0    4   0.0000   1.0000   1
  4  2  2  6   0    4   0.0000   1.0000   1

```

```

bound state(s)
Ch Node  BE  isBE?
  1   0   2.2200  0

```

粒子1と2の系に関する基本的な量子数等。Pid は、対応するチャンネルの IDVS 値

```

System 1-2: potential parameters
I1=1(2) fixed (floating) part  I2=1(2) volume (surface) type

Pid  I1 I2   V[MeV]   R[fm]   a[fm]   RC[fm]
  1   2  1  -27.86550  2.40000  0.65000  2.40000

```

(1-2) 系のポテンシャルパラメータが出力された。

```

System 1/2-3 optical potential parameters
I1=1(2): real (imag.) part.  I2=1(2) volume (surface) type

sys  I1 I2   V[MeV]   R[fm]   a[fm]   RC[fm]
1-3  1  1  -48.7600  4.53000  0.75000  5.03000
1-3  2  1   -3.4600  5.11000  0.53410  0.00000
1-3  2  2   -5.2140  5.11000  0.53410  0.00000

```

2-3	1	1	-46.5100	4.53000	0.75000	0.00000
2-3	2	1	-4.6000	4.88000	0.58000	0.00000
2-3	2	2	-5.5860	4.88000	0.58000	0.00000

((1+2)-3) のポテンシャルパラメータも出力された。

```
NR12=    600  DR12=  0.1000 fm.   Lambda= 0 to  6
R3=0 to   30.00 fm (DR3= 0.05000 fm)*(   600 steps)
2*Jtot=    0 to   100 step   2
```

数値積分に係するパラメータの出力すると、入力 phase (HCTK10) は終了。

```
HCTKMS: N12=  17,  NFF=  470  Lammax=  4
```

HCTKMS 副プログラムからの基本的パラメータの出力である。入力値の の
 最大値は6であったが、(1-2)系の量子数から判断して、4が物理的な意味での
 最大値であるから、置き換えられている。他の変数の意味は、内部構造の項を参照。

次からは、HCTK20 の作業になる。date= という出力を見ると、HCTK10 では、
 ほとんど計算時間を消費していない。

```
date=2008/ 4/10/13:12:30
***** HCTK20 entered *****
```

System 1-2 ch. ID= 1

```
      potential parameters
I1 I2    V[MeV]    R[fm]    a[fm]
 2  1   -27.8655    2.4000    0.6500
```

WSBND: ISBE= 0

Loop	LS	NS	NN	Vfac	BE(MeV)	FI
0	0	0	0	1.00000	2.22000	-2.07145E-02
1	0	0	0	0.97929	2.22000	-6.37518E-04
2	0	0	0	0.97866	2.22000	-5.54605E-07

```
<r>=    3.7679E+00 sqrt(<r*r>)=    4.4237E+00 fm
```

もう一度 (1-2) 系のポテンシャルパラメータが出力され、このポテンシャルの下での束縛状態が計算される。ISBE=0 だから、ポテンシャルの深さは束縛エネルギーを再現する

ように、 $VPS(1,*,*)=\pm 2$ の項の深さが Vfac 倍に調整された。従って、散乱状態の

波動関数の計算にも、この調整された深さが利用される。

FI は束縛状態波動関数の内部解と外部解の対数微分の差に比例する量である (後出)。

Ch	ID	NK	k_range		delta_k	Norm**2
1	2	50	0.0000E+00	2.5000E-01	2.5000E-01	9.2195E-01
1	3	50	2.5000E-01	5.0000E-01	2.5000E-01	9.5390E-01
1	4	50	5.0000E-01	7.5000E-01	2.5000E-01	9.5298E-01
1	5	50	7.5000E-01	1.0000E+00	2.5000E-01	9.5460E-01

上の4行は、3S1 散乱状態 (Ch=1) のパラメータである。束縛状態が既に計算されている

から、波動関数の識別番号 (ID) は 2 から 5 である。波数平均をする範囲が4列から6列目に書いてある。第3列 (NK) は波数平均に使用した波動関数の数である。もしも共鳴状態がある波数区間に含まれているならば、この区間は、共鳴域とその両側とに3分割される。その3区間で、個別に波数積分が行われる。最後の行は 式 (2.11) の意味

でのノルムである。1 になっていて欲しい。 r_{12} 積分の範囲が狭いと、1 に満たない

場合がある。

3D1 状態から、3D3 状態の計算が次に続くが、省略する。

次は、(1-2) 系波動関数のまとめである。全部で 17 本の波動関数がある。

delta[rad] は位相のずれ (phase shift) である。

quantum numbers of system 1-2								
ID	E[MeV]	k[/fm]	Eta	N	L	2*S	2*J	delta[rad]
1	-2.22000	-0.23131	0.00000	0	0	2	2	0.00000
2	0.86445	0.14434	0.00000	-	0	2	2	2.42050
3	6.05115	0.38188	0.00000	-	0	2	2	1.53127
***** この部分は省略 *****								
16	16.42456	0.62915	0.00000	-	2	2	6	0.12693

```
17 31.98466 0.87797 0.00000 - 2 2 6 0.28568
```

KNTL(4)=1 だから、次からは 17 本の動径波動関数が出力される。動径部分波動関数を $R_{l\backslash,j}(r)=u_{l\backslash,j}(r)/r$ と書いた時、 $u_{l\backslash,j}(r)$ が出力されている。

```
system 1-2 wave functions
```

```

r[fm]      Id=  1      Id=  2      Id=  3      Id=  4      Id=  5
0.1 3.50505E-02 1.00194E-02 2.20862E-02 3.06043E-02 3.97842E-02
0.2 6.98961E-02 1.99719E-02 4.39980E-02 6.08902E-02 7.90050E-02
0.3 1.04335E-01 2.97917E-02 6.55636E-02 9.05442E-02 1.17109E-01
*****   この間も省略   *****
59.9 2.18451E-03 -3.09659E-02
60.0 -9.63838E-04 -2.74338E-02
```

上の最後の 2 行は ID=16,17 に対する波動関数である。

この次に、(2.11) 式の重なり積分が、17 組み全ての組合せに対して出力される。一番左が識別番号 N であり、その右の数値は 1 から順番に N 迄の識別番号に対する重なり積分の値である。識別番号 (*) が 6 以上だと複数行にわたり、出力される。

```
overlap int <u(N)|u(*)>
```

```

1 1.000000E+00
2 -1.389241E-07 9.219520E-01
3 -1.092223E-07 2.544743E-02 9.538956E-01
*****   この間も省略   *****
2.305679E-02 9.567464E-01
```

次からは、V(1-3),V(2-3) ポテンシャルパラメータがもう一度出力される。

7 列目の DR は内部的に使用している距離の刻み幅である。8 列目の Rmax はこの半径までのポテンシャルが計算される事を示す。6 桁落ちとなる程度の半径である。個別のパラメータの値により、これらの DR, Rmax は異なる。

核力ポテンシャルの値が核表面での値から 6 桁落ちでは精度不足だと思う利用者は HCTK20 副プログラムの変数、E6=2.31*6 の 6 を 7 や 8 と増やすと 7 又は 8 桁落ちまで計算に取り入れる。

```
VDCAL: potential parameters
```

	I1=1(2)	real(imag.)	I2=1(2)	volume(surface)	pot.		
sys	I1	I2	VV	RR	AA	DR	Rmax
1-3	1	1	-48.7600	4.5300	0.7500	0.1875	14.8125
1-3	2	1	-3.4600	5.1100	0.5341	0.1335	12.4178
1-3	2	2	-5.2140	5.1100	0.5341	0.1335	12.4178
2-3	1	1	-46.5100	4.5300	0.7500	0.1875	14.8125
2-3	2	1	-4.6000	4.8800	0.5800	0.1450	12.9050
2-3	2	2	-5.5860	4.8800	0.5800	0.1450	12.9050

KNTL(5)=1 だから、ポテンシャルの値とその微分が出力される。

第 1 列の整数に上の DR をかけたものが、実際の半径 (fm) である。

```
V(1-3) table DR(R/I)= 0.1875 0.1335 fm
      Real [MeV]      (der)*DR      Imag [MeV]      (der)*DR
0 -4.86442E+01  2.88934E-02 -3.46122E+00 -3.04190E-04
1 -4.86113E+01  3.70499E-02 -3.46156E+00 -3.90553E-04
2 -4.85693E+01  4.74907E-02 -3.46201E+00 -5.01424E-04
3 -4.85154E+01  6.08440E-02 -3.46258E+00 -6.43749E-04
***** この間も省略 *****
90 0.00000E+00 0.00000E+00 -2.05542E-05 5.13853E-06
```

```
IZ(1)= 1      IZ(2)= 0      IZ(3)= 28
Rcoul(1)= 5.03 Rcoul(2)= 0.00 Rcoul((1+2)-3)= 0.00 [fm]
```

最後に、電荷半径が出力される。ここまでが HCTK20 副プログラムからの出力である。1 秒ほどで終わっている。

もしも、KNTL(6)=1 ならば、HCTK20 からポテンシャルの行列要素の管理表と行列要素が出力される。管理表は以下の様なものである。

```
HCTK20:matrix reference
N1 N2 ID Lammin max FFID
1 1 1 0 0 1
2 1 2 0 0 3
2 2 3 0 0 5
3 1 4 0 0 7
3 2 5 0 0 9
```


3	3	6	0	0	11
4	1	7	0	0	13
***** この間も省略 *****					
17	15	151	0	4	453
17	16	152	0	4	459
17	17	153	0	4	465

管理表の見方は、次の通り。最初の2列は、波動関数の識別番号対であり、PTP式(2.22c)の c と c' に対応する。第3列はこの組合せに対する通し番号である。第4、5列は、同じ式の の取り得る範囲、最後の行は行列要素の組合せ通し番号に対する最小の識別番号である。例えば、識別番号が15と17の波動関数でポテンシャルを挟むとする。この組合せは前から151番目の組合せであり、その行列要素はFFTAB配列の453番目から458番目迄に書き込まれる。取り得る の値は0, 2, 4の3通りあり、ポテンシャルには実部と虚部があるから、6個の行列要素を持つ。

この後に、FFID が1から470(NFF)番までの行列要素が出力される。因みに470は、

FFID の最後の値(465)から始まる6番目の要素の識別番号である。表の見方。第1列

はR3[fm]であり、残りの5列はMeV単位での行列要素(2.22c)式である。この先頭付近の1から5は、行列要素の識別番号(FFID)である。

potential matrix elements

#	1	2	3	4	5
0.000	-8.83118E+01	-8.55543E+00	-1.12010E+01	2.19745E-03	-1.10411E+01
0.500	-8.79378E+01	-8.58541E+00	-1.11988E+01	-1.30267E-02	-1.10839E+01
1.000	-8.67639E+01	-8.68112E+00	-1.11739E+01	-6.08441E-02	-1.12025E+01
1.500	-8.46355E+01	-8.85980E+00	-1.10719E+01	-1.47629E-01	-1.13684E+01
***** この間も省略 *****					
29.000	-9.50083E-04	-2.08201E-02	-4.57483E-03	-3.52316E-02	-7.52807E-03
29.500	-8.98593E-04	-1.96032E-02	-4.33074E-03	-3.32307E-02	-7.14172E-03
30.000	-8.50428E-04	-1.81369E-02	-4.10473E-03	-3.08109E-02	-6.79366E-03

次からは、HCTK40 副プログラムの出番となる。

date=2008/ 4/10/13:12:31

***** HCTK40 entered *****
allocated memories

NCC	KCC	NZS	NRFF	ICW	NUV	NU	IFCC	sum
75	42	17	60	1080	14112	17640	220332	253803

入力データに依存して、必要なメモリーを確保する。倍精度実数での語数であるから、8倍するとバイト数(約200 MB)になる。

この次は、連立微分方程式を解く時の(NCC)個の状態に関する量子数の表である。KCM は((1+2)-3)系の波数、eta はクーロンパラメータ、2*Lcm は全系の角運動量(2.14b)式

のJに対し、(2*J+2*Lcm)/2 とすると、((1+2)-3)系の軌道角運動量となる量である。

(1-2)系の一つの状態が(2I+1)個に分かれ、状態数はN12=17から、NCC=75と増える。

coupled channles base								
ID	Ecm[MeV]	KCM[/fm]	eta	2*Lcm	L	2*S	2*I	k(1-2) [/fm]
1	54.118596	2.245346	0.836405	-2	0	2	2	-0.231305
2	51.034146	2.180422	0.861310	-2	0	2	2	0.144338
***** この間も省略 *****								
75	19.913934	1.362036	1.378832	6	2	2	6	0.877971

次の行は、クーロン波動関数に関係する。正常動作ならば Wronskian=1 となる。各クーロンパラメータに対し、誤差が最大となる軌道角運動量 L を示している。

Coul. wf: Rmatch= 29.900 fm Lmax= 53				
rho	Eta	L	Wronsk.-1	
6.714E+01	8.364E-01	51	8.3267E-16	
6.519E+01	8.613E-01	46	5.5511E-16	
6.179E+01	9.087E-01	44	8.8818E-16	
5.435E+01	1.033E+00	47	7.7716E-16	
4.072E+01	1.379E+00	52	2.4425E-15	

ここまでで、準備作業が終了した。これからは、J を与えて、連立微分方程式を解き、S 行列を出力する。

***** CC stage entered *****

date=2008/ 4/10/13:12:31

2*Jtot= 0 NS0= 1

もしも KNTL(7)=1 ならば、ここに PTP (2.22a) 式に対応する多量の出力が来る。但し、

この出力には運動エネルギーや、必要ならばクーロンポテンシャル、の補正が対角要素に加えてある。der 項は、2 階微分/6 である。後に見るように結合方程式の次元数は $J = 0-$ の場合 13 (KCC) だから、 $13 \times 14 / 2 = 91$ 組みの結合行列要素が出力される。この結合行列要素は J 毎に出力されるから、かなりの量になる。一様帯電球に対するポテンシャルは二階微分が半径位置で不連続になるから、何処かで不連続が見られる。

#HCTK44: MC= 1

#	R(fm)	Re(FCC)	Im(FCC)	der(Re(FCC))	der(Im(FCC))
0.000	-1.30407E+02	-8.55543E+00	3.77462E-01	-3.23324E-02	
0.500	-1.30072E+02	-8.58541E+00	-2.88289E-01	2.62235E-02	
1.000	-1.29017E+02	-8.68112E+00	7.75695E-01	-7.25614E-02	
1.500	-1.27087E+02	-8.85980E+00	6.86476E-01	-6.78553E-02	
***** この間も省略 *****					
29.000	-1.85360E+01	-2.71272E-03	6.36100E-04	-2.05374E-05	
29.500	-1.85589E+01	-2.56864E-03	6.21591E-04	-7.82143E-06	
30.000	-1.85808E+01	-2.43567E-03	6.12601E-04	7.40776E-06	

この次は、微分方程式を解いた後の出力となる。

0	-1	13	1.276E+01	/JT2	Jpar	KCC	Cnum						
IDCC	11	12	13	14	15	24	25	26	27	72	73	74	75
-1	11	1.75645E-02		/Jpar		Inc. ch, S **2							
-0.079716250 -0.033890546 -0.024228435 -0.075393079 -0.057958807 -0.087850959													
0.033483746 0.031431951 -0.019969057 -0.088014100 0.011177956 -0.018748800													
-0.021730405 0.024146483 -0.021782158 -0.018734630 0.029991916 0.034085719													
-0.010490133 0.022858574 -0.018979349 -0.021389965 0.036710603 -0.028651282													
-0.063195524 0.024728283													

JT2 が J の 2 倍、Jpar がパリティを与える。NS0*DR3 から Rmatch 付近まで積分を行い、S 行列を計算する。KCC は微分方程式の次元数。Cnum は S 行列を計算する行列の条件数である (後出)。IDCC に続く 13 (KCC) 個の整数は、coupled channels base の表の第 1 列に与えた状態の識別番号であり、これらの状態が CDCC 方程式により結合している。

次の行の Jpar, Inc. ch はパリティと入射波が存在するチャンネル識別番号。—S—**2

は入射波に対する外向き波の相対的な大きさである。J=0 の状態ではほとんどの波が吸収されているから、1 よりもかなり小さな値になっている。全然吸収されなければ、たとえば分解過程の寄与が大きくとも、1 となる。次の 2 つずつ組みにして、1 3 (KCC) 個の S 行列要素 (複素数) が出力される。但し、break up channel の S 行列は k の平方根で割ってある (2.19b) ので、これらの平方和は $|S|^2$ の出力値とは一致しない。

次からは、J=1,2,...,50 迄の出力が続く。

hctak.out ファイルの S 行列の出力の見方が分かれば、S 行列ファイル hctksmat の見方は自明だろう。

最後迄の計算に要した時間は手元の PC (Pentium 4, 3.2 GHz) で 19 秒弱であった。クーロン分解を考慮すると、こんなに速くは終わらないが。。。

cache miss や page fault の可能性を無視して、所要時間に付いて考える。

HCTK10 の所要時間は無視出来るだろう。

HCTK20 では、NR12 が非常に大きくならなければ、先ず無視しても良い。しかし、重イオン反応で、全ての R_3 積分に全ての r_{12} が寄与するという条件を付けると NR12 が非常に大きくなる場合がある。状態数 N12 の 2 乗に比例する部分もあるので、組み合わせられると長時間の計算が必要となる場合もある。KNTL(1) = -1 であっても、1 時間程度の場合を経験している。

HCTK40 では、二つの因子が計算時間をきめる。解くべき結合方程式の次元数 (KCC) の 3 乗に計算時間は比例する。最大積分半径を与える NR3 と 部分波展開の次数 (JTMAX-JTMIN) の積に比例して計算時間は増える。

次の例は、(p+22Mg)+12C 反応を取り上げた。先ずは hctak への入力データ

```

 2   4   6   8  10      | title begins
1 9 1 0 0 0 0 0 1 0      (p+22Mg)+12C, E=1840 MeV
  system 1-2
 2   5   5   1   0   1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: Gnd, d5/2 state
 0   0   0.125      /NODS, ISBE, BES: depth adjust
10   0.0 2.5      /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
 2   3   3   0   1   1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: d3/2 state
0.33554 5.0E-3 /fkr wkr
 4   0.0 1.0      /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
 0   1   1   0   1   1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: s1/2 state
0.1362027 2E-5 /FKR WKR
 1   0.0 0.25      /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
 1   3   3   0   0   1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: p3/2 state

```

```

1 0.0 0.25 /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
1 1 1 0 0 1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: p1/2 state
1 0.0 0.25 /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
3 7 7 0 0 1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: f7/2 state
1 0.0 0.25 /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
3 5 5 0 0 1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: f5/2 state
1 0.0 0.25 /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
4 9 9 0 0 1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: g9/2 state
1 0.0 0.25 /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
4 7 7 0 0 1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, Nres IDVS: g7/2 state
1 0.0 0.25 /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
1 1600 0.1 0 10 /NVPS, NR12, DR12, Lammin, Lammax
1 3 -7.5 3.505 0.65 /VSP(1-6)
-2 1 -46.804 3.505 0.65 3.505/VPS(1-6)
sys. 1-3 Watson pot.
1 1 -36.798 2.46 0.57 2.46 /VPL(*,*,1)
2 1 -1.697 2.46 0.50 /VPL(*,*,1)
-2 2 -5.172 2.46 0.50 /VPL(*,*,1)
1 1 -120.0 3.62 0.84 6.62 /real WS V R a
2 1 -34.02 4.89 0.69 /VPL(*,*,1)
0 /potential 2-3 terminator
4 0.5 30.0 1.0 40.0 2.0 50.0 10.0 800/NRF,(DRF(i),RF(i),i=1,NRF)
201 201 2 0.01D0/ JTmin, JTmax, JTinc, DR3

```

NR12 に正の値を入れているが、内部的に増やしているかも知れない。増やされるのが嫌ならば、負の数として入力すると良い。本格的な計算に入る前に、予備計算をして、行列要素 PTP (2.22c) 式が NR12 にどのように依存するかを調べておくのが賢明だろう。

Lammax の値は、内部的に適当に決めて下さいという事である。

ここでは、NRF の使い方も例示している。

更に、小手調べの計算と考えて JTmin=JTmax として、計算時間を節約している。

この例では核子スピンを活かしている。JTMIN の値は全系のスピンの整数か半整数かを正しく反映していないとエラーとなる。

1.4 hctak 概念的理解に向けて

粒子 1、2、3 と呼ぶ 3 個の粒子を考える。これらの粒子の個性を表すパラメータとして、原子番号 (IZ)、質量数 (IA)、原子質量単位 u 又はダルトンで表した質量 (EM)、スピンの 2 倍 (IS)、パリティ (JP) が与えられたとしておく。ここで、括弧の中の文字は

hctak で使用されている変数名である。これらの粒子には、内部構造は無いとする (あっても無視するという意味である)。

粒子 1 と粒子 2 との束縛状態や散乱状態を考える。特に、この基底状態を一つの粒子と考える。この (1+2) 系の複合粒子が入射粒子となり、粒子 3 とぶつかる場面を想定し、この散乱問題を三体問題的に取扱いたい。ここに、CDCC という手法が提案された。特に CDCC を適用すべきなのは、複合粒子 (1+2) 系の束縛エネルギーが小さい時である。

全体系を記述するのに、まずは粒子 1 と 2 だけの系を取り上げ、粒子 3 は暫く忘れておく。この系を (1-2) 系と呼ぶ事にし、この両者の相対運動を記述する。まず、粒子 2 から粒子 1 へ向かう座標 (相対座標) を r とする系で考える。状態を区別するパラメータとして、束縛状態と散乱状態という考え方がある。エネルギー固有値が負であるか正であるかと言ってもよい。束縛状態の数は有限であり、散乱状態は連続的なパラメータで記述される。エネルギーを表す変数は束縛状態に対して (BES) を用いる。束縛状態波動関数の動径部分は、何回かその値が 0 となる場合がある。この波動関数の値が 0 となる点を波動関数の節 (ふし) と呼ぶ。節の数 (NODS) も量子数と考える事が出来る。水素原子波動関数ではエネルギー量子数を N 、軌道角運動量を l とすると、節の数 n は $n = N - l$ で与えられる。3次元調和振動子では、 $n = N - 2l$ である。原子核物理では、節の数を数えるのに二つの流儀があり、無限遠点を一つと数えるやり方と、無限遠点は数えないやり方である。hctak では、後者を採用している。従って、 n の最小値は 0 である。 $\hat{u}(r)$ は実関数であり、原点付近で正となるように、位相を選んでいる。(1-2) 系の波動関数は (WF) という配列に書き込まれる。

エネルギーと関係があるパラメータとしては、運動量又は波数を取り上げてもよい。散乱 (連続) 状態は、状態数が多すぎて困るから波数に上限を設け、これより大きな波数の状態は散乱問題には寄与しないと仮定する。それでも未だ取り扱えないから、ある程度の波数の幅の波動関数を平均値の波数を持った波動関数 $\hat{\phi}(\hat{k})$ で置き換える。散乱状態の波数に関するパラメータは、波数の最小 (大) 値 (FKSMIN, FKSMAX) と、この波数範囲を何個に等分するかを決める整数 (NKSBIN) が使われる。

エネルギーとは独立なパラメータとして r に対応する軌道角運動量 (LSTAB) を考える。軌道角運動量は、粒子スピン $IS(1)$ 、 $IS(2)$ と結合して、最終的には複合系 (1+2) のスピン (JSTAB) を作らねばならない。この結合順序に LS (Russel-Saunders) 結合と j-j 結合と呼ばれる二つの方法を考える事ができる。

LS 結合では、粒子 1 と 2 の固有スピンがまず中間状態スピン S を作り、この S と相対運動軌道角運動量と結合して複合系の全スピン I となる。

$$s_1 + s_2 = S, \quad l + S = I \quad (1.2)$$

ここで、中間状態のスピン S をチャネルスピン (ISTAB) と呼ぶ事がある。このチャネル

スピンはスピン依存力が働かなかったり、弱かったりすると良い量子数になる。

一方、j-j 結合では粒子 1 のスピン s_1 (IS(1)) は軌道角運動量 (LSTAB) と先ず結合し j (ISTAB) を作る。その後で、j と粒子 2 のスピン (IS(2)) が結合して、複合系の全スピン I (JSTAB) をつくる。

$$l + s_1 = j, \quad j + s_2 = I \quad (1.3)$$

論理的には、1 と何故粒子” 1 ” のスピンが先に結合するのか説明出来ない！ 粒子 1 と粒子 2 の質量が大きく異っていて、粒子 1 が軽いせいだとしておこう。軽かったら何故とは問わない事にしよう。

複合系の量子数はこれで良いとして、この考え方だけでは 1-2 系波動関数を数値的に記述できない。そこで、粒子 1 と粒子 2 との相互作用はポテンシャルで記述出来ると仮定して、このポテンシャルパラメータ (VPS) を与える。このポテンシャルは、中心力と スピン・軌道力部分から構成されているとする。中心力部分は、複数の Woods-Saxon 型及びその 1 階微分型を重ね合わせたポテンシャル、スピン・軌道力部分は 修正 Thomas 型を重ね合わせて表現出来ると仮定する。これらのポテンシャルが (V12) という配列に書き込まれている。動径部分波動関数を具体的に書き下す為に、半径方向の点数 (NR12) と刻み幅 (DR12) を指定出来るようにした。

このポテンシャルの信頼性を与える為に、(1-2) 系の現実的なパラメータを再現するのが望ましい。その一つのパラメータとして束縛エネルギーを取り上げる。基底状態のスピン・パリティと節の数という量子数以外に束縛エネルギーも実験値を再現するように、ポテンシャルパラメータを決める事が、例えばポテンシャルの深さを調節すれば可能かもしれない。この為のオプションとして、ISBE がある。

(1-2) 複合系のスピン I 又は I が異なる状態の数を (NLSJ) とする。これらの状態は、原理的には一つのポテンシャルを共有すべきである。そうでなければ、波動関数の直交性条件が破られる。しかし、実用的にはスピンが異なる毎に別のポテンシャルを用いて計算したいかも知れない。この自由度を持たせるために、(NVPS) 個 (最大 5) のポテンシャルを作り、どのスピン状態波動関数はどのポテンシャルで作られるという融通性を持たせた。そのために、スピン状態毎に (IDVS) という変数に何番目のポテンシャルで波動関数を計算するかという情報を書き込んで利用する事とした。(1-2) 系を記述する波動関数を $\hat{\phi}$ 、その動径部分を \hat{u} と書く。 \hat{u} の計算を制御するのが WFCAL 副プログラムであり、束縛状態は WSBND、散乱状態は WSSCT という下請け副プログラムで計算される。散乱状態に共鳴が存在すると言う情報を入力すると、共鳴パラメータを WSRES 副プログラムで計算する。

さて、次に粒子 1 や粒子 2 と粒子 3 との相互作用を考えよう。CDCC ではこの相互作用として、(1+2) 複合入射粒子の運動エネルギーを 1、2 粒子の質量に応じて比例配分し

た運動エネルギーを持つ粒子 1 及び粒子 2 を別個に考え、これらの個別粒子と粒子 3 の光学ポテンシャル V_{13} , V_{23} を、この相互作用ポテンシャルとして流用する。内部構造が無いと仮定した粒子間に虚数部を含むポテンシャルを採用する事は論理矛盾であるが、この複素ポテンシャルを採用する事で、内部構造を無視した近似に伴う誤差を幾らかでも減らそうとしている。

さて、角運動量やパリティが保存する系では、これらの物理量を考慮して散乱過程でのエネルギー・運動量・角運動量・パリティ等のパラメータのやりとりを記述しなければならない。そこで、散乱を記述する自然な座標変数を用いて、相互作用を多重極展開する。光学ポテンシャルを記述する自然な座標変数は $\mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3$ と $\mathbf{r}_{23} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3$ であり、散乱を記述する座標として自然なのは $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ や $\mathbf{R} = (m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2) / (m_1 + m_2) - \mathbf{r}_3$ だから、両座標変数間の座標変換が必要である。

$$V_{13}(r_{13}) = \sum_{\lambda} \{4\pi / (2\lambda + 1)\} v_{\lambda}^{13}(r, R) (Y_{\lambda}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot Y_{\lambda}(\hat{\mathbf{R}})) \quad (1.4)$$

という形の多重極展開をする。 $Y_{\lambda}(\hat{\mathbf{r}})$ が粒子 1 と 2 間の軌道角運動量変化を誘起し、 $Y_{\lambda}(\hat{\mathbf{R}})$ がこの状態変化に呼応しての (1+2) 系重心と粒子 3 との運動状態の変化を引き起こす。この λ の範囲を決めるのが (LAMMIN, LAMMAX) という変数であり、 R , r を与えて、この多重極展開を行うのが VNEXP, VCEXP という二つの副プログラムである。従って、hctak による数値計算の前半の山場は、この多重極展開である。クーロン力の多重極展開は、付録にあるような手法で解析的に行っているが、光学ポテンシャルの多重極展開は数値積分を丁寧に行っているので、時間を要する。

多重極展開された相互作用が原因で (1-2) 間の状態変化の原因を定量的に書き下したものの、即ち 3 個の物理量の積 $\hat{u}_c(r) v_{\lambda}(r, R) \hat{u}_{c'}(r)$ を r で積分したものが、結合行列要素 (FFTAB) である。これは、全ての (1-2) 間状態の組合せに対して計算せねばならない。しかも R , λ にも依存する複素数である。効率的に記憶領域に詰め込む為の工夫が必要である。

この詰め込み部分を少し記録しておこう。要点は 1 次元配列にし、ポインターを用いて記録位置を残しておく事に尽きる。(NLSJ) 個のスピン状態の中には、(NBND) 個の束縛状態と (NKSBN) 個の散乱状態が含まれ、全体の状態数 (波動関数の個数) は (N12) 個となる。従って、全ての状態の組合せの数は (N12*(N12+1)/2) 個であり、この夫々の組合せに対して λ の自由度がある。 λ の自由度は組み合わせた二つの状態が有する軌道角運動量 (LSTAB) の組み合わせとパリティ保存則から制限をうける。後は、複素数である事と R の数で済む。重イオン散乱では R の数は半端ではないから、この部分を 3 次のスプライン関数を用いて、節約対象とする。スプラインというのはもともとは雲型定規の事である。ここでは節点と呼ばれる複数の代表点での関数値や二階微分係数を用いて区分的多項式を作り、この区分的多項式で、関数値を内挿する手法である。3 次のスプラインは、3 次多項式を区分的多項式として採用している。従って、左右の節点での関数値と 2 階微分を用いると、3 次式が確定する。2 階微分は数値微分法により、関数値が必要に

なる直前に計算し (FCC) に書き込まれる。このための仕掛けが、入力の 6 行目にしている。R の全体を先ず (NRF) 個の区間に分割し、それぞれの区間を幅が (DRF) の長さの区間に細分している。この細分された区間の端点が節点に対応し、利用者があたえなければならない。利用者としては、KNLT(6) を用いて行列要素を出力してグラフに描いて、細分化の効果を調べるのが良いだろう。スプライン計算の補助パラメータとして、節点位置は (RFTAB) に、この節点数と間隔のみに依存する補助的パラメータは (W3SP) に書き込まれる。

R の最小・最大値での微分係数の推定に、簡単 3 次式を用いているので、R の最小値及び最大値に対応する両端の 4 点は、等間隔に位置しなければならない。即ち、 $RFTAB(3)-RFTAB(2)=RFTAB(2)-RFTAB(1)=RFTAB(1)-RFTAB(0)$ 等。

ここまですと、hctak の前半は (HCTK10) で必要なデータを読み込み、(HCTK20) で (1-2) 系が関係する結合行列要素、PTP の (2.22c) 式、を計算し (FFTAB) に書き込んでいる。(2.22c) 式に登場する各種の量子数を記録するのに、補助的な配列 (LAMNX) やポインター (IPFF) が利用される。

計算の後半は (HCTK40) が全体を仕切り、PTP (2.18) 式を利用して S 行列 (SMAT) を計算する。

後半の作業の流れは、以下の様に分けられる。

- (1) 部分波展開に共通の準備作業があり、その後可能な全系の角運動量 $((JT_2)/2)$ とパリティ (JPAR) に対して以下の作業を行う。
- (2) $(JT_2, JPAR)$ を指定した結合行列要素 PTP (2.17) 式の計算
- (3) 2 階連立微分方程式 PTP (2.16) の独立解の数値計算
- (4) S 行列の計算と出力

以下にこれらの作業を概観する

(1) 準備作業

(1-2) 系の状態分類と、連立微分方程式を解く時の状態分類は幾らか異なる。(N12) 個の状態は夫々自分のスピン (JSTAB) を持っていて、このスピン状態の $(1+2)$ 系重心が粒子 3 の重心に対して軌道角運動量 (LCC) を持って動いているとする。(LCC) の取り得る範囲は $| (JSTAB) - (JT_2) | / 2$ から $\{ (JSTAB) + (JT_2) \} / 2$ である。従って、HCTK20 で扱う一つの状態は、HCTK40 では $2 \times (JSTAB) + 1$ 個の状態に分裂する。その結果、(N12) 個の状態を前半では取り扱っていたが、後半ではこれが (NCC) 個に膨れ上がる。これらの状態は、HCTK20 からは quantum numbers of system 1-2、HCTK40 からは coupled channels base という見出しの下に整理して出力される。

(NCC) 個の状態の内、パリティが異なるものが約半分ずつあるから、パリティ (JPAR) を与えて連立微分方程式を解く時の次元数 (KCC) は (NCC) の約半分である。(KCC) の取り得る最大値や (NCC) を決定しておかないと、計算に必要な配列を allocate 出来な

い。

数え上げた全ての状態が取るパラメータを確定する作業が必要である。(FKCM) は重心運動の波数、(L3CM) は軌道角運動量の 2 倍から (JT2) を差し引いた値、(IDCWF) はクーロン波動関数配列へのポインター、(IDSWF) は (1-2) 系波動関数へのポインターである。

連立微分方程式を構成するには、光学ポテンシャルの行列要素 PTP(2.17) を計算する必要がある。この行列要素は、幾何学的部分 PTP(2.22b) と物理的部分 PTP(2.22c) の積を λ で和をとればよい。物理的部分は前半で計算し、後半では幾何学的部分の計算と、積和の計算に集約できる。幾何学的部分は、(1-2) 系の量子数のみに依存する部分と、(1+2) 系の重心運動が関係する部分の積に分解出来る。(1-2) 系のスピンの関係する部分は、連立方程式を解く前に計算して、(ZCS) に書き込んでおく。この場合、(N12) 個の組み合わせではなく (NLSJ) 個の組合せだからかなり必要資源を減らす事ができる。(ZCS) へのポインターは (LAMNX(3,?)) である。ここで、'?' は NLSJ 個の組合せに対応する識別番号である。

クーロン波動関数は、クーロンパラメータと PTP(2.18) 式を適用する接続半径 (RM) を与えて、取り得る全ての軌道角運動量に対して一気に計算し、配列 (CWFTAB) に書き込む。クーロン波動関数へのポインターは (IDCWF) である。

(2) HCTK40 では、個別の全角運動量 (JT2) とパリティ (JPAR) に対して結合チャネル数 (KCC) を計算した後、個別のチャネルと全チャネルの関係を付けるポインター (IDCC) と本当の軌道角運動量 (LCC) を確定し、具体的な結合行列要素の表を計算するために (HCTK44) を呼ぶ。

(HCTK44) では、(1+2) 重心運動に拘る幾何学的因子を計算し、(ZC) に書き込む。その後、物理的部分 (FFTAB) と幾何学的部分の積を作り、 λ で足し込む、最終的な結合行列表を (FCC) に書き込む。更に、先に説明したように、3 次のスプライン計算に使用する行列要素の 2 階微分を計算し、これも (FCC) に書き込む。

この段階では未だ個別の動径位置での行列要素は準備されていない。

(FFTAB) では動径位置に対応するのは第 1 添字であったが、(FCC) では最後の第 3 添字に変更した。これは、微分方程式を解く時には、同一の半径における行列要素の値を使用するからである。ページングの回数を減らしたり、ヒットミスの確率を減らす効果がある。ある種の計算では、これにより CPU 時間を 3 割程度減らす効果があった。

3) 具体的に連立微分方程式を解くのは (HCTK46) の仕事である。大きな軌道角運動量の場合には、原点付近での波動関数の絶対値は極端に増加し、ある場合には計算機の数

値表現の範囲を逸脱してしまう。このトラブルを回避するために、積分は原点から開始しない。 $j_l(x)$ を球ベッセル関数とした時、 $x \times j_l(x)$ の最初のピーク位置を x_p 、そこでの関数値を $x_p j_l(x_p)$ とする。 $x_s j_l(x_s) = 10^{-8} \times x_p j_l(x_p)$ となる x_s に対応する半径から積分を開始する。この積分開始位置は (NS0) × (DR3) として (XSCAL) で概算される。

波動関数の2階微分は、解ベクトルを u とし、結合行列を V とすると Vu という形で微分方程式に登場する。(KCC) 次元の微分方程式の、原点での境界条件を満足する (KCC) 個の線形独立な解ベクトルを全て計算せねばならない。そこで、 V の行ベクトル v を計算し、このベクトルと全ての解ベクトル u_i , ($i = 1, 2, \dots, KCC$) の内積を (VUCAL) 副プログラムで評価する。従って、行列 V の全体がメモリー上に書き下される事はない。この部分は、プログラム全体で見ても最も計算量が多い部分であるので、高速化に努める必要がある。

個別のチャンネルの波数が大きく異なる時には、上で述べた初期値対策を施したとしても、波動関数の値は極端に変動する。その結果、独立な初期値を与えているにも拘らず、解の独立性が大きく損なわれる場合が経験された。この対策として、微分方程式をある半径まで解いたところで、全ての解の直交化を (UGSOC) 副プログラムで行う。

最終的に S 行列要素の計算に必要なのは、接続点 (RM) での波動関数とその微分である。従って、散乱状態波動関数を別途必要としないならば、小さな半径での独立解の値は、計算するそばから捨てても良い。こうするとかなりの記憶域の節約が出来る。過去の Vu に対応するデータは記憶域上で動かすのではなく、ポインターを動かせば良い。この為に、(HCTK46) では8個のリングポインターを使用している。過去の8点での情報を次ぎの点での関数値を計算するのに使用している為に8個の情報を使用している。接続点での関数値と微分は、複素配列 ($U(a,b,1)$ と ($U(a,b,2)$)) に書き込んで、戻ってくる。ここで、 a は解ベクトルの成分、 b は異なる初期値に対応する。

4) S 行列は (HCTK48) 副プログラムで計算する。ここでの計算手法は、付録で簡単に述べた。解くべき連立1次方程式は本来は $\{2 \times (KCC)\} \times \{2 \times (KCC)\}$ の大きさを持っているが、これを $(KCC) \times (KCC)$ の大きさにまで小さくしてから解いているのが特徴である。この様に小さくすると、解くべき方程式の行列は ($U(*,*,2)$) に書き込めるから新規に行列用の記憶域を必要としない。副プログラム (CLULEQ) を用いて LU 分解を行うが、この時、解くべき問題の条件数 (CNUM) を推定している。この条件数を見ると無理な計算をしているか、そうでないかが一目でわかる。

実験条件を満足するには、入射チャンネルは基底状態でなければいけない。基底状態に対応するチャンネルの数 (NSS) 分だけの S 行列を計算すればそれ以上の計算は資源の浪費である。

因みに (HCTK48) で (SMAT) と呼んでいる行列には (KCC) 個の成分に対応する S 行列が書かれている。 S 行列に物理的に矛盾が無いか確認するために、入射フラックスよりも出て行くフラックスが大きくなっていないかを調べている。出力される $\text{sum}(|S|^{**2})$ が

負になったり、1 よりも大きくなっているとどこかにミスがある事になる。

この後で、(1-2) 系の波数幅の平方根で割っている。実際は (DK12) を掛けている。

この処理がされた S 行列をファイルに出力すると、HCTK48 の仕事はお仕舞い。

1 階微分を含まない 2 階微分方程式の解法

数値計算の常識を与える為に、与えられたポテンシャルの下での束縛状態や散乱状態を解く手法等を解説する。解くべき微分方程式を以下の様に書く。

$$\frac{d^2}{dr^2} u(r) = V(r) u(r) \quad (1.5)$$

幾らか準備を行なう。微分演算子 D と中間差分演算子 δ を以下の様に定義する。

$$D \equiv \frac{d}{dr} f(r), \quad \delta f(r) \equiv f(r + h/2) - f(r - h/2) \quad (1.6)$$

ここで、 h は小さな数であり、 $f(r)$ は任意回微分可能とする。Taylor 展開を用いて、 D と δ に関係をつける。

$$f(r \pm h/2) = f(r) \pm h/2 f'(r) + \cdots = \sum_n (\pm h/2)^n / n! f^{(n)}(r) = \exp(\pm h D/2) f(r) \quad (1.7)$$

即ち、

$$\delta = 2 \sinh(h D/2) = 2 \left\{ \frac{h D}{2} + \frac{1}{3!} \left(\frac{h D}{2} \right)^3 + \cdots \right\} \quad (1.8)$$

これが、中心差分を微分で与える公式である。逆に解くと、

$$h D = 2 \left\{ \frac{\delta}{2} - \frac{\delta^3}{48} + \cdots \right\} = \delta - \frac{\delta^3}{24} + \cdots \quad (1.9)$$

これで、微分を中心差分で表現できた。この式を 2 乗すると、

$$(h D)^2 = \delta^2 - \frac{\delta^4}{12} + \cdots \quad (1.10)$$

両辺に $(1 + \delta^2/12)$ を掛けて、 $O(\delta^4)$ を消しておくと、

$$h^2 \{1 + \delta^2/12\} D^2 = \delta^2 + O(\delta^6) \quad (1.11)$$

準備が出来たので、両辺に u を掛けて微分方程式を代入すると、

$$\begin{aligned} h^2 V(r) u(r) + \frac{h^2}{12} \{V(r+h) u(r+h) - 2V(r) u(r) + V(r-h) u(r-h)\} \\ = u(r+h) - 2u(r) + u(r-h) + O(h^6) \end{aligned}$$

$O(h^6)$ を無視して整頓すると、

$$u(r+h) = \frac{12u(r) - 10 \left\{ 1 - \frac{h^2}{12}U(r) \right\} u(r) - \left\{ 1 - \frac{h^2}{12}V(r-h) \right\} u(r-h)}{1 - \frac{h^2}{12}V(r+h)} \quad (1.12)$$

これが積分公式である。右辺の分母第2項の絶対値が1よりも十分小さくなくてはならない。この積分こうしきは、 $r-h$ と r での関数値を用いて、 $r+h$ での値を評価するのに用いても良いし、逆に $u(r+h)$, $u(r)$ を用いて $u(r-h)$ の推定に利用してもよい。実用上は、 u の絶対値が増加する向きに使用しないと、巨大な誤差が発生する場合がある。この近似式は $O(h^2)$ までしか計算していないが、 $O(h^4)$ の項は登場しないように作ったから、誤差は $O(h^6)$ であり、非常に計算効率が高い。(1-2)系の波動関数を計算するのに使用していた。現在は、もっと高精度の積分公式を使用している。HCTK46で、解ベクトルの修正子として一回だけ使用している。

散乱状態波動関数はポテンシャルを与えて原点から順番にポテンシャルが無視出来る点まで計算をすれば良い。解くべき方程式は線形だから、絶対値は気にしなくても良い。後で境界条件を満足する様に規格化する。

この導き方から分かるように、この手法は1階微分を伴わない2階微分方程式に適用出来るが、分母にポテンシャルを含むので連立微分方程式には向かない。

1階微分を含まない連立2階微分方程式の解法の参考書として、P. Henrici 著の Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations, John Wiley and Sons がある。

波動関数の微分

上記の様な方法で、動径部分波動関数を r の小さい方から接続点まで計算してきたとする。接続点での波動関数の微分は、次式で評価している。

$$f'(x) = f(x+3h) - f(x-3h) - 9 \{ f(x+2h) - f(x-2h) \} + 45 \{ f(x+h) - f(x-h) \} / 60h \quad (1.13)$$

この式は、 $f(x)$ を x を中心として6次式で展開し、 x の左右各3点での関数値を利用して微分を評価している。

束縛状態の波動関数計算

束縛状態は固有値を決めないと解けない。固有値を仮定し解いてみて、違っていたら仮定した固有値を修正するという方法をとる。ポテンシャルを与えた時の正解を $u(r)$ 、その時の未知の束縛エネルギーを $W (> 0)$ とする。仮の束縛エネルギーが λW の時、原点から古典的転回点 (一番外側の波動関数の変曲点) r_t までを解き、その解を $v_I(r)$ 、核力ポテンシャルが無視出来る大きな半径から内向きに古典的転回点まで解いた解を $v_O(r)$ と書く。但し $v_I(r_t) = v_O(r_t)$ と規格化しておく。正解ではないから微分は不連続 ($v'_I(r_t) \neq v'_O(r_t)$)

である。 $u(r)$, $v(r)$ が満足する方程式は以下の様になっている。

$$D^2 u(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \{V(r) + W\} u(r) \quad (1.14)$$

$$D^2 v(r) = \frac{\hbar^2}{2\mu} \{V(r) + \lambda W\} v(r) \quad (1.15)$$

上(下)の式に $v(u)$ を掛けて引き算し、区間 $(0, \infty)$ で積分する。波動関数は積分の両端で0であり、 v のみが r_t で微分が不連続であるから、

$$\lambda = 1 - \frac{\hbar^2}{2\mu W} \frac{u(v'_O - v'_I)|_{r_t}}{\int_0^\infty u(r)v(r) dr} \quad (1.16)$$

$u(r)$ を積分区間により v_I 又は v_O で近似すると右辺は計算可能であり、これが束縛エネルギーの修正公式である。この修正手法はかなり早く収束する。(WSBND)はこの修正量を FI として出力している。

但し、 $v_I(r)$ は与えられた節の数を再現していなければならない。節が足りなければ、束縛エネルギーの推定値が大きすぎたせいである。ある場合には、与えられたポテンシャルでは設定された節の数を再現出来ない場合もある。これは問題の設定がおかしい場合である。

束縛エネルギーを与えてポテンシャルの深さを計算するしたいならば、上の導き方でポテンシャルを $U(r) \rightarrow \lambda U(r)$ と書いた式を $v(r)$ の方程式に使用すれば同様の手法が適用できる。

即ち、

$$\lambda = 1 - \frac{\hbar^2}{2\mu \int_0^\infty V(r)u(r)v(r) dr} \frac{u(v'_O - v'_I)|_{r_t}}{\int_0^\infty V(r)u(r)v(r) dr} \quad (1.17)$$

を修正公式とする。

散乱状態における共鳴状態

エネルギー固有値が正の状態が散乱状態であり、連続的なエネルギー固有値をとる。散乱状態波動関数 u の漸近形は、通常のクーロン波動関数 F , G を用いて $u \rightarrow \cos \delta F + \sin \delta G$ で与えられるとする。ここで δ は位相のずれであり、エネルギーや軌道角運動量に依存する。

実ポテンシャルならば、時として $\cos \delta$ が0になるエネルギー固有値が存在し、この場合を共鳴状態と呼ぶ事にする。与えられたポテンシャルに対して、 (l, j) を与えた時に、与えられた波数範囲で共鳴が存在するか？ 存在するならばその数と共鳴エネルギー(波数)や共鳴幅を決定したい。その手法を説明する。簡単の為に、 $c \equiv \cos \delta$, $s \equiv \sin \delta$ と略

記する。

0 c, s の決定手法

散乱状態波動関数の数値計算解をクーロン波動関数と接続する点 (遠心力とクーロンの和が核力を圧倒すると仮定出来る半径) を r_m とし、この点での数値計算された波動関数とその r 微分を v, v' 、対応するクーロン波動関数とその r 微分を F, F', G, G' と書く。接続方程式は以下の通り。

$$u \equiv N v = c F + s G, \quad u' \equiv N v' = c F' + s G' \quad (1.18)$$

ここで、 N は規格化因子である。この式から、 c, s は以下の様に決定できる。

$$c = X (v' G - v G'), \quad s = X (v F' - v' F) \quad (1.19)$$

比例定数 X は、 $c^2 + s^2 = 1$ より絶対値が決定できる。符号は、核力が無視出来る様な場合には $v \rightarrow F, c \rightarrow 1$ を満足する事及び、クーロン波動関数の Wronskian 条件を考慮して $X > 0$ とする。従って、位相のずれは以下の様に決定される。

$$\delta = \tan^{-1} \left(\frac{v F' - v' F}{v' G - v G'} \right) = \tan^{-1} \left(\frac{u F' - u' F}{u' G - u G'} \right) \quad (1.20)$$

この式は、 2π の不定性を許し、これに対処するには広いエネルギー範囲での位相のずれを計算し、束縛状態の数と位相のずれの関係に関する Levinson の定理を使用しなければならない。

比例係数 X が確定すると、規格化定数は $N = k X$ により計算出来る。 v の微分を $k r$ で行うと、 $N = X$ と簡単になる。

X の符号に関する議論は、数値計算の波動関数は点電荷を仮定していないので正確さに欠ける。

クーロン波動関数は平面波とは異なるから、平面波を用いた議論をする時には、 $e^{i\sigma_l}$ というクーロン波の位相のずれを (本当は離散化の時に) 掛けなければならない。hetak では、 \hat{u} を実数とするために、この作業を無視している。重陽子の 3S_1 状態で、過去に確かめた例では位相のずれに起因する因子を掛けても掛けなくても結果はあまり変わらなかった。

1 共鳴の存在数の推定

与えられた波数範囲を複数の波数点に分割し、上記 c の符号変化が起こる点の数を数える。ところで、 $d^2 u / dr^2 = (U - k^2) u$ を解くべき方程式とする。ポテンシャルポケットの一番外側で、 $dU/dr = 0$ を満足する時のポテンシャルの壁の高さをテストする最大のエネルギーだと仮定しよう。このエネルギーよりも大きな運動エネルギーでは、古典的なイメージではポケットの中に置いた粒子はすぐにポテンシャル

ポケットの外にこぼれ落ちる。この壁の高さが、共鳴点を調べる最大エネルギーを与えるはずだ。

2 共鳴エネルギーの決定

c が符号を変える波数範囲が与えられたと仮定する。この条件で $c(k) = 0$ を満足する波数 k を探せばよい。2 分法だけでも、簡単に収束する様だ。最終的には、修正 Regular-falsi を使用した。

3 幅の決定

上で決定した $c(k) = 0$ に対応する k を中心とし、この値の近くで $\cos(k \pm \Delta_{\pm}) = \pm 1/\sqrt{2}$ となる絶対値が最小の Δ_{pm} を探し、 $\Delta \equiv (\Delta_+ + \Delta_-)/2$ を共鳴幅と定義する。

結合行列要素の幾何学的因子

ここでは、CDCC の中心力に対する幾何学的因子を計算する手法を記録する。

PTP pp43 (2.22b) 式を信用すると、

$$Z(CE; c, c'; \lambda, J) = i^{L-L'+\ell-\ell'} (-1)^{J-S+\lambda} \hat{L} \hat{L}' \hat{I} \hat{I}' \hat{\ell} \hat{\ell}' / \lambda^2 \delta_{SS'} \\ (L 0 L' 0 | \lambda 0) (\ell 0 \ell' 0 | \lambda 0) W(L L' I I'; \lambda J) W(\ell \ell' I I'; \lambda S)$$

この式を二つの部分に分割する為に、次式を定義する。

$$R(\ell \ell' I I'; \lambda S) \equiv i^{\ell-\ell'+\lambda} \hat{\ell} \hat{\ell}' \begin{pmatrix} \ell & \ell' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \ell & \ell' & \lambda \\ I' & I & S \end{Bmatrix} \quad (1.21)$$

$$Z(CE; c, c'; \lambda, J) = (-1)^{J-S} \hat{I} \hat{I}' \delta_{SS'} R(L L' I I'; \lambda J) R(\ell \ell' I I'; \lambda S) \quad (1.22)$$

実際の計算では、 λ の最小値と最大値は事前に分かっているから、最小の λ から初めて、最大値迄の表を作れば良い。先ず $\hat{I} \hat{I}' R(\ell \ell' I I'; \lambda S)$ の部分を計算し、連立微分方程式を計算する時に行列要素の残りの部分、 $(-1)^{J-S} R(L L' I I'; \lambda J)$ を掛ければ良い。

この式を確認しておこう。 Ψ_{JM} を展開する基底を次式とする。

$$\Psi_{JM}^c = [[i^l Y_l(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \phi_S]_I \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}})]_{JM} \frac{u_{lI}^c(r)}{r} \frac{\chi_L^{Jc}(R)}{R} \quad (1.23)$$

一方、相互作用ポテンシャルを多重極展開する。但し、簡単の為に $r_{i3} = r_i$ 等と書いた。

$$V_i(r_i) = \sum_{\lambda} v_i^{\lambda}(r, R) P_{\lambda}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{R}}) = \sum_{\lambda} v_i^{\lambda}(r, R) \frac{4\pi}{2\lambda+1} (Y_{\lambda}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot Y_{\lambda}(\hat{\mathbf{R}})) \quad (1.24)$$

$V_i(r_i) \Psi_{JM}$ に左からスピン・角度波動関数を掛け、特定の λ の項のみを取り出す。

$$\frac{4\pi}{2\lambda+1} \left\langle [[i^{l_f} Y_{l_f} \otimes \phi_S]_{I_f} \otimes i^{L_f} Y_{L_f}]_{JM} | (Y_\lambda(\hat{\mathbf{r}}) \cdot Y_\lambda(\hat{\mathbf{R}})) | [[i^{l_i} Y_{l_i} \otimes \phi_S]_{I_i} \otimes i^{L_i} Y_{L_i}]_{JM} \right\rangle \quad (1.25)$$

$$= (-)^{J-S} \hat{I}_i \hat{I}_f R(L_f, I_f, L_i, I_i; J, \lambda) R(l_f, I_f, l_i, I_i; S, \lambda) \quad (1.26)$$

ここで、

$$R(L_f, I_f, L_i, I_i; J, \lambda) = i^{L_i-L_f+\lambda} \hat{L}_f \hat{L}_i \begin{pmatrix} L_f & L_i & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L_f & I_f & J \\ I_i & L_i & \lambda \end{Bmatrix} \quad (1.27)$$

式 (1.22) では、角運動両の結合順序を以下の様になっているが、

$$\mathbf{l} + \mathbf{S} = \mathbf{I}, \quad \mathbf{I} + \mathbf{L} = \mathbf{J} \quad (1.28)$$

この結合順序を以下の様に変えても結果は同じになる。

$$\mathbf{S} + \mathbf{l} = \mathbf{I}, \quad \mathbf{L} + \mathbf{I} = \mathbf{J} \quad (1.29)$$

クーロン波動関数の計算

点電荷による荷電粒子の弾性散乱を記述する シューレーディンガー方程式の解は Kummer の合流型超幾何関数で記述出来るとする。この観点から、3 項漸化式を作る。2 階微分方程式の二つの独立解は 4 個のパラメータで確定する。軌道角運動量 l が 0 の場合にはこれを F_0, G_0, F'_0, G'_0 とする。 F_0 は原点 $\rho = 0$ で正則であり、 G_0 は原点で発散する。

- 1 l に関する漸化式を利用すると、 F'_0/F_0 を決定できる。 $l \gg 0$ ならば、遠心力に依り F_l の値は小さくなる事を利用している。
- 2 クーロンパラメータ η に対する漸化式を利用し、 $(G'_0 + i F'_0)/(G_0 + i F_0)$ を評価出来る。但し、 ρ が小さいと、 $|G_l/F_l| \gg 0$ となるから、この比の虚部が非常に小さくなり、 G_0 の精度は確保出来るが F_0 の精度は欠落する。この場合には、 F_0 は級数展開を利用する。この段階でパラメータを決める関係式が 3 個つくられた。
- 3 上の二つの手法では比の値しか計算出来ないの、絶対値を決定する関係式が必要であり、それには Wronskian = 1 を利用する。
- 4 Wronskian は 2 次形式で与えられるから、符号は未定である。原点付近では $F_l > 0$ を利用する。
- 5 $l > 0$ に対しては、 F_0, G_0, F'_0, G'_0 の知識と l に対する漸化式を利用する。

漸化式を用いて、比を計算するのに連分数の形に変形し、Steed の方法を利用している。一般的な参考資料として、M.Abramowitz and I.A. Stegun 著、Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. Dover Pub. Co., を挙げておこう。hctak で利用しているクーロン波動関数のアルゴリズムは、以下の論文を参照した。A.R. Barnet , Couputer Physics Communications 21(1981)297

3 j 係数の計算法

hctak に登場する 3i 係数は、全ての磁気量子数が 0 であるから、あらわな式がある。

$$\begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & \ell_1 - \ell_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{\ell_1} \sqrt{\frac{Q}{2\ell_1 + 1}} \quad (1.30)$$

ここで、

$$Q = \prod_{n=1}^{\ell_1 - \ell_2} \frac{(\ell_2 + n)(n - 1/2)}{(\ell_2 + n - 1/2)n} \quad (1.31)$$

但し、 $\ell_1 \geq \ell_2$ を仮定した。そうする方が計算が早い。この式は、非常に大きな ℓ_2 に対しても安定している。最小値 $\lambda = \ell_1 - \ell_2$ に対する 3j の値が与えられると、次の漸化式で λ を増やしていく。

$$w(j) \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & j - 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + w(j + 1) \begin{pmatrix} \ell_1 & \ell_2 & j + 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (1.32)$$

ここで、

$$w(j) = \sqrt{(j - \ell_1 + \ell_2)(j + \ell_1 - \ell_2)(\ell_1 + \ell_2 + 1 + j)(\ell_1 + \ell_2 + 1 - j)} \quad (1.33)$$

この式は比だけで決まるから、安全な漸化式である。

6j 係数の計算

$$\begin{Bmatrix} \ell & \ell' & \lambda \\ I' & I & S \end{Bmatrix} \quad (1.34)$$

を計算したい。但し、 λ は角運動量の一般的な規則で決定される全ての値をとる。

ここでは、 λ の値を増やす次の漸化式を利用する。

$$\begin{aligned} & a E(a + 1) \begin{Bmatrix} a + 1 & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix} + (a + 1) E(a) \begin{Bmatrix} a - 1 & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix} \\ & + F(a) \begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix} = 0 \end{aligned}$$

ここで、

$$E(a) = \sqrt{\{a^2 - (b - c)^2\}\{(b + c + 1)^2 - a^2\}\{a^2 - (e - f)^2\}\{(e + f + 1)^2 - a^2\}} \quad (1.35)$$

$$F(a) = (2a + 1)\{P(a)[-P(a) + P(b) + P(c)] + P(e)[P(a) + P(b) - P(c)] \\ + P(f)[P(a) - P(b) + P(c)] - 2P(a)P(d)\}$$

次の略号を利用した。

$$P(a) \equiv a(a + 1) \quad (1.36)$$

もしも $a = 0$ ならばこの漸化式を $a = 0$ から増やす方向に使用できない。この時には、 $6j(a = 1) = -\{P(b) + P(e) - P(d)\} \times 6j(a = 0) / \{2\sqrt{P(b)P(e)}\}$ である。

以下の符号規則を用い、 $6j(a_{max} + 1) = 0$, $6j(a_{max}) = (\text{符号}) \times (\text{定数})$ として、漸化式を立ち上げる。ここで、 a_{max} は $6j$ 係数の値が自明には 0 でない最大の a の値とする。

$$\text{sgn} \left(\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix} \right) = (-1)^{b+c+e+f} \quad (1.37)$$

$6j$ 係数の規格化の式

$$\sum_a (2a + 1)(2d + 1) \left\{ \begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix} \right\}^2 = 1. \quad (1.38)$$

を用いて (定数) を決定する。

数値計算上、次の点に注意をすべきである。 $a^2 - b^2 = (a + b)(a - b)$ と変形して、 $(a - b)$ の部分は整数計算とすると、精度確保ができる。2 乗の差を直接計算すると、精度落ちが発生する。更に、大きな整数が登場する前に、実数に変換しておかないと、サインビットが化けてしまう事がある。大きな引数の場合には、 a の両極端での値から、漸化式を利用して中央の a の値へ進め、両者が衝突したところの 2 点の計算値を用いて繋ぐ。偶然の結果として $6j$ 係数の値が 0 となると困るから、1 点で繋いではいけない。

ここで利用した漸化式は、次ぎの Elliott-Biedenharn の恒等式で 三角条件を満足するために $j_7 = j_2$, $j_8 = j_1$, $j_9 = 1$ とし、引数に 1 を含む $6j$ 係数には具体的な表現を用いると簡単に導ける。

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} \right\} \left\{ \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_7 & j_8 & j_9 \end{Bmatrix} \right\} \\ &= \sum_J (-)^{J + \{\sum_{i=1}^9 j_i\}} (2J + 1) \left\{ \begin{Bmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ J & j_9 & j_8 \end{Bmatrix} \right\} \left\{ \begin{Bmatrix} j_4 & j_2 & j_6 \\ j_9 & J & j_7 \end{Bmatrix} \right\} \left\{ \begin{Bmatrix} j_4 & j_5 & j_3 \\ j_8 & j_7 & J \end{Bmatrix} \right\} \end{aligned}$$

上の設定では右辺の和は $J = j_6, j_6 \pm 1$ の 3 項からなる。

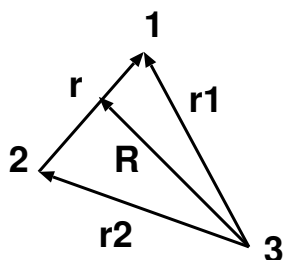
3j 係数にもここで述べた様な、3 項漸化式がある。例えば、M.E. Rose 著、山内・森田 訳 角運動量の基礎理論、みすず書房 (3.27), (I.8). これらを使用すると、大きな角運動量に対しても 3j 係数の値を評価出来る。この手法は `hetak` が出力する S 行列を用いて弾性散乱微分断面積を計算するプログラム `elx.f` で使用する。

ポテンシャルの多重極展開

ポテンシャル $V_{i3}(r_{i3})$ の多重極展開を VNEXP, VCEXP で行っている。ここで、VNEXP (VCEXP) は核力 (クーロン力) の処理を行う。この作業の詳細を説明する。以後、suffix の 3 を書かない。

座標の定義

入射粒子は粒子 1 と粒子 2 の束縛状態であり、標的核を粒子 3 とする。
図の様に座標を定義すると、以下の関係が成立する。



$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (1.39)$$

逆に解くと、

$$\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r}, \quad \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r} \quad (1.40)$$

この変換のヤコビアンは

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_1} & \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_1} \\ \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_2} & \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_2} \end{vmatrix} = 1 \quad (1.41)$$

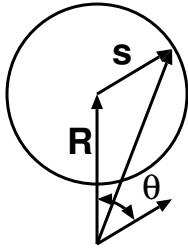
ポテンシャルの多重極展開は、

$$V_i(r_i) = \sum_{\lambda} v_{\lambda}^i(r, R) P_{\lambda}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{R}}), \quad (i=1 \text{ or } 2) \quad (1.42)$$

ここで、 $\mathbf{r}_i = \mathbf{R} + \alpha_i \mathbf{r}$ と書くと、 $\alpha_1 = m_2/(m_1 + m_2)$, $\alpha_2 = -m_1/(m_1 + m_2) = \alpha_1 - 1$ と書ける。ここで定義された $v_{\lambda}^i(r, R)$ を具体的に計算するには、逆展開を利用する。即ち、以下の角度積分を実行する。

$$v_{\lambda}^i(r, R) = \frac{2\lambda + 1}{2} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta P_{\lambda}(\cos \theta) V_i(r_i) \quad (1.43)$$

この $v_{\lambda}^i(r, R)$ を評価する作業は、 (r, R, θ) を与えて、ポテンシャルの計算、Legendre 関数の計算及び数値積分という 3 個の基本作業を統合すればよい。



図に描くと、左図のようになる。 $s = \alpha_i r_i$ と書くと、 $r_i = \sqrt{R^2 + s^2 + 2 R s x}$ であり、 $x = \cos \theta = \hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ と書いた。半円上でポテンシャルがどのように変化するかを考えて、数値積分する。その時、Woods-Saxon 型のポテンシャルでは diffuseness を長さの基準にとるのが妥当だろう。 r_i の最大値が核半径よりも充分大きくなると、積分への寄与を無視しても良いだろう。

指数関数的に変化すると考えて、6 桁落ちを最大寄与半径だとしておく。(HCTK20 で判断している) 一方、クーロン力は解析的に積分する。

核力 (光学ポテンシャル) の多重極展開

個別のポテンシャルを区分的な 3 次近似で内挿しながら積分を行う。

区間 $[x_0, x_1]$ での区分的な 3 次式は、両端での関数値 f_0, f_1 及び微係数 g_0, g_1 を与えると、次の 3 次式で表現出来る。

$$f(x) = s f_1 + t f_0 + st\{(s-t)(f_1 - f_0) + h(t g_0 - s g_1)\} \quad (1.44)$$

ここで、次の記号を使用した。

$$h = x_1 - x_0, \quad s \equiv \frac{x - x_0}{h}, \quad t = 1 - s = \frac{x_1 - x}{h} \quad (1.45)$$

ここで h は等間隔に r_i を分割している。従って、関数値と両端での微分の h 倍を 2 次元配列 VD に記録して VNEXP を呼び出す。3 次のスプラインは両端での 2 階微分を用いて表現する事もあるが、こちらの式の方が簡単だと思う。

実際の積分は、積分区間を幾らかの区間に分割し、個別の積分区間では Gauss-Legendre の積分公式を用いる。この積分に使用するパラメータは LGCAL 副プログラムで計算している。

ポテンシャルの強さを荷重とする荷重平均により、半径と diffuseness を定義し、半径付近までは diffuseness の 2 倍幅、それより外では 1 diffuseness ずつ積分区間を広げていく。少し慎重すぎるかも知れない。

このプログラムで使用する数値積分の一般的な知識は、後ろの方にまとめておいた。

クーロン力の多重極展開

粒子 3 が一様に帯電した球であり、粒子 1 と 2 は点電荷だと仮定する。この時、以下の様なクーロンポテンシャルを多重極展開する事になる。

$$V_{i3}^C(r_{i3}) = \begin{cases} \frac{C_i}{r_{i3}} & r_{i3} > R_{C_i} \\ \frac{C_i}{2R_{C_i}} \left\{ 3 - \left(\frac{r_{i3}}{R_{C_i}} \right)^2 \right\} & r_{i3} \leq R_{C_i} \end{cases} \quad (1.46)$$

ここで、 $C_i = z_i z_3 e^2 / 4 \pi \epsilon_0$ はクーロン力の強さである。多重極展開する場合、 r_{i3} と R_C の大きさの比較をしなければならない。

以降は下付き添字 i を省略し $r_{i3} = r_3$ 等と記す。簡単の為に、 $r_3^2 = R^2 + s^2 + 2 R s \cos \theta$ と書き、 R を極軸とする。 r_3 の取り得る範囲は、 $|R - s| \leq r_3 \leq R + s$ であるから、この値と R_C の大小を比較して場合分けをする。簡単な場合から考えよう。

$|R - s| \geq R_C$ の場合

$$V^C(r_3) = \frac{C}{|R + s|} = \sum_{\lambda} \frac{C}{r_{>}} \left(-\frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^{\lambda} P_{\lambda}(\cos \theta) \quad (1.47)$$

であるから、

$$v_{\lambda}^C = (-)^{\lambda} C \frac{r_{<}^{\lambda}}{r_{>}^{\lambda+1}} \quad (1.48)$$

ここで、 $r_{>} = \max(R, s)$, $r_{<} = \min(R, s)$ とおいた。

$R + s \leq R_C$ の場合

$$V^C(r_3) = \frac{C}{2R_C} \left\{ 3 - \frac{R^2 + s^2 + 2RsP_1(\cos \theta)}{R_C^2} \right\} \quad (1.49)$$

であるから、

$$v_0^C = \frac{C}{2R_C} \left\{ 3 - \frac{R^2 + s^2}{R_C^2} \right\}, \quad v_1^C = -\frac{C \cdot R s}{R_C^3} \quad (1.50)$$

λ が 2 以上の場合は $v_{\lambda}^C = 0$ である。

$|R - s| < R_C < R + s$ の場合

$$v_{\lambda}^C = \frac{2\lambda + 1}{2} \int_{-1}^1 V^C(r_3) P_{\lambda}(x) dx \quad (1.51)$$

であるが $x = \cos \theta$ が次の関係を満足する x_c を境として被積分関数を置き換えねばならない。

$$x_c = \cos \theta_c = \frac{R_C^2 - R^2 - s^2}{2 R s} \quad (1.52)$$

$$v_\lambda^C = \frac{2\lambda + 1}{2} \left[\int_{-1}^{x_c} dx \frac{C}{2R_C} \left\{ 3 - \frac{R^2 + s^2 + 2R s x}{R_C^2} \right\} P_\lambda(x) + \int_{x_c}^1 \frac{C P_\lambda(x)}{\sqrt{R^2 + s^2 + 2R s x}} dx \right] \quad (1.53)$$

この積分を実行する為に以下の3個の部分に分ける。

$$v_\lambda^C = \frac{(2\lambda + 1) C}{2} \left\{ \frac{1}{2R_C} \left(3 - \frac{R^2 + s^2}{R_C^2} \right) J_1^\lambda - \frac{R s}{R_C^3} J_2^\lambda + J_3^\lambda \right\}$$

次に、これらの積分の各論をする。

J_1^λ 積分

$$\begin{aligned} J_1^\lambda &= \int_{-1}^{x_c} P_\lambda(x) dx = \int_{-1}^{x_c} \frac{x P'_\lambda(x) - P'_{\lambda-1}(x)}{\lambda} dx \\ &= \frac{1}{\lambda + 1} \{x_c P_\lambda(x_c) - P_{\lambda-1}(x_c)\} = \frac{1}{\lambda} \{P_{\lambda+1}(x_c) - x_c P_\lambda(x_c)\} \end{aligned}$$

最後の式では、積分を実行した時に J_1^λ が右辺にも登場する事を利用している。特に $\lambda = 0$ ならば

$$J_1^0 = x_c + 1 \quad (1.54)$$

J_2^λ 積分

$$x P_\lambda(x) = \{(\lambda + 1) P_{\lambda+1}(x) + \lambda P_{\lambda-1}(x)\} / (2\lambda + 1) \quad (1.55)$$

であるから、上の J_1 積分で表現出来る。

$$J_2^\lambda = \int_{-1}^{x_c} x P_\lambda(x) dx = \frac{1}{2\lambda + 1} \{(\lambda + 1) J_1^{\lambda+1} + \lambda J_1^{\lambda-1}\} \quad (1.56)$$

特に、 $J_2^0 = J_1^1$ である。 J_2^λ 積分は、 J_1^λ と組み合わせた表現に持ち込む事が可能だが、こうしても精度上の長所は生じなかった。

J_3^λ 積分 以下の漸化式を利用する。導き方は下にメモとして残しておく。

$$I^\lambda \equiv (2\lambda + 1) J_3^\lambda = - \left[\frac{R^2 + s^2}{R s} I^{\lambda-1} + I^{\lambda-2} + (2\lambda - 1) \frac{R_C}{R s} J_1^{\lambda-1} \right] \quad (1.57)$$

多重極展開という目的からは積分 J_3^λ よりも $(2\lambda + 1) J_3^\lambda = I^\lambda$ を利用の方がよい。
特に、

$$I^0 = J_3^0 = \frac{R + s - R_C}{R s} \quad (1.58)$$

$$I^1 = 3J_3^1 = J_3^0 \{R_C J_3^0/2 + 1 + 2x_c\} \quad (1.59)$$

J_3^λ 積分の計算メモ

J_3^λ 積分の漸化式：

簡単の為に、 $a = R^2 + s^2$, $b = 2 R s$ と書く。 $\{\sqrt{a + b x} P_\lambda\}$ を微分した式を積分し、次の恒等式をえる。

$$\frac{b}{2} J_3^\lambda + L_\lambda = \sqrt{a + b x} P_\lambda \quad (1.60)$$

但し、次式を定義した。

$$L_\lambda \equiv \int dx \sqrt{a + b x} P'_\lambda(x) \quad (1.61)$$

次の漸化式を右辺に代入する。

$$P'_\lambda(x) = (2\lambda - 1) P_{\lambda-1}(x) + P'_{\lambda-2} \quad (1.62)$$

これにより、次の関係式をえる。

$$L_\lambda = \int \sqrt{a + b x} (2\lambda - 1) P_{\lambda-1} dx + L_{\lambda-2} \quad (1.63)$$

$\sqrt{a + b x} = (a + b x)/\sqrt{a + b x}$ と書き換えて、被積分関数に Legendre 関数の漸化式を代入し整頓すると、次式をえる。

$$L_\lambda - L_{\lambda-2} = \sqrt{a + b x} \{P_\lambda(x) - P_{\lambda-2}(x)\} - \frac{b}{2} \{J_3^\lambda - J_3^{\lambda-2}\} \quad (1.64)$$

$I^\lambda \equiv (2\lambda + 1) J_3^\lambda$ と定義し、 L_λ を消去すると、

$$b(2\lambda + 1) J_3^\lambda + 2a(2\lambda - 1) J_3^{\lambda-1} + b(2\lambda - 3) J_3^{\lambda-2} = 2\sqrt{a + b x} (P_\lambda - P_{\lambda-2}) \quad (1.65)$$

積分区間を考慮し、次式を得る。

$$I^\lambda = - \left\{ \frac{R^2 + s^2}{R s} I^{\lambda-1} + I^{\lambda-2} + \frac{R_c}{R s} (P_\lambda(x_c) - P_{\lambda-2}(x_c)) \right\} \quad (1.66)$$

右辺の Legendre 項は、以下の様に変形できる。

$$P_\lambda - P_{\lambda-2} = \frac{2\lambda - 1}{\lambda - 1} \{P_\lambda - x P_{\lambda-1}\} = (2\lambda - 1) J_1^{\lambda-1} \quad (1.67)$$

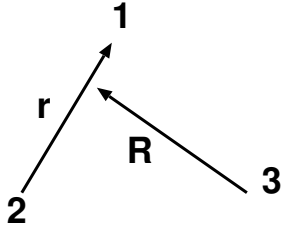
特に、

$$I^0 = J_3^0 = \frac{R + s - R_C}{R s} \quad (1.68)$$

$$I^1 = 3J_3^1 = J_3^0 \{R_C J_3^0/2 + 1 + 2x_c\} \quad (1.69)$$

j-j 結合の CDCC

入射粒子は粒子 1 と粒子 2 の複合粒子であり、標的は粒子 3 とする。粒子 1 と 2 の質量差が大きい時には j-j 結合を用いるのが良いと思われる。そこで、以下のメモを作った。



位置座標

$$\mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \frac{m_2}{m_1 + m_2} \mathbf{r} \quad (1.70)$$

$$\mathbf{r}_{23} = \mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \frac{m_1}{m_1 + m_2} \mathbf{r} \quad (1.71)$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} \quad (1.72)$$

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 \quad (1.73)$$

これらの粒子はそれぞれ スピン s_i , ($i = 1, 2, 3$) をもち、角運動量の結合順序は次の通りとする。

$$\vec{l} + \vec{s}_1 = \vec{j}_1, \quad \vec{j}_1 + \vec{s}_2 = \vec{I}, \quad \vec{I} + \vec{L} = \vec{J} \quad (1.74)$$

ここで、 \vec{l} と \vec{L} は、 \mathbf{r} と \mathbf{R} に対応する軌道角運動量とする。ここでは、 s_3 依存性は登場しない ($s_3 = 0$) と仮定する。

系を記述するハミルトニアンは $H = H_r + T_R + V_{13} + V_{23}$ とし、 H_r に対する問題は解けていてその固有値と固有関数は e^c , $\phi^c(\mathbf{r})$ とする。即ち、

$$H_r \phi^c = e^c \phi^c \quad (1.75)$$

この固有関数の座標依存性を明示的に書くと

$$\phi_{I M_I}^c(\mathbf{r}) = [i^l \mathbf{Y}_{l s_1 j}(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \phi_{s_2}]_{I M_I} \frac{u_{l s_1 j}^c(r)}{r} \quad (1.76)$$

ここで、 ϕ_{s_2} は粒子 2 の波動関数であり、内部構造は無視している (又は反応では励起されない) と仮定する。 $u_{l s_1 j}^c$ は束縛状態又は散乱状態を表し、散乱状態の漸近形は通常のクーロン波動関数 F_l^c , G_l^c を用いて次の形とする。

$$u_{l s_1 j}^c \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \{ \cos \delta^c F_l^c(r) + \sin \delta^c G_l^c(r) \} \quad (1.77)$$

δ^c は位相のずれである。又、

$$\mathbf{Y}_{l s j m + \sigma}(\hat{\mathbf{r}}) \equiv \sum (l m s \sigma | j m + \sigma) Y_{l m}(\hat{\mathbf{r}}) \phi_{s \sigma} \quad (1.78)$$

は軌道角運動量とスピン角運動量が (1.73) で与えられる順に結合している場合のスピン・角度波動関数である。

角運動量が (J, M) の場合の全系の波動関数を次ぎの様に書く。

$$\Psi_{J M} = \sum \left[[i^{l_c} \mathbf{Y}_{l_c s_1 j_c}(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \phi_{s_2}]_{I_c} \otimes i^{L_c} Y_{L_c}(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{J M} \frac{u_{l_c s_1 j_c}^c(r)}{r} \frac{\chi_{L_c}^{J c}(R)}{R} \quad (1.79)$$

次に、散乱状態 u^c に対して truncation と discretization を行う。

$$\hat{u}_{l s j}^c(\hat{k}_i, r) \equiv \frac{1}{\sqrt{\Delta k}} \int_{k_{i-1}}^{k_i} u_{l s j}^c(k, r) dk \quad (1.80)$$

$\Delta k \equiv k_i - k_{i-1}$ は平均する波数の区間幅である。 \hat{k}_i は区間 $[k_{i-1}, k_i]$ の以下の意味での中央値で代用する。即ち、

$$\hat{k}_i^2 = \frac{\int_{k_{i-1}}^{k_i} k^2 dk}{\int_{k_{i-1}}^{k_i} dk} = \left(\frac{k_{i-1} + k_i}{2} \right)^2 + \frac{(k_i - k_{i-1})^2}{12} \quad (1.81)$$

エネルギー保存則より、

$$E = \frac{m_3 E_{lab}}{m_{12} + m_3} = \frac{(\hbar K_0)^2}{2 \mu_R} + e^0 = \frac{(\hbar K_c)^2}{2 \mu_R} + \frac{(\hbar \hat{k}_c)^2}{2 \mu_r} \quad (1.82)$$

ここで、大文字の K_c はチャネル c での R 座標に対応する波数である。(1.78) 式で \hat{u}^c となっている χ^c は、この大文字の K_c に対応する運動エネルギーを持つ。 \hat{u}^c は truncate されているから完全ではないが、規格直交条件を満足する。 $\Psi_{J M}$ をこの truncate された空間での波動関数で展開しなおす。

$$\hat{\Psi}_{J M} = \sum_c \left[[i^{l_c} \mathbf{Y}_{l_c s_1 j_c}(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \phi_{s_2}]_{I_c}^c \otimes i^{L_c} Y_{L_c}(\hat{\mathbf{R}}) \right]_{J M} \frac{\hat{u}_{l_c j_c}^c(r)}{r} \frac{\chi_{L_c}^{J c}(R)}{R} \quad (1.83)$$

$\chi_L^{J c}(R)$ の漸近形は、

$$\chi_L^{J c} \rightarrow I_0 \delta_{0c} - \sqrt{\Delta k} \sqrt{\frac{K_0}{K_c}} S_{c0}^J O_c \quad (1.84)$$

ここで、 I_c, O_c はチャネル c での内向きと外向きのクーロン波動関数であり、 S_{c0}^J はチャネル 0 からチャネル c への S 行列要素である。(1.79) で余分な因子を規格化の為に持ち込んだので、S 行列要素の前に通常は見られない $\sqrt{\Delta k}$ を持ち込んだ。但し (1-2) 系の束縛状態に対しては $\Delta k = 1$ と解釈しておく。

χ^c が満足すべき微分方程式に対しては、先に与えた ハミルトニアンより、

$$(T_R + V_{13} + V_{23} + H_r)\hat{\Psi}_{JM} = E\hat{\Psi}_{JM}. \quad (1.85)$$

ここへ、(1.82) を代入し左から (1-2) 系の波動関数と \mathbf{R} の角度部分波動関数に關係する部分を掛けて、 \mathbf{r} と $\hat{\mathbf{R}}$ で積分する事で次式をえる。

$$(T_R + V_{cc} - E_c)\chi_{L_c}^{Jc} = - \sum_{c' \neq c} V_{cc'} \chi_{L_{c'}}^{Jc'} \quad (1.86)$$

但し、 $E_c = E - e^c$ 。この連立微分方程式に登場するポテンシャルの行列要素は、

$$V_{cc'} = \left(\frac{u_{lcjc}^c(r)}{r} \left[[i^{l_c} \mathbf{Y}_{l_c s_1 j_c} \otimes \psi_{s_2}]_{I_c} \otimes i^{L_c} Y_{L_c} \right]_{JM} |V_{13} + V_{23}| \right. \\ \left. \left[[i^{l'_c} \mathbf{Y}_{l'_c s_1 j'_c} \otimes \psi_{s_2}]_{I'_c} \otimes i^{L'_c} Y_{L'_c} \right]_{JM} \frac{u_{l'_c j'_c}^{c'}(r)}{r} \right)_{\mathbf{r} \hat{\mathbf{R}}} \quad (1.87)$$

右辺の下付き添字 ($\mathbf{r} \hat{\mathbf{R}}$) は積分変数を意味する。この行列要素を計算するために、ポテンシャルの多重極展開をする。

$$V_{13}(r_{13}) + V_{23}(r_{23}) = \sum_{\lambda} v_{\lambda}(r, R) P_{\lambda}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{R}}) = \sum_{\lambda i} \frac{4\pi}{2\lambda+1} v_{\lambda}^{(i)}(r, R) (Y_{\lambda}(\hat{\mathbf{r}}) \cdot Y_{\lambda}(\hat{\mathbf{R}})) \quad (1.88)$$

$$V_{cc'}(R) = \sum_{\lambda} Z(c\lambda c'; J) F(c\lambda c'; R) \quad (1.89)$$

と書くと、幾何学的部分は、

$$Z(c\lambda c'; J)$$

$$= i^{L_{c'}+l_{c'}-L_c-l_c} ([[\mathbf{Y}_{l_c s_1 j_c} \otimes \phi_{s_2}]_{I_c} \otimes Y_{L_c}]_{JM} | \frac{4\pi}{2\lambda+1} (Y_{\lambda} \cdot Y_{\lambda}) | [[\mathbf{Y}_{l_{c'} s_1 j_{c'}} \otimes \phi_{s_2}]_{I_{c'}} \otimes Y_{L_{c'}}]_{JM}) \\ = i^{L_{c'}+l_{c'}-L_c-l_c+2\lambda} (-)^{J-s_1-s_2+j_c+j_{c'}+\lambda} \hat{l}_c \hat{l}_{c'} \hat{j}_c \hat{j}_{c'} \hat{I}_c \hat{I}_{c'} \hat{L}_c \hat{L}_{c'} \begin{pmatrix} L_c & \lambda & L_{c'} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_c & \lambda & l_{c'} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \times \begin{Bmatrix} I_c & L_c & J \\ L_{c'} & I_{c'} & \lambda \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_c & I_c & s_2 \\ I_{c'} & j_{c'} & \lambda \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l_c & j_c & s_1 \\ j_{c'} & l_{c'} & \lambda \end{Bmatrix} \quad (1.90)$$

位相部分は、 $(j_c + s_1)$ は整数だから $(-)^{s_1-j_c} = (-)^{j_c-s_1}$ である。

動径成分は

$$F(c\lambda c'; R) = \int_0^{\infty} u_{lcjc}^c(r) u_{l'_c j'_c}^{c'}(r) \left\{ v_{\lambda}^{(1)}(r, R) + v_{\lambda}^{(2)}(r, R) \right\} dr. \quad (1.91)$$

LS 表示と $j-j$ 結合表示での幾何学的係数を出来るだけ統一的に表現したい。

$$\begin{aligned}
 Z^{jj}(c, \lambda, c'; J) = & (-1)^{J-s_2-s_1} i^{L_{c'}-L_c+\lambda} \hat{L}_{c'} \hat{L}_c \left\{ \begin{matrix} I_c & L_c & J \\ L_{c'} & I_{c'} & \lambda \end{matrix} \right\} \left(\begin{matrix} L_c & \lambda & L_{c'} \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \\
 & \times i^{l_{c'}-l_c+\lambda} (-1)^{j_{c'}+j_c+\lambda} \hat{j}_{c'} \hat{j}_c \hat{I}_{c'} \hat{I}_c \hat{l}_{c'} \hat{l}_c \left\{ \begin{matrix} j_c & I_c & s_2 \\ I_{c'} & j_{c'} & \lambda \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_c & j_c & s_1 \\ j_{c'} & l_{c'} & \lambda \end{matrix} \right\} \left(\begin{matrix} l_c & \lambda & l_{c'} \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right)
 \end{aligned} \quad (1.92)$$

一方 LS 表示では

$$\begin{aligned}
 Z^{LS}(c, \lambda, c'; J) = & (-1)^{J-S} i^{L_{c'}-L_c+\lambda} \hat{L}_{c'} \hat{L}_c \left\{ \begin{matrix} I_c & L_c & J \\ L_{c'} & I_{c'} & \lambda \end{matrix} \right\} \left(\begin{matrix} L_c & \lambda & L_{c'} \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right) \\
 & \times i^{l_{c'}-l_c+\lambda} \hat{I}_{c'} \hat{I}_c \hat{l}_{c'} \hat{l}_c \left\{ \begin{matrix} l_c & I_c & S \\ I_{c'} & l_{c'} & \lambda \end{matrix} \right\} \left(\begin{matrix} l_c & \lambda & l_{c'} \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix} \right)
 \end{aligned} \quad (1.93)$$

即ち、スピンの依存する位相と第 2 行目だけが異なる。全系の J^π に依存する部分と依存しない部分に分け、両者の積として幾何学的係数を計算する。

当然の事であるが、この幾何学的因子は波数には依存しない。

3 次スプライン

ポテンシャルの行列要素の内挿に利用している 3 次スプラインのメモ。

節点 (x_i, y_i) , $\{i = 0, 1, \dots, n\}$ を与えて、区間 $[x_{i-1}, x_i]$ を定義域とする区分的 3 次式を考える。隣接する区間での 3 次式とは、1、2 階微分が連続とする。この区分的 3 次式を決定する手法を記録する。区間を $[x_{i-1}, x_i]$ とし、 $h_i = x_i - x_{i-1}$, $z_i = y_i''/6$ という記法を用いる。先ず 2 階微分の内挿公式から始める。

$$y'' = 6 \{z_{i-1}(x_i - x) + z_i(x - x_{i-1})\} / h_i^2 \quad (1.94)$$

この式を積分すると

$$y' = 3 \{-z_{i-1}(x_i - x)^2 + z_i(x - x_{i-1})^2\} / h_i^2 + A \quad (1.95)$$

もう一度積分すると、

$$y = \{z_{i-1}(x_i - x)^3 + z_i(x - x_{i-1})^3\} / h_i^2 + Ax + B \quad (1.96)$$

この式が両端の節点を通るという条件を書き下すと、

$$y_{i-1} = z_i h_i + A x_{i-1} + B, \quad y_i = z_{i-1} h_i + A x_i + B \quad (1.97)$$

この式を積分定数 A, B について解くと、

$$A = \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} - (z_i - z_{i-1}), \quad B = \frac{x_i y_{i-1} - x_{i-1} y_i}{h_i} - (x_i z_{i-1} - x_{i-1} z_i) \quad (1.98)$$

区分的 3 次式は、

$$y = s y_i + t y_{i-1} - h_i \{s(1 - s^2) z_i + t(1 - t^2) z_{i-1}\} \quad (1.99)$$

但し、 $s = (x - x_{i-1})/h_i$, $t = 1 - s = (x_i - x)/h_i$ と略した。

次ぎに、2 階微分の決定法を記す。点 $x = x_i$ の両端での 1 階微分の連続性を要求すると、

$$z_{i+1} + 4z_i + z_{i-1} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \quad (1.100)$$

この式は $i = 1$ から $i = n - 1$ に対して成立するから、 $n + 1$ 個の変数 z_i に対して未だ 2 個の条件が不足する。この 2 個は z_0, z_n を、節点の両端での推定値を用いて計算する事により与える。次ぎの手順の漸化式で解は与えられる。但し、 $\delta_i = \{y_i - y_{i-1}\}/h_i$ という略号を用いる。

1) 補助変数 $w_i, (i = 1, 2, \dots, n)$ を定義する。

$$w_{i+1} = 1/(4 - w_i), \quad \text{ここで、} w_1 = 1/4 \quad (1.101)$$

この変数は、 $y_i, (i = 0, 1, \dots, n)$ には依存しないので、一度計算しておけばよい。

2) 更なる補助変数 Δ_i の計算。

$$\Delta_i = \delta_{i+1} - \delta_i - w_{i-1} \Delta_{i-1}, \quad \text{ここで、} \Delta_1 = \delta_2 - \delta_1 - z_0 \quad (1.102)$$

$i = 2$ から $i = n - 1$ まで計算する。

3) z_n を与えて、以下の漸化式を用いて z_i を計算する。

$$z_i = w_i \{\Delta_i - z_{i+1}\} \quad (1.103)$$

ここで、 $i = n - 1$ から $i = 1$ まで計算する。 z_i は Δ_i に重ね書き出来る。

両端での二階微分の推定には、連続する 4 点間の間隔が等しいと仮定して、この 4 点の関数値を 3 次近似で推定している。

スプライン関数の使用は、有効である場合が多いと期待するが、駄目な場合もある。クーロンポテンシャルは、hctak では一様帯電球を仮定して作っているが、電荷密度 (これは電場勾配、即ちポテンシャルの二階微分に係る) が不連続である場合がある事を意味

する。即ち、3 次スプラインの仮定が破綻する場合がある。この半径付近で近似値が異常な振舞をする。

弱結合 CDCC 方程式の解法

核力が無視できる様な領域で、次式で与えられる CDCC 方程式 (1.85) の解法を考える。この解法は、Gordon が Airy 関数を用いて Coulomb excitation に対する Coupled Channels 方程式を解くのに使用した手法の一変形である。

$$\frac{d^2 \chi_c}{dr^2} = V_{cc} \chi_c + \sum_{c' \neq c} V_{cc'} \chi_{c'} \quad (1.104)$$

区間 $[r_0, r_1]$ での解は既知として、区間 $[r_1, r_2]$ での近似解を得たいとする。(1.103) 式、右辺第 2 項を無視した斉次方程式の解を F_c, G_c とする。即ち、

$$\frac{d^2}{dr^2} \begin{pmatrix} F_c \\ G_c \end{pmatrix} = V_{cc} \begin{pmatrix} F_c \\ G_c \end{pmatrix} \quad (1.105)$$

但し、解を特定する為に、 $r = r_1$ で次の条件を付ける。

$$\begin{pmatrix} F_c(r_1) \\ G_c(r_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} F'_c(r_1) \\ G'_c(r_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.106)$$

この時、Wronskian は一定である。

$$W(r) \equiv F'_c G_c - F_c G'_c = 1 \quad (1.107)$$

(1.103) 式の解をこの斉次方程式の解 F_c, G_c で展開する。

$$\chi_c(r) = \alpha_c(r) F_c(r) + \beta_c(r) G_c(r) \quad (1.108)$$

展開係数 α_c, β_c は、穏やかに変化する r の関数であり、 $r = r_1$ では次の値をとる。

$$\alpha_c(r_1) = \chi'_c(r_1), \quad \beta_c(r_1) = \chi_c(r_1) \quad (1.109)$$

展開式 (1.107) は一つの関数を二つの関数で展開している。自由度が過剰だから、一つの自由度を殺すために、以下の条件をつける。

$$F_c(r) \alpha'_c(r) + G_c(r) \beta'_c(r) = 0 \quad (1.110)$$

展開式 (1.107) を (1.103) に代入する。

$$F'_c(r) \alpha'_c(r) + G'_c(r) \beta'_c(r) = \sum_{c' \neq c} V_{cc'}(r) \chi_{c'}(r) \quad (1.111)$$

これで、 α' , β' に関する式が二つ出来た。式 (1.109) と (1.110) を連立させて、 α' , β' を解く。

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} \alpha_c \\ \beta_c \end{pmatrix} = \sum_{c' \neq c} \begin{pmatrix} G_c V_{cc'} F_{c'} & G_c V_{cc'} G_{c'} \\ -F_c V_{cc'} F_{c'} & -F_c V_{cc'} G_{c'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{c'} \\ \beta_{c'} \end{pmatrix} \quad (1.112)$$

これにより、激しく振動する CDCC 方程式の解が、穏やかに変化する連立一階微分方程式に変換された。ここまでは、原理的には厳密な変換だが、ここで (1.111) をオイラー法で解く事にする。

$$\begin{pmatrix} \alpha_c \\ \beta_c \end{pmatrix}_{r_2} \sim \sum_{c' \neq c} \begin{pmatrix} \langle G_c V_{cc'} F_{c'} \rangle & \langle G_c V_{cc'} G_{c'} \rangle \\ -\langle F_c V_{cc'} F_{c'} \rangle & -\langle F_c V_{cc'} G_{c'} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{c'} \\ \beta_{c'} \end{pmatrix}_{r_1} \quad (1.113)$$

但し、次の積分式を略号として書いた。

$$\langle G_c V_{cc'} F_{c'} \rangle \equiv \int_{r_1}^{r_2} dr G_c(r) V_{cc'}(r) F_{c'}(r) \quad (1.114)$$

これで、簡単解法の記述は、原理的にはおしまい。

解の外部領域 $[r_1, r_N]$ を、 $N - 1$ 個の領域に分割して、順次 上の手法を適用して行けばよい。

閉チャンネルに対しても、外から解いて行く事により、この手法は適用可能である。

量子力学の、1 次の摂動では r の全区間でのポテンシャルの行列要素により c' から c への遷移が起こる。この式を見ると、区間 $[r_1, r_2]$ での遷移を積み重ねていると見る事が出来よう。別の言葉で言えば、連立微分方程式の数値的積分という事は、1 ステップの分割区間毎に、1 次の摂動計算をしていることである。従って、CDCC は無限次元の摂動を取り入れた計算という表現はあたらない。

先に、重陽子 CDCC 方程式にこの手法を適用し、計算時間が 1 / 3 に短縮されたという経験がある。

参考文献

Roy G. Gordon, J. Chem. Phys. **51** 14(1969)

分解過程の等価電荷

ニュートンの運動方程式を粒子 1、2 に対して書き下す。

$$m_1 \frac{d^2 \mathbf{r}_1}{dt^2} = z_1 C \frac{\mathbf{R} + m_2 \mathbf{r} / m_{12}}{|\mathbf{R} + m_2 \mathbf{r} / m_{12}|^3}, \quad m_2 \frac{d^2 \mathbf{r}_2}{dt^2} = z_2 C \frac{\mathbf{R} - m_1 \mathbf{r} / m_{12}}{|\mathbf{R} - m_1 \mathbf{r} / m_{12}|^3} \quad (1.115)$$

ここで、 $C = z_3 e^2 / 4\pi\epsilon_0$ とした。粒子 2 に対しても同様の関係が成立する。粒子 1-2 の相対座標は $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$ とすると、以下の運動方程式が成立する。

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{z_1}{m_1} C \frac{\mathbf{R} + m_2 \mathbf{r} / m_{12}}{|\mathbf{R} + m_2 \mathbf{r} / m_{12}|^3} - \frac{z_2}{m_2} C \frac{\mathbf{R} - m_1 \mathbf{r} / m_{12}}{|\mathbf{R} - m_1 \mathbf{r} / m_{12}|^3} \quad (1.116)$$

ここで、 $r < R$ を仮定して分母を展開する。その後 $O(R^{-3})$ までを残すと、

$$\mu \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{C}{R^3} \left\{ \frac{m_2 z_1 - m_1 z_2}{m_{12}} \mathbf{R} + \frac{m_2^2 z_1 + m_1^2 z_2}{m_{12}^2} \left(\mathbf{r} - 3 \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}}{R^2} \mathbf{R} \right) \right\} \quad (1.117)$$

$\mu = m_1 m_2 / m_{12}$, $m_{12} = m_1 + m_2$ と置いた。

$^{13}\text{Al} = p + ^{22}\text{Mg}$ と仮定すると、この右辺第 1、2 項の等価電荷は 0.435, 0.938 である。
($m_2 z_1 - m_1 z_2$)/ $m_{12} > 0$ だから、 \mathbf{r} の長さを増す方向に力が働いている。通常の潮汐力だろう。

この計算はポテンシャルを用いると、もっと簡単に実行できる。

$$\frac{z_1 C}{|\mathbf{R} + \frac{m_2}{m_{12}} \mathbf{r}|} = \frac{z_1 C}{R} \left[1 - \frac{1}{2} \left\{ 2 \frac{m_2}{m_{12}} \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}}{R^2} + \left(\frac{m_2 r}{m_{12} R} \right)^2 \right\} + \frac{3}{8} \left\{ 2 \frac{m_2}{m_{12}} \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}}{R^2} + \left(\frac{m_2 r}{m_{12} R} \right)^2 \right\}^2 \dots \right] \quad (1.118)$$

とすると、

$$\begin{aligned} \frac{z_1 C}{|\mathbf{R} + \frac{m_2}{m_{12}} \mathbf{r}|} + \frac{z_2 C}{|\mathbf{R} - \frac{m_1}{m_{12}} \mathbf{r}|} &= \frac{(z_1 + z_2) C}{R} - C \left(\frac{m_2 z_1 - m_1 z_2}{m_{12}} \right) \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{R}}{R^3} \\ &\quad - \frac{C(z_1 m_2^2 + z_2 m_1^2)}{2 m_{12}^2} \left\{ \frac{r^2}{R^3} - 3 \frac{(\mathbf{r} \cdot \mathbf{R})^2}{R^5} \right\} + \dots \end{aligned}$$

この右辺第 1 項は重心に働く通常のクーロンポテンシャルであり、第 2 項から入射粒子を壊す作用が出て来る。この項を \mathbf{r} で微分し、符号をかえると、上の力が登場する。最後の 2 項は、通常の変極子・変極子相互作用 (テンソル力) だ。

粒子 1 と 2 の z/m 比が等しいならば、クーロン分解過程は第 1 義的にはあまり効かない。

入射粒子の束縛エネルギーを $E_B = \hbar \omega_B$ 、その速さを v_i とすると、 $v_i / \omega_B = d$ の移動距離でクーロンポテンシャルの差が、 E_B 以上無いと分解は起こらないと想像しよう。
 $C z_{eff} \{1/(R_B - d/2) - 1/(R_B + d/2)\} = E_B$ で決まる R が最大分解半径の目安を与える。
更に、この半径に対応する軌道角運動量程度迄の軌道角運動量が分解過程に寄与すると考えられる。

従って、少なくともこれらの半径や軌道角運動量迄は CDCC 方程式を解き、収束の判断をするのが妥当だろう。

1.5 hctak.f の内部構造

MAIN	DATIME	CURTIM	tt.c			
	DEFFND					
	HCTK10	NUCSPE				
	HCTKMS					
	PRNTOK					
	HCTK20	DATIME	CURTIM	tt.c		
		WFCAL	WSPOT			
			WSBND			
			WSRES	WSINT	CWF, etc	
			WSSCT	WSINT	CWF	CF3
						CF2
						COUPS
						FJNCAL
		VDCAL				
		LGCAL				
		VNEXP				
		VCEXP				
HCTK40	HCTK4M	XSCAL				
	HCTK42	ZC36J	VC0TAB			
			SJTAB			
			SJTAB			
			CWFX	CWF, etc		
	VCUPOL	INTHP	INTHP1	VCINT		
	XSCAL					
	DATIME	CURTIM	tt.c			
	HCTK44	ZC36J	VC0TAB			
			SJTAB			
	HCTK46	VUCAL				
		UGSOC	HPSDEC			
	HCTK48	CLULEQ				
		CLEQ1				
	PRNTOK					

右へ行くほど、下請けの程度が深くなる。DATIME、CWF と ZC36J 及びその下請けは 2 回登場している。DATIME は実際はもっと登場して。CWFX は単に CWF を呼んでいるだけだ。

hctak で使われている副プログラムと簡単な機能

SUB/FUNC	名前	機能
SUBROUTINE	DEFFND	基本定数の定義
SUBROUTINE	PRNTOK	記憶域管理ミスがあるとエラー文を印刷する
SUBROUTINE	DATIME	計算日と時刻を出力する
SUBROUTINE	HCTK10	使用するパラメータの読み込み
SUBROUTINE	NUCSPE	元素記号から物理定数に変換する
SUBROUTINE	HCTKMS	ある種の配列の大きさを決定する
SUBROUTINE	HCTK20	粒子 1 - 2 系の計算制御
SUBROUTINE	WFCAL	1 - 2 系波動関数の計算制御
SUBROUTINE	WSPOT	1 - 2 系ポテンシャルの計算
SUBROUTINE	WSBND	1 - 2 系束縛状態波動関数の計算
SUBROUTINE	WSRES	1 - 2 系共鳴状態波動関数の計算制御
SUBROUTINE	WSINT	1 - 2 系散乱状態波動関数の計算
SUBROUTINE	WSSCT	1 - 2 系散乱状態波動関数の計算と波数積分
SUBROUTINE	CWFX	クーロン波動関数を呼ぶ
SUBROUTINE	CWF	クーロン波動関数を計算する
SUBROUTINE	CF2	クーロン波動関数の下請け
SUBROUTINE	COUPS	クーロン波動関数の下請け
SUBROUTINE	CF3	クーロン波動関数の下請け
SUBROUTINE	FJNCAL	クーロン波動関数の下請け
SUBROUTINE	VDCAL	粒子 3 との光学ポテンシャルの計算
SUBROUTINE	LGCAL	Gauss-Legendre 積分のパラメータ計算
SUBROUTINE	VNEXP	粒子 3 との光学ポテンシャルの多重極展開
SUBROUTINE	VCEXP	粒子 3 とのクーロン力の多重極展開
SUBROUTINE	XSCAL	((1+2)-3) 系波動関数の立ち上げ半径の計算

SUB/FUNC	名前	機能
SUBROUTINE	HCTK40	連立微分方程式解法制御
SUBROUTINE	ZC36J	幾何学因子の計算
SUBROUTINE	VC0TAB	幾何学因子の下請け
SUBROUTINE	SJTAB	幾何学因子の下請け
SUBROUTINE	VCUPOL	真空偏極ポテンシャル計算制御
SUBROUTINE	INTHP	同上、下請け
SUBROUTINE	INTHP1	同上、下請け
FUNCTION	VCINT	同上、下請け
SUBROUTINE	HCTK42	ポテンシャルの行列要素計算
SUBROUTINE	HCTK44	幾何学因子の計算
SUBROUTINE	HCTK46	連立微分方程式を解く
SUBROUTINE	VUCAL	同上下請け
SUBROUTINE	UGSOC	独立解への直交化
SUBROUTINE	HPSDEC	同上、下請け
SUBROUTINE	HCTK46	S 行列の計算制御
SUBROUTINE	CLULEQ	同上、下請け
SUBROUTINE	CLEQ1	同上、下請け

共通領域の変数

HCA, S12, S3, ASIZE, MPCOM という 5 種の名前付き共通領域が主プログラムで確保される。

HCA 共通領域

```
COMMON /HCA/KNTL(10),IA(3),IS(3),IZ(3),JP(3),EM(3),ECM3,
+          JTMIN,JTMAX,JTINC, LAMMIN, LAMMAX
```

変数の意味

KNTL 入出力の制御変数

IA 粒子 1、2、3 の質量数

IS 粒子 1、2、3 のスピンの 2 倍 [\hbar]

IZ 粒子 1、2、3 の原子番号

JP 粒子 1、2、3 のパリティ

EM 粒子 1、2、3 の質量 [原子質量単位 u]

ECM3 全系の重心系での運動エネルギー [MeV]

JTMIN 全系の角運動量の最小値の 2 倍 [\hbar]

JTMAX 全系の角運動量の最大値の 2 倍 [\hbar]

JTINC 全系の角運動量の取り得る値の増分の 2 倍 [\hbar]

LAMMIN ポテンシャルの多重極展開の最小次数

LAMMAX 同上、最大次数

S12 共通領域

1-2 系のパラメータを主に蓄える

```
COMMON /S12/BES(10),FKSMIN(15),FKSMAX(15),FKR(10),WKR(10),  
+ VPS(6,5,12),ISBE(10),NODS(10),IDVS(15),NBND(15),NKSBIN(15),  
+ NRES(15),LSTAB(15),ISTAB(15),JSTAB(15),KMUL(15),DR12,NR12,NLSJ
```

変数の意味

BES 1-2 系の束縛エネルギー [MeV]

FKSMIN 1-2 系の散乱状態の波数の最小値 [1/fm]

FKSMAX 1-2 系の散乱状態の波数の最大値 [1/fm]

FKR 1-2 系の共鳴状態の共鳴波数 [1/fm]

WKR 1-2 系の共鳴状態の共鳴波数の幅 (*) [1/fm]

VPS 1-2 系のポテンシャルパラメータ表

ISBE (束縛エネルギーが与えられているか?) の旗

NODS 束縛状態波動関数の節の数 (最小は 0)

IDVS 1-2 系のある (L, S, I) 又は (l, j, I) 状態に対するポテンシャルの識別番号

NBND 束縛状態の数

NKSBIN 散乱状態の波数ビン数

NRES 1-2 系の共鳴状態の数

LSTAB 1-2 系の異なる (L, S, I) に対する軌道角運動量 [\hbar]

ISTAB 1-2 系の異なる (L, S, I) に対する固有スピンの和の 2 倍 [\hbar](**)

JSTAB 1-2 系の異なる (L, S, I) に対する全スピンの和の 2 倍 [\hbar](**)

KMUL 1-2 系の異なる (L、S、I) に対する波数の数 (NKSBIN+NBND)

DR12 1-2 系の動径座標の刻み [fm]

NR12 1-2 系の動径座標の点数

NLSJ 1-2 系の異なる (L、S、J) に対する状態数

この共通領域の変数の添字の値の上限 " 1 5 " が NLSJ の上限を決めている。

(*) ここで言う幅は、"波数平均" を行う場合に使用する幅である。即ち、FKR が $k_{i-1} \equiv \text{FKSMIN} + (i-1) \times \Delta_k < \text{FKR} < \text{FKSMIN} + i \times \Delta_k \equiv k_i$ を満たすとする。ここで、 $\Delta_k \equiv (\text{FKSMAX} - \text{FKSMIN}) / \text{NKSBIN}$ である。この場合には、波数平均を $[k_{i-1}, \text{FKR} - \text{WKR}]$, $[\text{FKR} - \text{WKR}, \text{FKR} + \text{WKR}]$, $[\text{FKR} + \text{WKR}, k_i]$ の 3 区間に分けて、区間毎に積分を行う。

wsf では、 $|\delta(k_{res}) - \delta(k)| = \pi/4$ となる幅も出力しているので、両者を区別する必要がある。常識的には、WKR は、この意味での幅よりは広くしておくべきである。但し、wsf から出力される幅が充分広い時には、共鳴の効果を無理に取り入れる必要はないだろう。

(**) KNTL(1)=0 と 1 の場合で、ISTAB と JSTAB の解釈は異なる。ここに書いたのは、KNTL(1)=0 の場合。KNTL(1)=1 の場合には ISTAB は、 $j = 1 + s_1$ と書いた時の j の大きさの 2 倍であり、 $I = j + s_2$ と書いた時の I の 2 倍である。

S3 共通領域

粒子 3 から見た (1+2) 系の重心運動を記述するパラメータを主におく

```
COMMON /S3/RFTAB(0:300), VPL(6,10,2), DR3, RC3, NR3
```

変数の意味

RFTAB r_3 動径位置の数表。全体で NRFF 個の要素を持つ

VPL 1-3, 2-3 系のポテンシャルパラメータ表

DR3 実際に結合方程式を解く場合の (1+2)-3 系重心間距離 r_3 の刻み幅

RC3 入射粒子と標的核とのクーロン相互作用に対する電荷半径 [fm]

NR3 上記 r_3 重心間距離を表す点数

ASIZE 共通領域

プログラム単位間でやりとりされる配列の大きさに関する数値を保持している。

```
COMMON /ASIZE/KCC, MCC, MLSJ, N12, NCC, NCWF, NFF, NF12, NZS, NRFF
```

変数の意味

KCC J^π を与えた時の結合方程式の次元

MCC J^π を与えた時の結合行列要素の数。MCC=KCC*(KCC+1)/2。行列要素は複素数であり、スプラインを利用するので、2階微分も保存する。従って r_3 を指定した時、この4倍の大きさが必要である。

MLSJ スピンを指定した時の (1-2) 系の組合せ $\{=NLSJ*(NLSJ+1)/2\}$

N12 (1-2) 系の波動関数 $\hat{\phi}$ 又は \hat{u} の数

NCC ((1+2)-3) 系の状態数。この NCC 内の約半数が KCC である

NCWF ((1+2)-3) 系の独立なクーロンパラメータの数

NFF λ を考慮した結合行列要素の数

NF12 配列 IPFF の大きさ。N12*(N12+1)/2。IPFF は V_{12} の行列要素を与える配列への、特定の波動関数 \hat{u} の組合せに対するポインター配列。

NZS ZCS 配列の大きさ。ZCS は (1-2) 系の幾何学因子を保存する。

NRFF ((1+2)-3) 間の動径座標 (R 又は r_3 と混用している) の行列要素を計算する点数。実際は原点を含めるのでもう1点多い。

MPCOM 共通領域

MPI の利用を想定した共通変数を保持する。

```
COMMON /MPCOM/NPROCS, MYRANK
```

変数の意味

NPROCS MPI 運用に動員している CPU 数

MYRANK MPI 運用時の個別の CPU の識別番号。0 から (NPROC-1) までのある整数。

プログラム単位の各論

主プログラム

入出力ファイルを定義し、全体の流れを制御する。そのために、DEFFND, PRNTOK, HCTK10, HCTKMS, HCTK20, HCTK40 を呼ぶ。KTRL(8) の値により、HCTK20 による計算を ファイル FFDUMP に書き込んだり、事前に書き込まれた内容を読み込む。後者の場合 HCTK20 は呼ばれない。

hctak で使われている副プログラムと簡単な機能

DEFFND

以下の3個の基本的なパラメータを定義する。

AMU: 原子質量単位 u を MeV 単位に換算する定数。

CFAC: クーロン相互作用の大きさ $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ [MeV fm]

HBARC: $\hbar \times c$ である [MeV fm]

これらの3変数は、共通領域 /FUND/ に置かれる。

DATIME

現在の時刻を出力する。過去の閏秒を考慮していないので、数秒の誤差がある。個別の計算の識別や計算過程の所要時間測定に利用出来る。

言語 C で書かれ、現在の時刻を UNIX の意味での 秒表現で返す関数 CURTIM(tt.c) を下請けとしている。

HCTKMS

入力データを用いて、全ての (1-2) 系の波動関数の組合せに対する独立な行列要素の数 NFF を計算する。これにより、配列 FFTAB の大きさを確定する。

1-2 系のスピン を一つ固定した時の束縛状態や散乱状態をそれぞれ独立な波動関数で表されると考える。この数を全ての NLSJ について加え合わせると、N12 即ち 1-2 系の波動関数の数となる。従って、内部状態の記述にテンソル力があってはいけない。この N12 個の波動関数の全ての組合せに対してポテンシャル V_{13} , V_{23} の行列要素 (多重度と実部及び虚部を含む) を計算するが、この行列要素の数が NFF である。

FORTRAN 90 以上を想定すると、メモリーの確保がこれにより出来る。

PRNTOK

記憶域の確保や開放に失敗した時、失敗した副プログラムの名前を出力する。

HCTK10

主に入力を司る。入力された物理量はまとめて出力される。

SUBROUTINE HCTK10

引数は使用していない。

下請けプログラムとして、NUCSPE を使用している。

NUCSPE

粒子 1、2、3 の質量等の属性と入射エネルギーを返す

SUBROUTINE NUCSPE(INPUT, IZ, IA, IS, JP, EM, ELAB)

引数の意味

INPUT 最大 50 文字の文字配列。反応情報のデータを保持

IZ 粒子 1、2、3 の原子番号を返す

IA 粒子 1、2、3 の質量数を返す

IS 粒子 1、2、3 のスピンの 2 倍を返す

JP 粒子 1、2、3 のパリティを返す

EM 粒子 1、2、3 の原子質量単位での質量を返す

ELAB 粒子 1+2 の実験室系での運動エネルギーを返す

長さ 3 の 1 次元配列の添字の値 1、2、3 は、粒子 1、2、3 に対応する。反応情報を書いた文字列データ INPUT は論理機番 5 のファイルから TITLE という変数に読み込む。

この文字データの書式は後で説明するが、ここに核種記号が 3 個と実験室系での粒子 (1+2) の運動エネルギーが MeV 単位で書かれる。この INPUT データを解読し、原子番号 (IZ(1-3))、質量数 (IA(1-3))、スピンの 2 倍 (IS(1-3))、パリティ (JP(1-3))、原子核質量 (原子質量単位) (EM(1-3))、実験室系での入射粒子 (1+2) の運動エネルギー (ELAB) を、該当する変数に定義する。この変換作業には、辞書 (database) として「umtab」というファイルを必要とする。

INPUT の書式：

核種記号は、質量数の直後に元素記号を書いたものである。質量数と元素記号はくっつけて書かねばならない。例外的な核種指定として自然数を伴わない場合が、n, p, d, t, a の 5 例ある。a は α 粒子と解釈され、他の 4 例は常識に従う。この例外規定と整合するために、アルゴンは Ar と書く事。コロニウムは使用していない。

核種と核種の間には区切り記号をいれる事。区切り記号は、1) 単数又は複数の空白、2) 単数又は複数の空白と一つのコンマの組み合わせ、3) その他の英数字以外の文字特殊記号の一部のいずれかである事。

実験室系でのエネルギーは、核種を 3 個指定した後に区切り記号を書き、その後に (正整数)、(小数点)、(正整数) の組み合わせで書いた一つの実数である事。例外的に、等号 (=) の直後に書いた実数も実験室系でのエネルギーと解釈される。

使用例

INPUT='(n+7Li)+118Sn, Elab(118Sn)=19.32 MeV'

この例では、自明な 3 個の核種とエネルギーを与える。

文字はプログラム内部では全て大文字に変換される。

HCTK20

1-2 系の波動関数を計算し、ポテンシャル $V_{13}(r_{13})$ 、 $V_{23}(r_{23})$ の行列要素を FFTAB に書き込む為の制御プログラム。この副プログラムでの制御を細かく書くと、以下の通り。

0 必要な配列の大きさを調べ、配列を確保する。

1 (1-2) 系の波動関数の表 WF 作る。

2 粒子 $i(i=1,2)$ と 3 との相互作用ポテンシャルとその 1 階微分表 VD を作る。

3 Gauss-Legendre 積分のパラメータ表 XL、WL を作る。

4 全ての (1-2) 系の波動関数の組合せに対して、可能な多重極展開の次数表 LAMNX を作る。

5 実際の行列要素を計算し、2 次元配列 FFTAB に書き込む。

```
SUBROUTINE HCTK20(IP12, DK12, FKSC, ECMS, IPFF, LAMNX, FFTAB)
```

引数の意味

IP12 1-2 系の識別情報 (長さ N12 の 1 次元配列)。N12 から NLSJ 個のスピン状態への変換表。

DK12 1-2 系の $1/\sqrt{\text{波数}}$ 。(長さ N12 の 1 次元配列)

FKSC 1-2 系の内部相対運動の波数 (長さ N12 の 1 次元配列)

ECMS 1-2 系の内部相対運動の運動エネルギー (長さ N12 の 1 次元配列)

IPFF 二つの 1-2 状態 (N_1 と N_2) 間結合に対する行列要素の先頭位置を示すポインター表。
組合せ (N_1, N_2) の行列要素は $ID=IPFF(N_1*(N_1-1)/2+N_2)$ とすると、 $FFTAB(r_3 = 0, ID)$ で始まる位置に書かれる。

LAMNX 特定の 1-2 状態間結合に対し λ の情報と 1-2 系の幾何学因子の表へのポインターを保持する (2 次元配列)

LAMNX(1,*) 個別の組合せの最小の λ

LAMNX(2,*) 同上最大の λ

LAMNX(3,*) ZCS 配列へのポインター。

* は、全ての独立な 1-2 系スピン状態の組合せに対応し、取り得る最大値は $MLSJ(=NLSJ*(NLSJ+1))$ である。

FFTAB 全てのポテンシャルの行列要素の表 (2 次元の実配列)

第 1 添字は 0 から NRFF をとり、ポテンシャルの動径方向の点 (r_3) に対応する。

第 2 添字は NFF 個あり、全てのチャネル間結合要素の数、即ち 1-2 系の波動関数の組合せと、特定の組合せに対する多重極度 λ 、ポテンシャルの実部及び虚部に対応する。

第 2 添字は、以下の様になっている。

```

ID=1; JD=1 ; DO 10 N1=1,N12 ; DO 10 N2=1,N1
IPFF(ID)=JD; ID=ID+1
DO 10 L=Lmin, Lmax, 2 ! のループ
DO 10 I=1,2 ! real/imag. のループ
行列要素の計算; FFTAB(r3,JD)=行列要素
10 JD=JD+1

```

他の配列の添字に関する覚え書き

WF 独立な 1-2 系波動関数の数を N12, 動径方向の点数を NR12 とすると、WF(0:NR12, N12) となっている。どこかで書いた様に、WF(0,*) には、実際に波動関数を計算した点数が入っている。今の所、散乱状態に対しては NR12、束縛状態に対しては波動関数の振幅が、ほぼ 10^{-6} となる半径としている。

VD V_{i3} , $\{i = 1 \text{ or } 2\}$ を保持する 3 次元配列である。第 1 添字は 1 と 2 をとり、1 はポテンシャル、2 はその 1 階微分を表す。第 2 添字は動径方向の点を与え、0 から始まる。実際に取り得る値の上限はポテンシャルパラメータの値に依る。第 3 添字は 1 から 4 までのどれかをとる。1 ならば粒子 1 と 3 の相互作用の実部、2 ならば同虚部、3 ならば粒子 2 と 3 の相互作用の実部、4 ならば同虚部を示す。

VMUL 特定の r_3 に対するポテンシャルの行列要素を保持する 3 次元実配列。第 1 添字は 1 又は 2 であり、実部と虚部を区別する。第 2 添字は λ であり、第 3 添字は r に対応する。

HCTK20 の下請け副プログラム

WFCAL

1-2 系の波動関数計算を制御する。Woods-Saxon 型のポテンシャル下での束縛状態と散乱状態の波動関数を計算して、実配列 WF に書き込む。波動関数には、束縛状態と散乱状態の区別がある。束縛状態波動関数は 1 に規格化され、個別の散乱状態波動関数はある意味で 関数的な規格化がなされる。(PTP (2.6) 式) その後、波数ビンの方法に基づいて波数積分している。

個別の波動関数表の先頭には、実質的な配列の長さが入っている。この数値は、束縛状態の波動関数はすぐに振幅が小さくなるのに、散乱状態波動関数は、入力で指定された範囲まで計算しているという事情による。ポテンシャルの重なり積分を計算する時に、無用な計算をしないために利用する。波数積分の結果、 \hat{u} のノルムが 1 (に近い値) になる r の最大値は波数に大きく依存する。波数に依存した値を $u(0, ?)$ に保存して、数値積分の負荷を軽減する事はあり得るだろう。

必要に応じて波動関数の表を出力した後で、波動関数にはポテンシャル V_{i-3} の行列要素をシンプソンの公式を用いて計算する準備の為の因子 $\{(1, 2 \text{ 又は } 4) * DR12/3 \text{ に対応する } \}$ が掛けられる。

散乱波波動関数は遠方でクーロン波動関数になるように規格化し、位相のずれ $\delta(rad)$ を計算している。従って、正しい位相のずれはここで出力される位相のずれに、クーロン波の位相のずれを加えるのが正しい。三重微分断面積を計算する場合には、位相のずれにクーロン波の位相のずれを加える事を忘れないように！

SUBROUTINE WFCAL(IP12, DK12, ECMS, FKSC, N12, WF)

引数の意味

IP12 1-2 系の識別情報 (長さ N12 の 1 次元配列) N12 から NLSJ への対応表

DK12 1-2 系の $1/\sqrt{\text{波数}}$ 。(長さ N12 の 1 次元配列)

ECMS 1-2 系の内部相対運動の運動エネルギー (長さ N12 の 1 次元配列)

FKSC 1-2 系の内部相対運動の波数 (長さ N12 の 1 次元配列)

N12 1-2 系の波動関数の数

WF 1-2 系の波動関数表 (2 次元の実数型配列)

WSPOT

束縛状態や散乱状態の波動関数を計算するためのポテンシャル表を計算し、V12(NR,2) という配列にポテンシャル表を返す。束縛状態を計算する場合には、ポテンシャルの深さを調節する必要があるので、固定的な部分と調節可能な部分とに分けておく。

SUBROUTINE WSPOT(EFAC, VP, ZZ, FLL, FLS, DR, NR, ISP2, V12, NRMX)

引数の意味

EFAC $2\mu/\hbar^2$; $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$

VP ポテンシャルパラメータの表 (2 次元の実数配列)。

VP(1,?) = 1 ならば深さは固定、 = 2 ならば後で決める

VP(2,?)=1 ならば Woods-Saxon, = 2 ならば Woods-Saxon の微分、 = 3 ならば Thomas 型

VP(3,?) : ポテンシャルの深さ [MeV]

VP(4,?) : 半径パラメータ [fm]

VP(5,?) : diffuseness [fm]

VP(6,?) : 電荷半径パラメータ [fm]。

ここで、? は 1 から 5 のどれかをとる。即ち、最大 5 個のポテンシャルの重ね合わせで実際のポテンシャルが与えられる。

ZZ 粒子 1 と 2 の原子番号の積

FLL 1-2 系の軌道角運動量を l とすると、 $l \times (l + 1)$ を保持

FLS 1-2 系の $2l \cdot s$ 。 l は (1-2) 系の相対運動軌道角運動量、 s は LS 結合ならばチャネルスピン、 j - j 結合ならば 粒子 1 のスピンである。

DR ポテンシャル表の動径刻み幅 [fm]

NR ポテンシャル表の点数

ISP2 調節可能な深さのポテンシャルを含むならば 1、 含まなければ 0 を返す

V12 ポテンシャル表 (2 次元の実数型配列)

第 1 添字は、 動径の大きさに対応する

第 2 添字 = 1 は固定的なポテンシャル。クーロンポテンシャルと遠心力ポテンシャルも含まれる。

第 2 添字 = 2 の領域は、 深さを調節する部分のポテンシャル

数値計算の効率を上げる為に、 積分公式に関係する因子 $2\mu/\hbar^2 (DR)^2/240$ が掛けられる。

NRMX ポテンシャルが小さな値になる点。 束縛状態波動関数は、 散乱状態波動関数の様に大きな半径まで計算する必要がないという事実に対応する為に必要である。

束縛エネルギーを与えて、ポテンシャルの深さを決定するには ISP2=1 でなければならない。 換言すれば、「 4 行目」の入力 VPS(1,*,*) に ± 2 が含まれていなければならない。

WSBND

与えられたポテンシャルの下での 1-2 系の束縛状態波動関数を計算して WF に書き込む。

```
SUBROUTINE WSBND(EFAC, FKE, ISBE, BE, VFAC, NS, LS, V12,  
+                DR, NR12, NRMX, WF)
```

引数の意味

EFAC $2\mu/\hbar^2$

FKE 波数とクーロンパラメータの積

ISBE = 0 ならばポテンシャルの深さを、 = 1 ならば束縛エネルギーを探す

BE 束縛エネルギー (の推定値)

VFAC 非固定部分のポテンシャルの深さに掛かる因子。(出力)

NS 原点と無限遠点を含まない、波動関数の節の数。

LS 1-2 系の軌道角運動量

V12 ポテンシャル表 (2次元の実数型配列)

DR 動径の刻み幅 [fm]

NR12 ポテンシャル表の動径方向の点数

NRMX 核力ポテンシャルが小さくなる半径

WF 波動関数表。

束縛状態波動関数の振幅が6桁程度小さくなる半径まで波動関数を計算する。この点数が WF(0) に返される。ポテンシャルの行列要素計算に関する積分点の節約に使用している。

解くべきは、以下の方程式である。

$$\frac{d^2}{dr^2} u_\ell(r) = \left(\kappa^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r) \right) u_\ell(r) \quad (1.119)$$

$V(r)$ が常識的な意味でのポテンシャルである。従って束縛状態を計算したいならば、 $V(r)$ は全体としては、負の部分がないといけない。プログラム中では、 $V(r) = V_{12}(r, 1) + (VFAC) \times V_{12}(r, 2)$ である。ここで、 $V_{12}(r, 1)$ と $V_{12}(r, 2)$ は固定的及び深さを調節可能なポテンシャルである。返されるのは、 $u_\ell(r)$ の表と、VFAC または BE である。

波動関数 $u_\ell(r)$ の符号は、原点付近で正と定義している。

WSRES

共鳴状態に関する情報を調べる。

```
SUBROUTINE WSRES(EFAC, LS, FKE, DR, NR, V12, WK, FKN, FKX, NRES,  
+                FKRES, WKRES)
```

与えられたポテンシャルに対して、共鳴状態の数及びそれらの波数と幅を計算する。この副プログラムに関しては wsf のマニュアルを参照せよ。

引数の意味

EFAC $2(\text{reduced mass})/\hbar^2$ [MeV⁻¹ fm⁻²]

LS 軌道角運動量 [\hbar]

FKE (波数) \times (クーロンパラメータ)

DR ポテンシャル表の刻み幅 [fm]

NR ポテンシャル表の点数

V12 ポテンシャル表

WK 作業領域、ここに散乱状態波動関数が入る

FKN, FKX 入力されている、波数積分の下限と上限 [fm^{-1}]

NRES 共鳴状態の数 (出力)

FKRES 共鳴波数 (出力)

WKRES 共鳴幅 (出力)

実際に、ポテンシャル障壁の高さより小さい波数に対応する共鳴があったとしても、これが波数平均すべき範囲 [FKN, FKX] 外に存在するならば、共鳴は存在しない事にする。

下請け副プログラムとして、WSINT を使用する。

WSINT

散乱状態波動関数と位相のずれを計算する

SUBROUTINE WSINT(FK, ETA, LS, NR, DR, V12, WK, CD, SD)

引数の意味

FK 散乱状態の波数 [fm^{-1}]

ETA 散乱状態のクーロンパラメータ

LS 軌道角運動量

NR ポテンシャル表の点数

DR ポテンシャル表の刻み幅

V12 ポテンシャル表

WK 作業領域、ここに散乱状態波動関数が入る

CD, SD 位相のずれの余弦 $\cos \delta(k)$ と正弦 $\sin \delta(k)$

共鳴状態のパラメータを調べるならば、wsf プログラムを使用すべきである。
CWF 副プログラムを下請けとしている。後出。

WSSCT

散乱状態波動関数を計算し、WF に書き込む

```
SUBROUTINE WSSCT(FK0, FK1, RK, WK, LS, FKE, DR, NR, V12, WF,  
+                NKS, DELTA, SUM, WFK)
```

引数の意味

FK0, FK1 最小(大) 波数 [fm^{-1}] この区間に共鳴が存在しない時は NK 本の波動関数を計算し、これらを重ね合わせて平均している

RK, WK 共鳴波数と、 \hat{u} を計算する時の半幅 [fm^{-1}]。共鳴が存在しないならば、 $RK < 0$ としている。共鳴が存在するならば、FKR と WKR の入力に対する説明の様に、3 区間に分割して平均積分を実施している。

LS 1-2 系の内部運動の軌道角運動量 [\hbar]

FKE 波数とクーロンパラメータの積 [fm^{-1}]

DR 動径の刻み幅 [fm]

NR 動径の点数

V12 散乱ポテンシャルと $2\mu/\hbar^2$ の積。更に遠心力ポテンシャルも加えられている。

WF CDCC の意味での特定のチャンネルの散乱状態波動関数

NKS 波数積分に使用した波動関数の本数

DELTA このチャンネルの位相のずれ [rad]

SUM \hat{u} のノルムの 2 乗。1 であるのが望ましい。

WFK 作業領域： 大きさ NR の実数型配列

位相のずれを計算するから、クーロン波動関数評価プログラム CWF を何回も呼び出す。

VDCAL

粒子 1-3, 2-3 間の光学ポテンシャル V_{13} , V_{23} とその 1 階微分の数表を計算し、VD(2, 0:NVD, 4) に書き込む。

```
SUBROUTINE VDCAL(ISP, VPL, NVD, VD)
```

引数の意味

ISP KNTL(5) の値。ポテンシャル表の出力制御

VPL ポテンシャルパラメータを与える (3次元実数型配列)

NVD 配列 VD の第2添字の実際の大きさ

VD ポテンシャル表 (3次元の実数型配列)

第1添字: = 1 ならばポテンシャル、= 2 ならば微分

第2添字: r_{13} 又は r_{23} に対する動径部分の点数

第3添字: = 1 ならば 1-3 系の実部、= 2 ならば虚部ポテンシャル

第3添字: = 3 ならば 2-3 系の実部、= 4 ならば虚部ポテンシャル

従ってスピン・軌道力を追加したければ、この第3添字を増やせばよい。

これ以外に 共通領域 /V3MUL/ を経由した以下の変数がある。ここで、AR, RR, NRL は2次元の配列であり、第1添字 = 1 は実部、= 2 は虚部を表し、第2添字 = 1 は 1-3 系、= 2 は 2-3 系を表す。AR, RR パラメータは、個別のポテンシャルの深さの絶対値で荷重平均している。

AR ポテンシャルの深さの絶対値を荷重としたばやけパラメータ [fm]

RR ポテンシャルの深さの絶対値を荷重とした半径パラメータ [fm]

NRL ポテンシャルの大きさが6桁落ちる半径に対応する点数

DRVD ポテンシャル表の半径の刻み幅。AR の $1/4$ [fm]

RVDX 最大半径 [fm]

出力されるポテンシャル表の動径部分の刻み幅 DRDV は、当面は対応する部分の AR の $1/4$ とした。

ポテンシャルの内挿には、1階微分を利用した区分的3次式を利用している。

VNEXP

核力ポテンシャルの多重極展開をし、VN に書き込む。粒子3の重心から(粒子1と2)の重心への距離 R 及び粒子2から粒子1への距離 r を与えて、ポテンシャルの多重極展開をガウス積分で行う。ここでは、 R を極軸と取っている。粒子1と2の重心から、粒子1へのベクトルと r との比例係数 $\alpha = m_2/(m_1 + m_2)$ (粒子1の場合) を与え、これが負ならば粒子2のポテンシャルと解釈している。

SUBROUTINE VNEXP(R, RSA, LMAX, NR, RR, AR, DR, VD, VN)

引数の意味

R ((1+2)-3) 系の重心位置の動径座標

RSA (1-2 系の相対座標) \times (質量因子、 α or $\alpha - 1$)

LMAX 最大多重極度 λ_{max}

NR 現在の系 (1-3 又は 2-3、実又は虚部) に対する NRL。

RR 現在の系 (1-3 又は 2-3、実又は虚部) に対する RR。

AR 現在の系 (1-3 又は 2-3、実又は虚部) に対する AR。被積分関数の変化の目安を与える

DR ポテンシャル表の刻み [fm]

VD 現在の系 (1-3 又は 2-3、実又は虚部) に対するポテンシャル表

VN 多重極展開の出力

RSA < 0 ならば、計算結果に $(-)^{\lambda}$ を掛けている。VDCAL のコメント参照。

VCEXP

一様帯電球のつくるクーロンポテンシャルの多重極展開を行い CE に書き込む。R, RSA, LMAX は VNEXP 副プログラムと共通である。

SUBROUTINE VCEXP(R, RSA, LMAX, RC, COU, CE)

引数の意味

R ((1+2)-3) 系の重心位置の動径座標

RSA (1-2 系の相対座標) \times (質量因子、 α or $\alpha - 1$)

LMAX 最大多重極度 λ_{max}

RC 現在の系 (1-3 又は 2-3) に対する電荷半径

COU 現在の系 (1-3 又は 2-3) に対する $Z_i Z_3 e^2 / (4 \pi \epsilon_0)$

CE 多重極展開の出力

LGCAL

Gauss-Legendre 積分公式の座標と荷重を計算する。

SUBROUTINE LGCAL(NMAX, XGTAB, WGTAB)

引数の意味

NMAX 最大次数

XGTAB 座標の値の表

WGTAB 荷重の表

以下の積分公式を想定している。

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \sim \sum_{k=1}^n w_k^n f(x_k^n) \quad (1.120)$$

ここで、 n は近似の次数、 x_k^n は関数値を計算する座標、 w_k^n は、関数値にかかる荷重である。この副プログラムでは、 $n = 2, 4, \dots, \text{NMAX}$ の範囲で、対称性を考慮して x_k^n, w_k^n を半分だけ計算して返している。XGTAB, WGTAB には計算結果が、間をおかずに詰め込まれている。

VCUPOL, INTHP, INTHP1, VCINT

一様帯電球に対する真空偏極の等価ポテンシャル Uehling pot. を計算する。VCUPOL が制御プログラム。

INTHP は積分の制御プログラム。

収束を見ながら、適応的に積分区間を細分化する。

INTHP1 は、ガウス・ルジャンドル法で実際の数値積分を実行する

VCINT は被積分関数を返す関数副プログラム。

多分 対数を用いた変数変換をして、収束性を加速していた。

HCTK40

全ての J^π に対して CDCC 結合方程式を解いて、S 行列を出力する。出力される S 行列は、分解過程に対しては、重心運動の波数の幅の平方根で割ってある。PTP (2.19b) を参照

もう少し、詳しく機能を書くと、

0 LMAX, NCC, NCWF や KCC の最大値を調べ、必要な配列を確保する

1 全ての結合状態に対する量子数を割り当てる。

2 全系の J^π に依存しない数表 (1-2 系に関係した幾何学因子、クーロン波動関数、3 次スプラインの為の補助数値、クーロン分解を考慮しない場合のクーロンポテンシャルや Uehling potential) を準備する。

3 全系の J^π を与えて、以下の量を計算する

- 3-1 結合状態の数 KCC を数えあげる。関係する行列要素の数は MCC である。行列要素を今後は複素数としてあつかう。
- 3-2 KCC 個の状態に対して、NCC 個の状態との対応関係を配列 IDCC に書き込む。KCC 個の個別の状態の軌道角運動量を LCC に書き込む
- 3-3 MCC 個の行列要素とその 2 階微分を計算し、配列 FCC に書き込むこの段階で、幾何学的因子を掛けて λ で足し込む。
- 3-4 KCC 次元の連立微分方程式を内部から解き、接続点での関数値とその微分を複素配列 $U(*,*,1)$, $U(*,*,2)$ に書き込む
- 3-5 上記配列と、クーロン波動関数を用いて作られる行列を LU 分解する。この行列の条件数の推定値 CNUM も計算する。
- 3-6 物理的な境界条件に対応する S 行列を計算し、吸収率と共に出力する。この時、散乱状態に対応する S 行列は、波数ピンの幅の平方根で割っておく。

SUBROUTINE HCTK40(IP12, DK12, ECMS, FKSC, IPFF, LAMNX, FFTAB)

引数の意味

IP12 1-2 系の識別情報 (N12 個の整数型 1 次元配列)。N12 から NLSJ への対応表

DK12 1-2 系の $1/\sqrt{\text{波数幅}}$ (1 次元 N12 個の整数配列)。但し、束縛状態に対しては 1 とする。

ECMS 1-2 系の内部相対運動の運動エネルギー (N12 個の整数型 1 次元配列)

FKSC 1-2 系の内部相対運動の波数 (N12 個の整数型 1 次元配列)

IPFF (N1,N2) に対する FFTAB 配列へのポインター

LAMNX 特定の 1-2 状態間結合に対し λ の情報へのポインター (2 次元整数型配列)

第 1 添字 = 1 は λ の最小値、第 1 添字 = 2 は最大値、第 1 添字 = 3 は幾何学因子の 1-2 系依存部分の値。第 2 添字は、異なるスピン状態の組合せ (N1, N2) 対の識別番号。

FFTAB 全てのポテンシャルの行列要素の表 (2 次元の実配列)

第 1 添字は 0 から NRFF をとり、R に対応する。第 2 添字は NFF 個あり、全てのチャンネル間 結合要素の数。

関係する配列の説明

CWFTAB クーロン波動関数の表。3 次元配列。第 1 添字は軌道角運動量を示す。第 2 添字は 1 から 4 までをとる。1 ならば F、2 ならば G、3 ならば F の微分、4 ならば G の微分を保存する。微分は、位置座標 R に関してとられる。第 3 添字は、異なるクーロンパラメータに対応する。

IDCWF NCC 個の 1 次元配列。全ての結合チャンネルが、どのクーロン波動関数を利用すべきかを覚えている。

IDCC KCC 個の 1 次元配列。特定の J^π を与えた時の KCC 個のチャンネルが、NCC 個のどの状態かを記録している。

IDSWF NCC 個の 1 次元配列。NCC 個の $(1+2)-3$ 系の散乱状態波動関数が、N12 個の $(1-2)$ 系波動関数のどれに対応しているかを記録している。

L3CM NCC 個の 1 次元配列であり、軌道角運動量の情報を記録している。実際の軌道角運動量は、 $2 \times (J_{\text{tot}})$ を加え、2 で割った値である。

FKCM NCC 個の 1 次元配列。 $((1+2)-3)$ 系重心運動の波数が書き込まれている。

LCC KCC 個の 1 次元配列であり、実際の軌道角運動量を保持している。

FCC 3 次元配列であり、実際に結合する全ての状態間の行列要素を保持する。ポテンシャルの行列要素は、HCTK44 迄は実配列だが、HCTK46 では複素配列としている。第 1 添字は 2 又は 4 までの値をとる。実配列ならば、1 と 2 で行列要素の実部と虚部を保持している。3 と 4 は (実部と虚部の 2 階微分)/6 を保持している。

第 2 添字は、独立な行列要素の数 (=MCC)。第 3 添字は、動径方向の点の数。

FFTAB では第 1 添字が動径方向の点数であるが、FCC では最後の添字になっている事に注意！

U HCTK40 で宣言される 3 次元複素数の配列。最初の 2 組みの添字は KCC \times KCC の行列であり、独立な波動関数の値を想定している。

第 3 添字は 1 から 5 をとる。3 から 5 の値は、2 階微分方程式の Stömer の解法の 3 個の点での波動関数の値に対応する。第 3 添字が 3 の配列は、S 行列の計算に際し作業用のベクトルとして使用される。

第 3 添字が 1 と 2 の配列のは、最終的な接続点での波動関数の値と導関数の値を持って、HCTK46 から帰ってくる。この値は、HCTK48 で S 行列を計算するのに利用する。

S 行列を計算する過程では、第 3 添字が 2 の配列は作業領域となり、LU 分解に使われる。

V 大きさが KCC の 1 次元複素配列。波動関数と相互作用行列要素の積を計算する時の作業領域である。

VU 大きさが KCC \times KCC の 2 次元複素配列が 8 個集まった 3 次元配列。Stömer の 8 点法での連立方程式の解法に利用される、相互作用と波動関数の積を保存するのに使用される。

下請けプログラムに付いて

CWFX, CWF, HCTK4M, XSCAL, HCTK42, HCTK44, HCTK46 HCTK48 等を下請けにしている。

HCTK4M

HCTK40 で allocate すべき配列の大きさの上限を決める。

allocate される配列は上で説明した CWFTAB(ICW)、IDCWF(NCC)、IDCC(KCC)、IDSWF(NCC)、L3CM(NCC)、FKCM(NCC)、LCC(KCC)、FCC(IFCC)、U(NU)、V(KCC)、VU(NVU) 以外には、以下の通り。

配列名 (大きさ) 機能

E3CM(NCC) ((1+2)-3) 系の重心運動の運動エネルギー

VCP(0:NRFF) ((1+2)-3) 系のクーロンポテンシャル

W3SP(NRFF) 3 次スプライン計算の補助数表

ZCS(NZS) 1-2 系の幾何学的因子

```
SUBROUTINE HCTK4M(JTMAX, FKSC, LMAX, FKDR, NR3, LAMNX)
```

変数の意味

JTMAX 全系の角運動量の 2 倍 [\hbar]

FKSC 1-2 系の波数 [fm^{-1}]

LMAX 最大軌道角運動量 [\hbar]

FKDR (1-2) 系基底状態に対応する波数と積分刻み幅の積

NR3 積分点数

LAMNX 特定の 1-2 状態間結合に対し λ の情報へのポインター

XSCAL

連立微分方程式を解き始める半径を計算する。

```
SUBROUTINE XSCAL(LL, X S)
```

変数の意味

LL 軌道角運動量を与える。

XS 無次元化した、半径を返す。

$x j_L(x)$ 、ここで $j_L(x)$ は球ベッセル関数、の最初にピーク値の 10^{-8} の値を与える最初の半径を計算している。

HCTK42

1-2 系の幾何学的因子、((1+2)-3) 系のクーロン波動関数及び 3 次スプライン計算の補助数表を計算する。

```
SUBROUTINE HCTK42(IDCWF, ICW, CWFTAB, FKCM, ETATAB,  
+                LMAX, LAMNX, W3SP, ZCS)
```

変数の意味

IDCWF クーロン波動関数に対するポインター表

ICW 配列 CWFTAB の大きさ

CWFTAB クーロン波動関数表

FKCM 重心運動の波数 [fm^{-1}]

ETATAB クーロンパラメータの表

LMAX 最大軌道角運動量 [\hbar]

LAMNX 第 1 配列が 3 の時は、ZCS 配列へのポインター

W3SP 3 スプライン計算の補助数表

ZCS 1-2 系幾何学因子の数表

HCTK 4 0 を見やすくするために分離した。下請けプログラムは ZC36J, SJTAB, CWFX である。

CWFX

クーロン波動関数を計算する元請け副プログラム。CWF を下請けにする。

```
SUBROUTINE CWFX(LMAX, ETA, RHO, FK, CWFTAB)
```

引数の意味

LMAX 最大軌道角運動量。0 からこの値までのクーロン波動関数とその微分が返される

ETA クーロンパラメータ

RHO 動径座標と波数の積: 無次元

FK 波数 [fm^{-1}]

CWFTAB 計算結果を返す 2 次元実配列

CWF

クーロン波動関数を計算するプログラム。

SUBROUTINE CWF(L, E, X, F, G, FP, GP)

引数の意味

L 最大軌道角運動量

E クーロンパラメータ

X ρ , 動径と波数の積

F 原点で正則なクーロン波動関数 (1 次元実数配列)

G 原点で正則でないクーロン波動関数 (1 次元実数配列)

FP F の ρ による微分 (1 次元実数配列)

GP G の ρ による微分 (1 次元実数配列)

下請けは、CF3, CF2, COUPS と FJNCAL。

CF3 クーロンパラメータ、 ρ と大きな軌道角運動量 L の値を与え、正則なクーロン波動関数の比 $F(L+1)/F(L)$ を返す。

CF2 L=0 に対する、外向きクーロン波動関数の対数微分を計算する

COUPS L=0 に対する 正則なクーロン波動関数を級数展開により計算する

FJNCAL クーロンパラメータが 0 の場合のクーロン波動関数を計算する。球面ベッセル $j_l(x)$ と球面ノイマン関数の符号をかえたもの $-n_l(x)$ の x 倍。

ZC36J

1-2 系粒子の個別スピン I, I' 、関与する スピン S 、粒子の軌道角運動量 ℓ, ℓ' を与えて、多重度 λ に対する幾何学的因子の表を ZC に返す。

SUBROUTINE ZC36J(LF, JF, LI, JI, IS, LO, L1, ZC, NW, W)

ZC coeff. PTP, pp43 (2.22b) を相対運動の部分と重心運動の部分に分け、下記の量を、指定された λ の範囲で小さい順に配列 ZC に書き込む。

$$i^{l_i+\lambda-l_f} \hat{l}_i \hat{l}_f \begin{pmatrix} l_f & \lambda & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_f & j_f & s \\ j_i & l_i & \lambda \end{Bmatrix} \quad (1.121)$$

このマニュアルの付録を参照。

引数の意味

LF l_f の 2 倍

JF j_f の 2 倍

LI l_i の 2 倍

JI j_i の 2 倍

IS s の 2 倍

L0 λ の最小値を入力する。(2 倍していない)

L1 λ の最大値を入力する。(2 倍していない)。更にこれらの値は外部入力である。指定されていない範囲の λ に対する値は返さない。

ZC 計算結果を返す 1 次元配列。L0 から L1 迄の 1 とびの λ に対する値が ZC には連続的に書き込まれる。

NW 作業用配列 W の大きさ

W 作業用 1 次元実配列。6j 係数の計算に使用される

下請けプログラム

VC0TAB

全ての磁気量子数が 0 の場合の 3j 係数を配列 VC0 に書き出す。

$$\begin{pmatrix} l_f & \lambda & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.122)$$

SUBROUTINE VCOTAB(LFW, LIW, L0, L1, VC0)

引数の意味

LFW l_f の 2 倍

LIW l_i の 2 倍

L0 λ の下限 (2 倍していない)

L1 λ の上限 (2 倍していない)

VC0 3j の表が返される実 1 次元配列

L0 から 1 跳びに L1 迄の λ の範囲で、連続的に VC0 配列に書き込まれている。

計算方法は別途説明する。

SJTAB

以下の 6j 係数を λ 毎に計算し、配列 SJ に書き込んで返す。

$$\left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & \lambda \end{array} \right\} \quad (1.123)$$

SUBROUTINE SJTAB(J1, J2, J3, L1, L2, NS, SJ)

引数の意味

J1 j_1 の 2 倍

J2 j_2 の 2 倍

J3 j_3 の 2 倍

L1 l_1 の 2 倍

L2 l_2 の 2 倍

NS 配列 SJ の大きさ

SJ 結果を書き込む 1 次元実配列

6j 係数の意味で許される全ての λ に対して 6j の値を計算して配列 SJ に値が代入される。ZC36J では、パリティ CG に対する制限が加わるので余分な 6j は落さないといけない。

HCTK44

現在の (全角運動量とパリティ J^π を指定した) 状態での、CDCC 微分方程式に対する KCC 個の状態間の行列要素とその (2 階微分/6) を計算し、FCC に書き込む。

SUBROUTINE HCTK44(JT2, JPAR, ISCOU, LAMNX, ZCS, IPFF, FFTAB,
+ IDCC, E3CM, VCP, W3SP, FCC)

変数の意味

JT2 全系の角運動量の 2 倍

JPAR 全系のパリティ

ISCOU 一様帯電球のクーロンポテンシャルを加えるかどうかの旗。1 ならば、対角成分に加える。

LAMNX 特定の 1-2 状態間結合に対し λ の情報を保持する (2 次元整数型配列)

第 1 添字 = 1 は λ の最小値、第 1 添字 = 2 は最大値、第 1 添字 = 3 は ZCS 配列へのポインター

ZCS 1-2 系の幾何学因子の数表

IPFF NLSJ 個の状態の組合せ情報の先頭番地へのポインター

FFTAB 全てのポテンシャルの行列要素の表 (2 次元の実配列)

第 1 添字は 0 から NRFF をとり、R に対応する。第 2 添字は NFF 個あり、全てのチャンネル間結合要素に対応する。

IDCC 現在の結合状態の ID 番号表 (KCC 個の整数型 1 次元配列)

E3CM ((1+2)-3) 系重心運動の運動エネルギーの表

VCP 一様帯電球のクーロンポテンシャル。必要に応じて Uehling potential も加えてある。

W3SP 3 次スプラインの幾何学的補助配列

FCC 現在の結合行列要素の表 (3 次元の実配列)

第 1 添字は 4 個あり、実部・虚部・実部の及び虚部の (2 階微分/6) を識別する

第 2 添字は 0 から NRFF をとり、R の値に対応する

第 3 添字は 1 から MCC をとり、全ての結合要素の数に対応する

結合要素の R の意味での内挿を容易にするために、3 次のスプラインを利用している。その為に、FCC には (2 階微分)/6 も書き込んでいる。

HCTK46

連立方程式を解き、S 行列に変換してファイルに出力する。

SUBROUTINE HCTK46(EFAC, H, NRMAX, LCC, FCC, RFTAB, U, V, NS0, VU)

変数の意味

EFAC $2 * (\text{reduced mass}) / \hbar^2$

H 数値積分の刻み幅 [fm]

NRMAX 数値積分の点数

LCC 現在の結合チャンネルの軌道角運動量の表。1 次元整数配列

FCC チャンネル間結合要素の表。3 次元複素行列

RFTAB R table. 1 次元実配列

U 波動関数を書き込む 3 次元複素配列。U(*,*,1), U(*,*,2) には接続点での波動関数とその微分が返される。U(*,*,3), U(*,*,4), U(*,*,5) は作業領域

V 作業用複素 1 次元配列

NS0 波動関数の初期値が与えられる半径 (DR3*NS0) を与える整数。内部で計算される。

VU 複素 3 次元作業用配列

Stömer の 8 点法を用いて、動径方向の微分方程式 $du/dR^2 = V u$ を解く。初期値付近では、一つずつ次数を上げている。3 点目では、Cowell 法を用いて少しだけ計算精度を稼いでいる。解法の詳細は、P. Henrici 著、"Discrete Variable Methods in Ordinary Differential Equations", John Wiley and Sons, Inc. NY. 1962 の第 6 章を参照。

VUCAL

特定の動径位置 R と波動関数の値 u を入力し、行列要素 V を 3 次のスプライン関数を用いて内挿し、両者の積 $V u$ を配列 VU に返す。実際には、 u は KCC 個の全ての独立解に対応するから、KCC× KCC の複素配列にする。

SUBROUTINE VUCAL(LCC, R, RR, VFAC, RFTAB, FCC, U, VU, V)

変数の意味

LCC 現在の結合チャネルの軌道角運動量の表。 1 次元整数配列

R 現在の動径位置

RR 現在の $1/(\text{動径位置の 2 乗})$ に積分因子を掛けた量

VFAC $2 * (\text{reduced mass})/\hbar^2$ に刻み幅の 2 乗と積分因子を掛けた量

RFTAB R table. 1 次元実配列

FCC チャネル間結合要素の表。 3 次元複素行列

U 現在位置での波動関数の値。 (KCC x KCC) の 2 次元複素配列

VU U とポテンシャルの行列要素の積。 (KCC x KCC) の 2 次元複素配列

V 作業用配列。 1 次元 KCC 個の複素配列

UGSOC

独立解ベクトルの直交性が悪くなりかけた時に、解を Gram-Schmidt の方法で直交化し、独立性を回復する。

直交化は、数値積分に使用する過去のデータに対しても行わねばならない。

SUBROUTINE UGSOC(N, IU, NU, U, NV, V, IP, W)

変数の意味

N 行列 U と V の次数

IU U の第 IU 番目の (N x N) 行列を直交化する。

NU 行列 U の第 3 添字の大きさ

U 実際の行列

NV 行列 V の第 3 添字の大きさ

V 2 階微分方程式の駆動項。現在及び過去の情報も直交化と同じ操作をする必要がある。

IP 作業用 1 次元整数配列。本当に直交化が必要かどうか判断するのに使用している様だ。

W 作業領域

直交化する場合、列ベクトルのノルムの大きな順に直交化を行う方が精度が高いと予想されるから、旧版を書き換えた。

下請けプログラムは、HPSDEC

HPSDEC

ヒープソート法で、入力配列データ X を大きい順に並べかえる。並べ変えた順を記録しておく。

SUBROUTINE HPSDEC(N, II, X)

変数の意味

N 並べ変える対象の数。

II 並べ変えた順を記録する配列

X 大きい順に並べ変えるべき配列

HCTK48

U に書き込まれた接続点での波動関数とその微分を用いて S 行列を計算し、SMAT に書き、ファイルに出力する。

SUBROUTINE HCTK48(K9, JT2, JPAR, IDSWF, DK12, IDCC, LCC, LMAX,
+ IDCWF, CWFTAB, FKCM, U, NSS, IDGS, SMAT, IP, W, SJ)

変数の意味

K9 KNTL(9), S 行列の出力制御

JT2 全系の角運動量の 2 倍

JPAR 現在の全系のパリティ

IDSWF NCC 個の状態の対応する (1-2) 系波動関数の識別番号

DK12 NCC 個の状態の波数幅の平方根の逆数

IDCC 現在結合している状態毎の全独立状態中での識別番号

LCC 現在結合している状態が、現在持っている軌道角運動量

LMAX 重心運動の最大軌道角運動量

IDCWF NCC 個ある独立状態に対応するクーロン波動関数の識別番号

CWFTAB 独立なクーロン波動関数の表。3 次元実配列。

FKCM 各チャンネルの波数を保存する 1 次元実ベクトル。

U 3 次元複素配列。U(*,*,1) に接続点での独立な波動関数、U(*,*,2) にはその微分を書き込んで HCTK48 が呼ばれる。

NSS 入射チャンネルの数。

IDGS 入射粒子基底状態の識別番号表

SMAT S 行列の値を書き込む、2 次元複素配列

IP 作業用整数型 1 次元配列

W 作業用複素 1 次元配列

SJ 作業用複素 1 次元配列

簡単な解説

接続点 ($R_3 = (NR3-2) \times DR3$) での独立解を与える列ベクトル u_i , ($i = 1, 2, \dots, KCC$) を横に並べて行列 U を作る。 U を R_3 で微分した行列を U' とする。正しい境界条件を持つ散乱状態波動関数は、独立解ベクトル u_i を重ね合わせて作る。第 j 番目のチャンネルにのみ入射波を持つ解の重ね合わせの係数を W_{ij} とし、この W_{ij} を成分として持つ行列を W と書く。第 j チャンネルの接続点での外 (内) 向き波クーロン波動関数 $O_j(I_j)$ を対角要素とする行列を $O(I)$ と書く。即ち、 $O_{ij} = O_i \delta_{ij}$, $I_{ij} = I_i \delta_{ij}$ である。

速度の比の平方根を掛けた S 行列を \hat{S} と書く。即ち $\hat{S}_{ij} = \sqrt{K_i/K_j} S_{ij}$ 。これらは、次の接続関係を満足する。

$$UW + O\hat{S} = I, \quad U'W + O'\hat{S} = I' \quad (1.124)$$

左の式に O' 、右の式に O を掛けて差を作る。行列 O と O' は対角成分しか持たないので、交換可能である。クーロン波動関数に対するロンスキーの関係式を利用すると、

$$(O'U - OU')W = 2iK \quad (1.125)$$

ここで、右辺 K は各チャネルの波数を対角要素とする行列である。この式を 荷重行列 W に対して解く。この W を用いて \hat{S} を計算する。実際には、 $(O'U - OU')$ を LU 分解し、入射波があるチャネルに対する (NSS) 個の解ベクトルのみを計算すれば良い。後は、速度の平方根の比 $\sqrt{K_i/K_0}$ を \hat{S} に掛ければ S 行列が計算出来る。

CLULEQ

N 行 N 列の複素行列 CA を LU 分解し、分解された配列を元の CA に書き戻す。但し、左下三角行列 CL の対角成分は 1 であり、この 1 は何処にも記録されていない。右上三角行列 CU の対角部分には、本来の対角要素の逆数が書き込まれている。この CU の値は標準的では無いので要注意である。CA の条件数の推定値が CND に返される。

SUBROUTINE CLULEQ(N, CA, CND, IP, CW)

変数の意味

N 行列 CA の次数

CA 複素 (N x N) 行列

CND 条件数の推定値

IP 枢軸選びに使用する作業用 1 次元整数配列。CLEQ1 で使用するので、中身を変更してはいけない。

CW 条件数の推定に使用する作業用の複素 1 次元配列

整数配列 IP と複素配列 CW は作業領域である。CW の中身は保存する必要は無い。

CLEQ1

CLEQ 1 は、線形方程式 $C \times x = b$ を解く。但し、行列 C は既に CLULEQ により LU 分解されている必要がある。複素 1 次元配列 CB は、呼出時にはベクトル b が書き込まれていて、解ベクトル x が返される。

SUBROUTINE CLEQ1(N, C, IP, CB)₈₆

変数の意味

N 行列 C の次数

C 複素 2 次元行列。既に CLULEQ で L/U 分解されている事

IP 上記 CLULEQ で使用した枢軸選びの作業用配列

CB 問題となる 1 次元複素配列を入力とし、解ベクトルが返される

FORTTRAN の自由形式の入力形態に関するメモ

数値データを入力文 READ(5,*) で読む事を想定している。入力は一変数又は複数の数値データに限る。数値の表現は通常のアラビア数字を用いての整数や実数の表現及び実数の直後に文字 E(小文字 e も許容される) その直後に二桁の整数を書いたものとする。文字 E のかわりに、D(d) や場合に依っては Q(q) も許されるだろう。

入力並びに複数の変数が指定されているならば、数値と数値の間に区切り記号を置く事に依り、複数の数値も読み込める。

ここで、区切り記号としては、一変数又は複数の空白を使う事が出来る。一変数又は複数の空白に一つのコンマ(,) を含ませたものも、一つの区切り記号である。

もう一つの区切り記号としてスラッシュ(/) がある。スラッシュ(/) は、数値データの区切り記号であると共に、入力並びが終った事を示す。例えば、3 個の数値を読み込む予定でも、2 個の数値の後にスラッシュ(/) があれば、この時点で数値の読み込みを中止する。この場合、3 個目の入力並びにはデータが読み込まれず、古いデータが手付かずで残る。このデータは通常はゴミと考えられる。従って、入力ミスを防ぐために、読み込む前に default 値を定義しておくのが良い場合があるだろう。

入力並びの個数が 5 個だとし、一行に 3 個の数値データだけが与えられている時には、次の行が読み込まれる。特に継続行の指示はしない。

例えば、入力並びに大きな配列が書いてある様な場合には、複数の行に跨って書かれたデータも、一つの READ 文で読み込む事が可能である。

この事は、入力ミスを引き起こす事もありうる事を示す。このミス防止として、スラッシュを利用出来る。

スラッシュの後に、入力並びの変数名を書いたり、コメントを書いておくとも良いだろう。

整数変数の読み込みに対して、実数表現を使用するのは不可だが、実数変数に整数表現の数値を与えるのは可。

細かい注意をすると、実変数への入力が単精度実数表現だと、倍精度実数に変換される場合、有効数字の後半部分には、ゴミが入っていると思うべきである。

但し、この動作は compiler 依存である。

MPI メモ

計算を1台のCPUで行うと時間が掛かりすぎる時に、複数のCPUを用いて並列計算させる場合がある。アルゴリズムに依存して、並列計算が可能な場合とそうでない場合がある。ここには、粗結合の計算機で並列計算が可能であるとしてMPI使用の簡単なメモを置く。

vpn(virtual parallel machine) ならば、個別のCPUにプログラムを載せたり、認証作業といったやっかいな事があるが、MPI(message passing interface) はここでは、一つの計算機システムとして複数の(それも3桁以上といったある意味で多くの)CPUを配下にもつ場合を想定する。従って、一つのファイルシステムがあり、そこに一つのプログラムを書いておき、そのプログラムをMPI機能を提供するOS経由で起動すると、指定した数のCPUがその一つのプログラムを個別に走らせ始める。即ち、一つのファイルシステム上にあった実行形式プログラムや入力ファイル等は各CPUに送られ、このプログラムが個別のCPU上で実行される。個別のCPUへ起動すべきプログラムや入力データ等を送付するのはOSの仕事であるが、MPI起動後の各CPU間のデータのやりとりを制御するのは、利用者プログラムの責任である。

ここでファイルに関して以下の点に注意が必要だと思う。一つのファイルシステム上にあるプログラムを、例えば1000個のCPUが一斉に読みに行ったらどういう事が起こるだろうか？逆に書き込みを始めたら、ファイルの内容は混じりあってぐちゃぐちゃになってしまわないだろうか？個別のCPUが持つであろう局所的なファイルや記憶域とシステムとしての記録(記憶)域を区別する必要がある、これは計算機システム設計の問題である。即ち、MPIだけでは解決出来ない事もある。OSやコンパイラだけでは解決出来ない問題が控えている。

MPIは現在も規約が追加されているようであり、かなり複雑であるから僕の手には負えないので、hetak(mpihex)で使用している機能限定でのメモとする。

先ずMPI固有の変数を定義するファイルを、プログラム(多分主プログラム)の先頭付近で読み込む必要がある。

```
include 'mpif.h'
```

FORTTRANでは、大文字と小文字は区別しないのだが、mpif.hは小文字としておくのが安全らしい。これは、宣言文であるから、宣言文の位置におかねばならぬ。他の宣言文の先頭に置く事を要求するコンパイラがあるようだ。use文を使うならば、MODULE宣言の法に移すか、use文の後ろにおく。

次に、次の3個の文をMPIの最初の実行文として実行する。

```
CALL MPI_INIT(IERR)
CALL MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, NPROCS, IERR)
CALL MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, MYRANK, IERR)
```


最初の行は、MPI の開始宣言文。この文は一度どこかのプログラム単位で実行すると、時間的に後の計算実行に影響を及ぼす。即ち、ある時点で一回だけ呼んでおけばよい。

次の文は、MPI_COMM_WORLD という MPI の仮想的な作業空間に於ける CPU 数を確定する文である。ここでは、その数を NPROCS に返して来る。

OS は事前にこの数を知っていなければならない。例えばプログラムの実行開始を宣言する文のパラメータとして、利用者は OS に知らせておかねばならない。

因みに、MPI_COMM_WORLD というのは、mpif.h ファイルで内容が定義してある変数名であり、変更は不可。

第3番目の文は、この文を実行する個別の CPU が、自分の識別番号を OS から入手する。ここでは MYRANK という変数名に返される。最小値は0であり、1ずつ増える番号が割り当てられる。

NPROCS や MYRANK はプログラム単位だけで利用できる、いわゆる局所変数である。これらの変数の利用可能範囲 (scope) を広げたければ、共通領域の変数であるとか、モジュール変数として宣言しておく必要がある。

プログラムは、MYRANK と NPROC を知って、他の CPU 上で走っている自分と同じプログラムとの間で MPI_SEND, MPI_RECV という関数を呼び出してデータのやりとりをしたり、MPI_BCAST 関数で全体に通知 (broadcast) したりする。

MPI には、他の CPU の状態を把握するための関数は用意されていない。他の CPU との handshake は全て、現在走っているプログラムが、上に述べたような機能を組み合わせて、実現しなければならない。例えば共通の記憶域又は補助記憶装置上に、各 CPU が実行している手続き名や行番号を随時書き、他の CPU はその値を読み込んで全体の進行状況と自分の進行状態を調和させる。

hetak の MPI 版である mpihex では部分波毎の計算を並列に実行しているので、MPI の制御をしている CPU を例外として、他の CPU とのデータやりとりは一切していない。ある意味で、overhead が最小の並列計算である。

利用可能な cpu 数が部分波の数よりも多い場合には、J だけでなくパリティーに対しても並列計算をさせる

mpihex では、MYRANK を利用して、S 行列はそれぞれ別の名前のファイルへ書き出している。従って、個別の CPU が同一のファイルに何かを書き出す事は無い。

計算途中で異常事態が発生したら、先ず自分のプログラムを MPI から隔離し (MPI_COMM_WORLD から抜け出すのだらう)、必要に応じて、他の CPU 上のプログラムへも MPI を止める様に通知する必要があるだらう。

```
CALL MPI_ABORT(MPI_COMM_WORLD, 9, IERR)
CALL MPI_FINALIZE(IERR)
```

上の文が自分を切り離す文であり、全体に通知するのが下の文だったと思う。引数に登場する 9 は別の数でも良いと思います。

プログラムの正常終了時にも MPI_FINALIZE を呼び出して、OS に終了を告げる必要がある。

CDCC 方程式のチャネル間結合行列要素の計算について

簡単な場合には、CPU 資源の濫用ではあるが、個別の CPU が自分用の行列要素を別々に計算させる。しかし、時間を要する場合には行列要素の計算後、これをファイル (FFDUMP) に書き出して、後から利用する。この制御に KNTL(8) を使う。

この行列要素を一つの CPU だけが計算しその結果を残りの CPU に broadcast する事も考えられる。しかしこれでは、複数の CPU がそれなりの時間、遊んで仕舞う事になる。

もう少し複雑に考えると、行列要素の並列計算を考える事も可能である。どの CPU がどの部分を分担するかを決定する作業はかなり複雑だと思われるので、今のところ mpihcx には組み込んでいない。多分、ずっと組み込まないだろう。

第2章 おまけのプログラム

重イオン用 CDCC プログラム `hcx(hctak)` の付録プログラム

`mpis2s` MPI 使用時に出力される複数の S 行列ファイルを統合する。

`h2s` $KTRL(9) \geq 2$ とするところを、誤って 1 とした時に使うプログラム。

`kin3b` 三体崩壊の運動学

`opm` 中心力光学ポテンシャルを与えて、弾性散乱の微分断面積を計算する。このプログラムでは、`hctak` を使う前に微分方程式を解く時のパラメータ (動径の大きさと刻み幅や最大軌道角運動量や C 係数の収束性) の目安を得る事を目的として書いた。

`wsf` 中心力とスピン・軌道力を与えた時、このポテンシャルの散乱状態に共鳴が存在するかどうかを調べる事を目的とする。存在すれば、共鳴エネルギーと幅を計算する。

上記ポテンシャルの幾何学的部分を与え、深さ (の一部) は束縛エネルギーを再現するように決める事も出来る。

束縛状態波動関数に対し Fourier 展開して、波数依存性を出力する。

更に、散乱状態の位相のずれの波数依存性を出力する事も可能である。

`fjl` 連立微分方程式を解く時の初期値を与える最小半径の目安をきめる。

`xscal` 波数と最大半径の積を与えて、最大軌道角運動量を返す。

`pickff` `hctak` が標準的に出力するファイルから、特定のポテンシャルの行列要素を取り出す。

`elx` `hctak` は S 行列を計算するが、この S 行列を用いて弾性散乱の微分断面積を計算する。

`picks` `hctak` が出力した S 行列ファイルから、特定のチャンネルの S 行列要素を抜き出す。

`trix` `hctak` が出力する S 行列を用いて、入射粒子の分解過程に対する三重微分断面積を計算する。

`ft` 動径波動関数等の Fourier 変換

`openmp` メモ これはプログラムではない。複数の密結合 CPU の並列計算による計算速度の向上への利用を想定した `hctak` の利用の便に供する事を目的とした。現在のところ、`openmp` を `hctak` に組み込む予定は無い。

2.1 mpis2s

mpis2s プログラム

MPI 仕様の hctak の出力ファイル名は、複数の cpu からの出力が混じらない様にするために、hco?????, smt????? という様に名付けられている。ここで、????? は 5 桁の整数であり cpu 番号に対応する。cpu 番号が小さい場合には、0 が数字の前に来る (pad されている)。計算センターの運用により、更に extension が付加されているかもしれないがこれは hctak の仕様ではない。これらのファイルを一つに統合しなければ、次の計算が出来ない。mpis2s プログラムは、smt????? ファイルを 利用者が与えた名前の一つのファイルに統合して、後続の計算に供する事を目的としている。この統合されたプログラムは elx.f や trix.f の入力となりうる。

このプログラムを起動する前に、以下の準備が必要である。

統合すべき全ての smt????? ファイルを一つの directory に集めて、これらのファイル名を書いた表を作り、この表をデータとするファイルを作成し、このファイルに 20 文字以下の名前をつけて保存する。unix 系の OS ならば、先ず、以下のコマンドを使用する。
ls smt*>smtab この操作で smtab というファイルに 'smt' で始まる全てのファイルの情報が書き出される。

統合すべきファイル群に含まれる S 行列データの最小と最大の J 及びその増分、hctak への入力では JTMIN, JTMAX, JTINC、を確認しておく。

必要に応じて、smt????? ファイルに含まれる S 行列の部分集合を取り出す事も可能である。

mpis2s の使用法

実行形式のプログラムを、smt????? 及び上で作成した名前表ファイル (smtab) と同じ directory に、作りこれを起動する。入・出力ファイルは以下の通りである。

mpis2s.in 論理機番は 5。以下の三組の入力データを置く。

第 1 行目： 上記 smtab に対応するファイル名。(A20)

第 2 行目： 統合したデータを出力するファイル名 (A20)

第 3 行目： JTMIN, JTMAX, JTINC

JTMIN と JTMAX は 0 又は自然数であり、JTMAX は JTMIN 以上でなければならない。smt????? ファイル群から抽出したい S 行列要素の J(の 2 倍)の範囲を指定する。この 3 変数は FORTRAN の意味での自由書式である。更に、JTINC は偶数でなければならない。

smtab 実際は、上記 mpis2s.in の 1 行目で指定されたファイル名である。smt????? のファイル群に対する個別のファイル名の表であり、一行に一つのファイル名が先頭から余白を置かず書かれている事。先頭が smt で始まる必要はない。最大 20 文字

という制限がある。このファイルの論理機番は 2 6 に固定されている。

smt????? 当然ながら、S 行列の統合前のデータを保持したファイル群である。これらのファイルの内容は、hctak が出力したままであるべきだ。

これらのファイル群には、2 7 という論理機番が割り振られている。これらのファイルの名前は、特に 'smt' で始まる必要は無い。但し、2 0 文字以下の長さにしなければならない。

mpis2s.out このファイル名は固定であり、標準出力に割り当てられている。

統合された後の S 行列が書き込まれるファイル名は、mpis2s.in の 3 行目で指定し、2 8 という論理機番が割り振られている。STATUS 指示子は UNKNOWN であるから、存在すれば上書きされ、存在しなければ新しく作られる。

入力例

mpis2s.in は例えば次の様になっている。

```
smtab          file name of MPI-smatrix files
hst            file name to dump all the S matrix elements
0,1000,2       /JTmin JTmax JTinc
```

ここで指定された smtab ファイルの中身は以下の通りである。

```
smt00000.0
smt00001.0
*****
smt00126.120
smt00127.120
```

この例では、1 2 8 個のファイル名が並べられている。

これらは、実は理研の rice と呼ばれる計算機からの出力であり、.0 や .120 という拡張子は個別の計算をした cpu(core) の識別子であるようだ。一つの core に 8 個の cpu を含むと想像される。

個別の smt????? ファイルには、1-2 系のパラメータ (但し FFDUMP=0 or 1 の時)、(1+2)-3 系のパラメータ と個別の J に対する S 行列要素が書き込まれている。J に依存して cpu 時間も変化するので、小さな J の方が大きな J よりも計算時間を必要とする、負荷を均等に掛けるために個別の cpu はトビトビの J に対する S 行列要素を出力している。hst ファイルには、これらのデータを必要な順番に並べ直して書き込まれている。

従って、FFDUMP=2 として計算された場合の smt????? を集めただけでは 1-2 系パラメータ情報が不足する。並列計算が予定通り進まなかった場合には、S 行列要素も不足している。

これらの場合には、hst ファイルは未完成であり、警告が出力される。

標準出力への出力例

以下の出力が得られた。途中に書いてある日本語のコメントは説明の為に、後から追加したものである。

```
S2S: S-mat. name-table file=smtab
```

```
      JT2min JT2max JT2inc=    0    10000    2
```

この 2 行が、mpis2s.in で指定された内容である。

以下に 1 2 8 個の smt????? ファイルが順次開かれた旨の出力がある。

```
S2S: SMTAB=smt00000.0          opend
```

```
JT2N < JT2min !
```

この警告は、mpis2s での入力では JT2MIN の値を 0 と指定しているのに、smt00000.0 ファイルには 32 から 10000 迄しか計算していない事に対してなされた。

```
NJ=4984  KX= 303  NHF= 2397785 allocated
```

この上の行は、1 行が 7 5 文字の配列を 2397785 個用意した事を報告している。

これだけの主記憶が用意出来ないと、このプログラムは正常に動作しない。

```
S2S: SMTAB=smt00001.0          opend
```

*** ここに smtab で指定したファイル名が並ぶ ***

```
S2S: SMTAB=smt00126.120        opend
```

```
S2S: SMTAB=smt00127.120        opend
```

この例では FFDUMP=2 に対する出力ばかりを指定したので、1-2 系パラメータが定義されていなかった。そこで、以下の警告を出力している。

```
sys. 1-2 param. NOT definend
```

更に、時間不足で abort された job で得られた S 行列ファイルだから

以下の警告が出力された。

```
JT2= 8352 NOT defined !
```

ここにも、未定義 S 行列要素に対する J の 2 倍が出力される。

```
JT2= 9968 NOT defined !
```

```
      number of undefined S are  136
```

この例では、JT2min=0 と入力したが、途中で JT2MIN=32 と書き換えられ、この値から入力で指定された JT2=10000 の間に S 行列要素が未定義とであった J の値が 136 例あったと言っている。

どういう訳か、JT2=9970 から JT2=10000 迄は計算が実行されている。

この出力は、プログラムの改訂により、今では正しくないものもある。

解説

hctak 計算の S 行列の内のある部分を取り出して、調べてみたいという要求があるかも知れないと思い、その折の参考までにと思いこの部分を書く事にします。

smt????? の内容を以下の 4 個の部分に分割し、各行は 7 5 文字からなる文字型配列に読み込みます。

- 1 見出し。この部分は hctak.in の先頭 2 行をコピーしたもので、HD という配列に書き込まれる。hctak への入力である KTRL(8) の情報は、最初に読み込んだ見出し行から引き出される。
- 2 1-2 系の情報。この部分は、NL12(=N12+2) 行からなり S12 という配列に読み込まれる。この部分は、KTRL(8)=0 又は 1 の時に、smt????? に存在し、KTRL(8)=2 の場合には存在しない。
- 3 (1+2)-3 系の情報。この部分は、NL3(=NCC+2) 行で構成されて、配列 S3 に読み込まれる。
- 4 個別の J に対する S 行列要素の表。この部分は、全系のパリティが正と負の場合に分割され、それぞれは開始行と与えられたパリティに対して 1) 角運動量の意味で結合する状態の識別表、2) 入射チャンネルの軌道角運動量を指定した状態での S 行列の表。という二つの部分で構成される。前半部分、結合チャンネル表は一つであるが、後半部分は通常は複数の軌道角運動量が許されるので、これに対応した数だけの S 行列の表がある。与えられた全系の角運動量 (J) とパリティ π にたいして、許される入射チャンネルの軌道角運動量の一つも存在しないならば、対応する J^π の出力全体が出力されない。

この S 行列要素全体は配列 HF に読み込まれます。

従って、HD, S12, S3, HF の内容をこの順に SHTAB で指定される名前のファイルに書き出せば良い。HF 配列には、読み込んだ順番に、重複しないように、ベタ書きされる。出力時には、小さな J に対応する S 行列要素が先に来るように並べ替えられる。この為に、整数型配列 IDHT が利用される。 J^π を与えた時の、HF 配列の先頭番地と最終番地が IDHT(*,1), IDHT(*,2) に書き込まれる。ここで、* は J^π の識別番号であり、指定された JTMIN, JTINC 及び入射粒子のスピン I_0 を利用して以下の様に決められる。

$I_0 = 0$ の時には、J を与えると正負の内、一方のパリティだけが許されるから、* = (J - JTMIN) とする。

$I_0 \neq 0$ ならば、* = $2 \times (2 \times J - JTMIN) / JTINC + (1 - \pi) / 2$ である。

許される入射チャンネルの軌道角運動量 L_{in} は、入射粒子のパリティを Π とすると、 $(-1)^{L_{in}} \times \pi = \Pi$ 及び $L_{in} = J + I$ を満足する。この L_{in} の取り得る数を $N_{in} (= (L_{in}^{max} - L_{in}^{min}) / 2 + 1)$ とすると、 π を与えた時の S 行列要素に対する行数は $N_{in} \times \{KCC/3 + (1) + 1\}$

である。ここで、(1) は KCC が 3 の倍数で無い時に 1 を加える事を意味し、最後の 1 は各軌道角運動量 L_{in} に対する見出し行を意味する。

入射粒子のパリティは、内部軌道角運動量 $l(=LS)$ から $\Pi = (-1)^l$ としている。

もしも特定の J^π に対するデータが書き込まれていなければ、 $IDHT(*,1)=-1$ となっている。

2.2 h2s

h2s プログラム

hctksmat に S 行列を出力するはずだったのに、入力ミスで S 行列が出力されていないが hctak.out には、全ての情報が出力されている場合があったとする。

この場合には、h2s.pl を走らせると、hctksmat に対応する S 行列ファイルを h2s.out という名前で作ってくれる。

注

このプログラムは perl で書かれている。

このプログラムはかなり古い版の perl で書かれているから、新しい版でも走ると思います。

perl が /usr/bin/ に無い時は、Linux ならば、次のコマンドで調べられるはずです。

```
$ locate perl |less
```

不明ならば、どなたか判る方に聴いて下さい。

この版では入・出力ファイル名が決め打ちである。これでは不都合だと思う方はプログラムの第 2 行目を変更すれば良い。 $\$h='hctak.out'; \$s='>h2s.out'$ 入力 (出力) ファイル名を変更したければ、 $'hctak'('h2s.out')$ を目的のファイル名に書き換える。

勿論、プログラムの先頭部分で読み込むという正統的なやり方があります。

S 行列の出力に際し、'IDCC' という 5 文字を出力する版と出力しない版がある。ここで提供する h2s.pl はこの 5 文字を出力しない方に対応している。

2.3 kin3b

kin3b は三体分裂反応を想定した運動学のプログラムであり、入・出力ファイルは kin3b.in, kin3b.out という名前とする。これらの論理機番は 5 と 6 である。補助的な原子核のパラメータを保持しているデータファイル umtab を論理機番 8 で利用している。

入力データ

例によってカード形式とし、先頭二枚は書式を有し、残りは全て FORTRAN の意味での自由書式である。

第 0 枚目 1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 column indicator

特に何を入力しても計算結果に影響は無いが、桁を明示的に示す目的で、上の様に入力している。

第 1 枚目 (KTRL(i),i=1,10), TITLE, FORMAT(10I2,A50)

KTRL(2): 粒子 2 のパラメータの変更手順

KTRL(2)=1 ならば、粒子 2 のエネルギーを変化させながら、対応する角度 Ω_2 を計算し、KTRL(2)=2 ならば θ_2 を変化させながら、対応するエネルギーと方位角を計算する。KTRL(2)=2 及び他の KNTL パラメータは、当面使用していない。
TITLE 変数には、反応と入射エネルギーを、hctak への入力と同じ仕様で書く。

第 2 枚目 QVAL、NE1、E1MIN、E1MAX

QVAL 反応の Q 値を MeV 単位で与える。

NE1 計算すべき粒子 1 の運動エネルギーの数

E1MIN, E1MAX 計算すべき粒子 1 の運動エネルギーの最小値と最大値を MeV 単位で与える。

これらのエネルギーは、計算に際して参考にされるが、厳密にこの値が使用されるとは限らない。0 が入力されると、内部で適当に調節される。

第 3 枚目 ((ANG1(I,J),I=1,3),J=1,2)

粒子 1 の角度の定義をする。J=1 と 2 は極角 θ_1 と方位角 ϕ_1 を指定する。I=1, 2, 3 はこの順番に、始角・終角・増分を度単位で指定する。増分が 0 ならば、繰り返し計算をしない。繰り返し回数の上限は 1 0 0 としている。

第 4 枚目 NE2, E2MIN, E2MAX

第 2 枚目の粒子 1 に対応する NE1, E1MIN, E1MAX の粒子 2 に関するパラメータ

第 5 枚目 ((ANG2(I,J),I=1,3),J=1,2)

粒子 2 の角度指定。定義は ANG1 と同様。

多分正常に動作していると思うが、一度に多くのパラメータを変化させると出力が膨大になり、收拾が付きにくくなると思う。出力を見ながら、調べるべき領域を絞り込んでいくことを勧めます。

入力例

簡単な入力例を示す。多分解説は不要だろう。

```

1 2 3 4 5 6 7 8 9 0   column indicator
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0   (p+22Mg)+12C, E(23Al)=1840 MeV
-0.125 10 10, 110   /Qval, NE1 E1min E1max
0.0, 180.0, 20, 0.0, 0.0 0.0/((ANG1(j,i),j=1,3),i=1,2)
  10, 10, 1000       /NE2, E2min, E2max
0.0, 180.0, 20.0, 0.0, 0.0, 0.0/((ANG2(j,i),j=1,3),i=1,2)

```

出力例

例に依って、日本語は後から追加した解説文である。

```

KTRL = 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
TITLE= (p+22Mg)+12C, E(23Al)=1840 MeV
      sys  Ename  Z    A  J   pi    M[u]
      1    H     1    1  1/2  +    1.0073
      2    MG    12   22   0   +    21.9930
      3    C     6   12   0   +    11.9967
              Elab((1+2)-3)= 1840.0000 MeV

```

ここまでは、hctak の出力と同じ形式である。

```

      NE  Emin      Emax
1;  10  1.000E+01  1.100E+02
2:  10  1.000E+01  1.000E+03
      1st    Last    inc
theta1  0.00  180.00  20.00
phi1    0.00   0.00   0.00
theta2  0.00  180.00  20.00
phi2    0.00   0.00   0.00

```

入力された粒子 1 と 2 のエネルギーと角度範囲 [MeV] 又は度

```
KIN31:   Ecm=  630.621  cPin= 8876.893 MeV
```

後の解説で登場する ECM と p_i 。運動量も c が掛かっている。

次の行からは実際の計算をする副プログラムからの出力である。

```

E1:      10.000- 110.000 cp1  0.0000E+00  1.3273E+03 MeV
Theta1:   0.000- 180.000 inc  20.00 deg.
Phi1  :   0.000-   0.000 inc   0.00 deg.
E2:      150.287- 1000.000      cp2:  2.4808E+03  8.6761E+03 MeV
DE2=      84.971 MeV

```

エネルギー、運動量と角度範囲を確認している。\\

次の行から、DO loop の出力が続く。

第 1、2、3 (4、5、6) 列は粒子 1 (2) のエネルギーと角度、
第 7 列は粒子 1 と 2 の相対運動の波数。この出力を参考にして、hctak への
FKSMIN, FKSMAX の入力を考えて下さい。

#	E1	thet1	phi1	E2	thet2	phi2	fk
	5.00000E+00	0.00	0.00	1.27457E+02	0.00	0.00	3.77801E-02
	5.00000E+00	0.00	0.00	1.27457E+02	20.00	0.00	1.73567E-01
	5.00000E+00	0.00	0.00	1.27457E+02	40.00	0.00	3.35795E-01
	5.00000E+00	0.00	0.00	1.27457E+02	60.00	0.00	4.89243E-01

#	E1	thet1	phi1	E2	thet2	phi2	fk
	5.00000E+00	0.00	0.00	2.12428E+02	0.00	0.00	1.85325E-01
	5.00000E+00	0.00	0.00	2.12428E+02	20.00	0.00	2.67197E-01
	5.00000E+00	0.00	0.00	2.12428E+02	40.00	0.00	4.21987E-01
	5.00000E+00	0.00	0.00	2.12428E+02	60.00	0.00	5.84391E-01

この間の約 7 0 0 0 行の出力は省略

#	E1	thet1	phi1	E2	thet2	phi2	fk
	9.50000E+01	180.00	0.00	1.23208E+03	0.00	0.00	3.62189E+00
	9.50000E+01	180.00	0.00	1.23208E+03	20.00	0.00	3.56779E+00
	9.50000E+01	180.00	0.00	1.23208E+03	40.00	0.00	3.40724E+00
	9.50000E+01	180.00	0.00	1.23208E+03	60.00	0.00	3.14540E+00

運動学

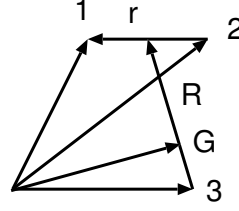
複合粒子 (1 + 2) が運動エネルギー E_i 運動量 \mathbf{p}_i で、静止した粒子 3 に衝突し、3
個の粒子 1、2、3 が運動量 $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3$ で放出される過程を考える。各粒子の質量を
 m_1, m_2, m_3 とすると、次のエネルギーと運動量の保存則が成立する。

$$E_i + Q = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{p_3^2}{2m_3} \quad (2.1)$$

$$E_i = \frac{p_i^2}{2(m_1 + m_2 + Q/c^2)} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{p}_i = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 \quad (2.3)$$

Q は反応の Q 値である。放出粒子 1、2、3 の座標を $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3$ とする。図を参照して二つの座標系の関係を書き下す。



$$\begin{aligned}
 \mathbf{r} &= \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 & \mathbf{r}_1 &= \mathbf{R}_G + \frac{m_3}{M} \mathbf{R} + \frac{m_2}{m_{12}} \mathbf{r} \\
 \mathbf{R} &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_{12}} - \mathbf{r}_3 & \mathbf{r}_2 &= \mathbf{R}_G + \frac{m_3}{M} \mathbf{R} - \frac{m_1}{m_{12}} \mathbf{r} \\
 \mathbf{R}_G &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2 + m_3 \mathbf{r}_3}{M} & \mathbf{r}_3 &= \mathbf{R}_G - \frac{m_{12}}{M} \mathbf{R}
 \end{aligned}
 \tag{2.4}$$

ここで、 $m_{12} = m_1 + m_2$, $M = m_{12} + m_3$ である。運動エネルギーをこの二つの座標で表現する。

$$\begin{aligned}
 E_i + Q &= \frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\mathbf{r}}_2^2}{2} + \frac{m_3 \dot{\mathbf{r}}_3^2}{2} = \frac{M \dot{\mathbf{R}}_G^2}{2} + \frac{\mu_R \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{\mu_r \dot{\mathbf{r}}^2}{2} \\
 &= \frac{\mathbf{P}_G^2}{2M} + \frac{\mathbf{P}_R^2}{2\mu_R} + \frac{\mathbf{p}_r^2}{2\mu_r}
 \end{aligned}
 \tag{2.5}$$

換算質量は、次の定義である。

$$\mu_R = \frac{m_{12} m_3}{M}, \quad \mu_r = \frac{m_1 m_2}{m_{12}}
 \tag{2.6}$$

式 (2.4) に付随した運動量は、次式で与えられる。

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P}_G &= M \left(\frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{r}}_2 + m_3 \dot{\mathbf{r}}_3}{M} \right) = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = \mathbf{p}_i \\
 \mathbf{P}_R &= \mu_R \left(\frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}_1 + m_2 \dot{\mathbf{r}}_2}{m_{12}} - \dot{\mathbf{r}}_3 \right) = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \frac{m_{12}}{M} \mathbf{p}_i \\
 \mathbf{p}_r &= \mu_r (\dot{\mathbf{r}}_1 - \dot{\mathbf{r}}_2) = \frac{m_2 \mathbf{p}_1 - m_1 \mathbf{p}_2}{m_{12}}
 \end{aligned}
 \tag{2.7}$$

最後の 2 式を逆に解くと、

$$\begin{aligned}
 \mathbf{p}_1 &= \frac{m_1}{M} \mathbf{p}_i + \frac{m_1}{m_{12}} \mathbf{P}_R + \mathbf{p}_r \\
 \mathbf{p}_2 &= \frac{m_2}{M} \mathbf{p}_i + \frac{m_2}{m_{12}} \mathbf{P}_R - \mathbf{p}_r
 \end{aligned}
 \tag{2.8}$$

P_R, p_r に関するエネルギー保存則を書くと、

$$\frac{P_R^2}{2\mu_R} + \frac{p_r^2}{2\mu_r} = E_i + Q - \frac{p_i^2}{2M} = E_{cm} = \text{一定} \quad (2.9)$$

粒子 1 の運動量 p_1

記号の説明が終ったとして、次に粒子 1 の運動量 p_1 の取り得る範囲を調べたい。式 (2.8) を見ると、 p_1 は定ベクトル p_i の定数倍に二つのベクトル $m_1 P_R / m_{12}$, p_r を加えたものである。加えられる二つのベクトルは、エネルギー保存則 (2.9) による大きさの制限はあるが、向きは自由である。従って p_1 の値は両者が平行の時に最大値をとる。そこで、

$$s \equiv m_1 P_R / m_{12} + p_r \quad (2.10)$$

を定義すると、 s が最大の時に p_1 は最大となり得る。この事情を調べる為に、 p_r を独立変数だと考えて微分する。エネルギー保存 (2.9) を考慮して

$$\frac{ds}{dp_r} = -\frac{m_1 \mu_R}{m_{12} \mu_r} \frac{p_r}{P_R} + 1. \quad (2.11)$$

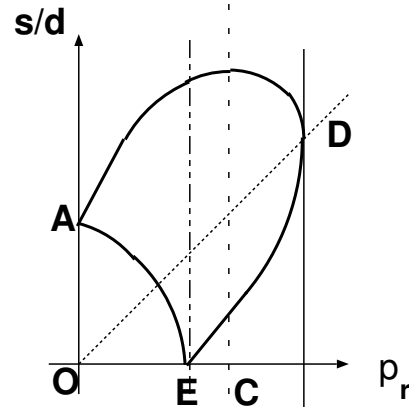
従って、 s のピーク値 s_p を与えるのは、

$$P_{Rp} = \frac{m_1 \mu_R}{m_{12} \mu_r} p_{rp}, \quad p_{rp} = \sqrt{\frac{2\mu_r E_{cm}}{1 + \frac{m_1 m_3}{m_2 M}}}. \quad (2.12)$$

この時、 s_p は次式で与えられる。

$$s_p = \sqrt{2\mu_r E_{cm}} \sqrt{1 + \frac{m_1 m_3}{m_2 M}} \quad (2.13)$$

もう少し、一般的な s の p_r 依存性をグラフに描いてみる。図には、和 s だけでなく、差 d も同時に描かれている。



ベクトル $m_1 p_i / M$ の先端を中心として半径 s_p の球を描くと、ベクトル p_1 の先端はこの球内にあるから、次の制限が与えられる。弧 AD (太線の上半分) が s であり、下半分は差である。

$$p_{1max} = \frac{m_1}{M} p_i + s_p \quad (2.14)$$

$$p_{1min} = \begin{cases} \frac{m_1}{M} p_i - s_p, & \text{if } m_1 p_i / M \geq s_p \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.15)$$

散乱角 θ_1 の取り得る範囲に付いて、

$$\theta_{1min} = 0 \quad (2.16)$$

$$\theta_{1max} = \begin{cases} \arcsin\left(\frac{s_p}{\frac{m_1}{M} p_i}\right), & \text{if } m_1 p_i / M \geq s_p \\ \pi, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.17)$$

方位角 ϕ_1 には制限は付かない。

粒子 2 の運動量 \mathbf{p}_2

上で考えた \mathbf{p}_1 の範囲内に \mathbf{p}_1 を一つ特定する。この条件の下に、粒子 2 の運動量を取り得る範囲を考える。ここで、粒子 1 の運動量の大きさは p_1 、極角と方位角は $\Omega_1 = (\theta_1, \phi_1 = 0)$ としておく。

次の保存則がある。

$$\frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{p_3^2}{2m_3} = E_i + Q - E_1, \quad \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_1 \equiv \mathbf{p}_s \quad (2.18)$$

上で定義した運動量 \mathbf{p}_s の大きさと方向を次の様に書こう。

$$p_s = \sqrt{p_i^2 + p_1^2 - 2p_i p_1 \cos \theta_1} \quad (2.19)$$

$$\Omega_s = (\theta_s, \phi_s) = \left(\arccos\left(\frac{p_i - p_1 \cos \theta_1}{p_s}\right), \pi \right) \quad (2.20)$$

従って、 p_2 は次の二次方程式を満足する。

$$A_2 p_2^2 - 2B_s \cos \theta_{2s} p_2 - C_2 = 0 \quad (2.21)$$

ここで、以下の定数を定義した。

$$A_2 = \frac{1}{2m_2} + \frac{1}{2m_3}, \quad B_s = \frac{p_s}{2m_3}, \quad C_2 = E_i + Q - E_1 - \frac{p_s^2}{2m_3} \quad (2.22)$$

但し、 θ_{2s} は二つのベクトル $\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_s$ のなす角度である。この方程式の二つの解を定義する。

$$p_{2\pm} \equiv \frac{B_s \cos \theta_{2s} \pm \sqrt{(B_s \cos \theta_{2s})^2 + A_2 C_2}}{A_2} \quad (2.23)$$

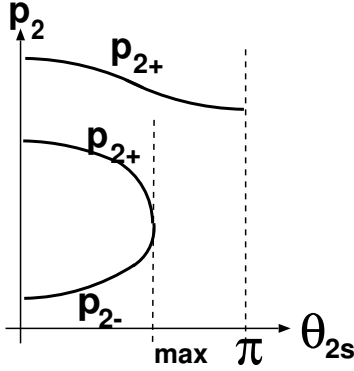
これらが物理解であるためには、正でなければならない。二つの場合に分ける。

$C_2 \geq 0$ の場合 明かに $p_{2+} \geq 0$, $p_{2-} < 0$ であるから、 p_{2+} のみが物理解であり、運動量 \mathbf{p}_2 の方向 $\Omega_2 = (\theta_2, \phi_2)$ に制限は付かない。

$C_2 < 0$ の場合 根号の中及び p_2 が正である事から、 θ_{2s} に制限がつく。

$$0 \leq \theta_{2s} \leq \theta_{2s \max} \equiv \arccos \sqrt{-A_2 C_2 / B_s} \quad (2.24)$$

この制限の下に、 $p_{2\pm}$ は双方共に物理解である。方位角 ϕ_{2s} には制限はつかない。

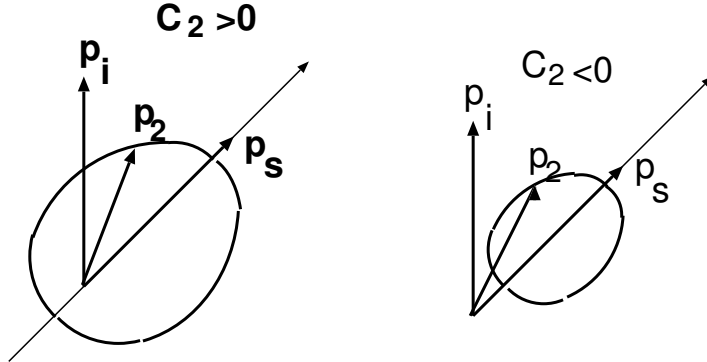


左図は $p_{2\pm}$ の θ_{2s} 依存性を図示したものである。 $C_2 \geq 0$ の場合は上の太い線であり、 θ_{2s} は 0 から π 迄の値をとる。下の半円に見える線は $C_2 < 0$ の場合であり、上(下)半分が p_{2+} (p_{2-}) を示す。この場合、 $\theta_{2s} = \theta_{2s \max}$ で微分が発散する。

p_2 の取り得る範囲は、次式で与えられる。

$$\frac{|\sqrt{B_s^2 + A_2 C_2} - B_s|}{A_2} \leq p_2 \leq \frac{\sqrt{B_s^2 + A_2 C_2} + B_s}{A_2} \quad (2.25)$$

ベクトル p_i , p_s に対し、 θ_{2s} を動かした時に p_2 の先端が描く範囲は卵型であり、その卵型の尖端がベクトル p_s の方向を向き、鈍端は二つのベクトル p_i , p_s の始点の方にある。この事情を下に図示する。



これで、 p_2 の計算に対するアイデアを固定する準備が出来たとする。一つ目は p_2 の大きさを与えて放出角度を計算し、二つ目は放出角度を与えて運動量の大きさを計算する。以下では、 p_2 に対して次の表現も利用する。

$$\mathbf{p}_2 = p_2 (\sin \theta_2 \cos \phi_2, \sin \theta_2 \sin \phi_2, \cos \theta_2) = p_2 \hat{\mathbf{p}}_2 \quad (2.26)$$

p_2 の大きさを与えて、方向を計算する場合

p_2 を (2.25) の条件下に一つきめると p_s に対する角度 θ_{2s} がきまる。即ち p_2 は、ベクトル p_s に垂直な面で卵型を切った時の円を描く。

$$\cos \theta_{2s} = (A_2 p_2^2 - C_2) / 2 B_s p_2 \quad (2.27)$$

次に、3 個の直交する単位ベクトルを定義する。

$$\hat{\mathbf{s}}_1 \equiv (\cos \theta_s, 0, \sin \theta_s), \quad \hat{\mathbf{s}}_2 \equiv (0, 1, 0), \quad \hat{\mathbf{s}}_3 \equiv (-\sin \theta_s, 0, \cos \theta_s) \quad (2.28)$$

一つのパラメータ角 α を用いて、

$$\mathbf{p}_2 = p_{2\perp} (\cos \alpha \hat{\mathbf{s}}_1 + \sin \alpha \hat{\mathbf{s}}_2) + p_{2\parallel} \hat{\mathbf{s}}_3 \quad (2.29)$$

$$p_{2\parallel} = p_2 \cos \theta_{2s}, \quad p_{2\perp} = p_2 \sin \theta_{2s} \quad (2.30)$$

従って、

$$\cos \theta_2 = (\hat{\mathbf{p}}_2 \cdot \hat{\mathbf{p}}_i) = \cos \alpha \sin \theta_s \sin \theta_{2s} + \cos \theta_s \cos \theta_{2s} \quad (2.31)$$

$$\tan \phi_2 = \frac{p_{2y}}{p_{2x}} = \frac{\cos \theta_{2s}}{\sin (\theta_{2s} - \theta_s)} \sin \alpha \quad (2.32)$$

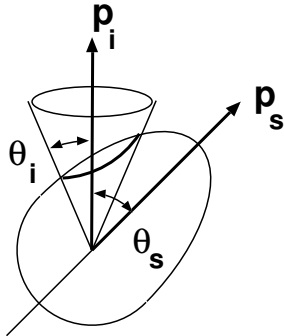
これにより、 $\Omega_2 = (\theta_2, \phi_2)$ が与えられる。角度パラメータ α を変化させて、 θ_2, ϕ_2 の変域を調べればよい。

α の変域を $[-\pi, \pi]$ だとすると、 $\pm\alpha$ に対する Ω_2 の対称性がはっきりする。

θ_2 を与えて、 p_2 を計算する場合

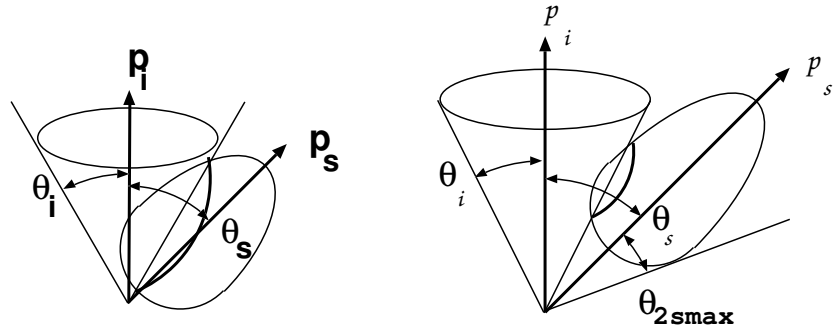
対称性より、 ϕ_2 の取り得る範囲は $[0, \pi]$ と考えておけば良い。この場合には、ベクトル \mathbf{p}_i を対称軸とする半頂角 θ_2 の円錐と卵型との交線が求める軌跡である。従って、 $C_2 \geq 0, C_2 < 0$ の二つの場合に分けて考える。

$C_2 \geq 0$ の場合 図を参照すると、円錐は必ず、卵型を切り取る。



xy 面内の解は $\Omega_2 = (\theta_2, 0), (\theta_2, \pi)$ である事は自明である。即ち、前(後)者では $\theta_{2s} = \theta_s + \theta_2 (= |\theta_s - \theta_2|)$ である。この θ_{2s} に対する (2.23) 式の p_{2+} が求める解である。解の存在が断定出来るのだから、 θ_2 を固定し $\phi_2 = 0$ から π 迄、適当な間隔で ϕ_2 を変化させながら p_2 を計算すればよい。この場合、 $\cos \theta_{2s} = (\hat{\mathbf{p}}_2 \cdot \hat{\mathbf{p}}_s)$ を利用すればよい。

$C_2 < 0$ の場合 円錐と卵型が交わる条件は、卵型が \mathbf{p}_i と交わるか否かで変わる様に思える。この場合には $p_{2\pm}$ は両方ともが物理解である事は、下の図を見るとはっきりと分かる。



$\theta_{2smax} \geq \theta_s$ の時 この場合には p_i と卵型は交わるから、 θ_2 の取り得る範囲は以下の通りである。

$$0 \leq \theta_2 \leq \min(\theta_s + \theta_{2smax}, \pi) \quad (2.33)$$

但し、 $\theta_2 \leq \theta_{2smax} - \theta_s$ ならば、円錐は完全に卵型を切り取るが、そうでなければ卵型をえぐるだけである。前者の場合には ϕ_2 の取り得る範囲は $[0, \pi]$ であるが、後者の場合には ϕ_2 の最小角に対して p_2 の方向は卵型に接しているから、以下の関係を満足する。

$$\begin{aligned} \cos \theta_{2smax} &= (\hat{p}_2(\theta_2, \phi_{2min}) \cdot \hat{s}_3) \\ \cos \phi_{2min} &= \frac{\cos \theta_s \cos \theta_2 - \cos \theta_{2smax}}{\sin \theta_s \sin \theta_2} \end{aligned} \quad (2.34)$$

これで、 ϕ_2 の取り得る範囲が確定する。

$\theta_{2smax} < \theta_s$ の時 この場合には θ_2 の取り得る範囲は次式で与えられる。

$$\theta_s - \theta_{2smax} \leq \theta_2 \leq \min(\theta_s + \theta_{2smax}, \pi) \quad (2.35)$$

この場合にも ϕ_2 の取り得る範囲は (2.34) で与えられる。

プログラムは、運動学のパラメータを読み込む以外は、KIN31 で E_2 を与えた時の三体計算をしているだけだから、特に説明の必要は無いだろう。多くの モジュール変数は今のところ使用していない。

2.4 opm

opm プログラム

opm.f は、中心力光学ポテンシャルの下での、以下の二つの機能を提供する。

(1) 重イオン弾性散乱微分断面積を計算する。

(2) 弾性散乱微分断面積の実験値を与えて、この断面積を再現する複素中心力 (光学) ポテンシャルのパラメータを (自動) 探索する。

中心力しか働かないと仮定しているから、スピンは 0 に限定している。

入・出力

入・出力ファイル名は opm.in・opm.out、論理機番は 5・6 である。補助的に、核データファイル umtab を利用するので、このファイルも利用出来る必要がある。

入力是一行の桁数が 80 文字のカード形式とし、一行毎に読み込む。特に指定しなければ、I から N で始まる変数は整数型であり、その他は実数型です。第 2 組以外は、FORTRAN の意味での無書式です。

第 1 組 桁識別カード。21 桁以降はプログラムとしては利用していないので、忘備メモとして利用できる。

第 2 組 KNTL(10), TITLE, FORMAT(10I2,A50)

KNTL(1) = 0 ならば TITLE から質量等を, umtab を利用して、識別する
≠ 0 ならば質量等のデータは外部入力とする

KNTL(2) = NPOT: ポテンシャルカード枚数 ($0 < \text{NPOT} < 11$)

KNTL(3) < 0 ならば、DR [fm], RMX [fm] は外部入力

DR は数値積分の刻み幅。解説では h としている。

RMX は接続半径。解説では r_m としている。

= NPOW (> 0) ポテンシャルが小さくなる桁を指定

深さが、核表面での値の ($10^{-\text{NPOW}}$) 倍となる半径を自動識別
= 0 ならば 6、10 以上ならば 10 とする。

KNTL(4) = NSTEP: KNTL(3) ≥ 0 ならば、 $\text{DR} = 1 / (2^{\text{NSTEP}} \times \text{波数})$ とする

KNTL(5) not used

KNTL(6) > 0 ポテンシャルを KNTL(6) \times DR 毎に出力する

KNTL(7) > 0 規格化定数がかかっていない歪曲波を出力する。

KNTL(8) > 0 C_l 係数の出力。(式 (2.41) 参照)

KNTL(9) > 0 $\langle V \rangle$ の出力。(ポテンシャルの感受性参照)

KNTL(10) not used

TITLE 50 文字までの文字列

KNTL(1) = 0 ならば、TITLE に反応式と入射エネルギーを書く

書式例: $40\text{Ca}(\text{d},\text{p}), \text{Ed}=50 \text{ MeV}$

入射エネルギーは等号の後ろに書く事。

弾性散乱だから、書式例の p は読み捨てられるが、必要である。

第3組 KNTL(1) $\neq 0$ ならばここには質量等が来る

第3組の最初の1行は標的粒子、次の1行は入射粒子、3行目は第3粒子の IZ, IA, IS, JP, EM のデータを粒子毎に書く。ここで、IZ は原子番号、IA は質量数、IS はスピンの2倍、JP はパリティ (1 又は -1)、EM は原子質量単位での質量。

第3粒子に対しては、EM の後ろに実験室系での入射エネルギーを入力する。弾性散乱だから、第3粒子の情報は使用していない。KNTL(1) = 0 ならばこのデータ組は入力してはいけない。

質量単位の詳細が不明ならば、umtab ファイルの内容を editor プログラムを利用して調べると良いだろう。

opm での仮定があるから、IS, JP 情報は内部で使用していない。

第4組 ポテンシャルパラメータを KNTL(2)(NPOT) 行にわたって入力する。入力したポテンシャルは、全て重ね合わされる。1行は ISI, ISD, V, R, A の値をこの順に並べる。

パラメータの (自動) 探索を指定する為に、V, R, A の数値の直後に、文字 'A' 又は 'G' を書く事が出来る。ここで、'A' ('G') は、このパラメータが自動探索 (grid search) の対象である事を指示する。

ISI	0	実部ポテンシャル	
ISI	1	虚部ポテンシャル	
ISD	0	Woods-Saxon	$V/(1+e)$
ISD	1	Woods-Saxon の1階微分の4倍	$4 \times V e/(1+e)^2$
ISD	2	Woods-Saxon の2階微分	$V e(e-1)/(1+e)^3$
V		ポテンシャルの強さ [MeV]	
R		半径 [fm]	
A		ぼやけ幅 [fm]	

ここで、 $e \equiv \exp\{(r-R)/A\}$ 。ISD=0 又は 1 の時、V の符号は引力や吸収に対して負数として入力する。

半径パラメータ R には (質量数)^{1/3} といった因子は含まない事に注意。

自動探索は、ここで与えられたパラメータを初期値とし、後の解説で定義された罰金 (目的) 関数の極小値を自動的に探す。一方、grid search では単に、この値を初期値とし、後で指定される繰り返し回数と増分を利用して、罰金関数の値の表を返すのみである。実際に探索は行わない。

'A' と 'G' の指定は排他的である。即ち一回の計算に際し、一方しか与えてはいけない。更に、'G' を指定できるのは二つのパラメータだけである。'A' を指定できるパラメータ数の上限は 10 である。

‘A’ (‘G’) は、第 5 組の RC にも付ける事ができる。

第 5 組 RC, LMIN, LMAX, LDEL

RC は電荷半径 [fm]。クーロンポテンシャルは、半径が RC の一様帯電球のポテンシャルを仮定している。後の 3 個のパラメータは DO LOOP の意味での初期値、終値及び増分であり、軌道角運動量の範囲を \hbar 単位で指定する。もしも LMAX が負ならば指定された値を用い、正ならば内部で推定された値で置き替える。

ここでも RC には (質量数)^{1/3} といった因子は含まない事に注意。

第 6 組 DR, RMX

KNTL(3) < 0 の時にのみ入力する。DR は、微分方程式を解く時の刻み幅 h 、RMX は接続半径 r_m である。

第 7 組 ANG0, ANG1, DANG, NEXP

最初の 3 個のデータ ANG0, ANG1, DNG により、度単位で重心系での散乱角の初期値、終値、増分を与える。

ポテンシャルパラメータの値に A 又は G を付けた時は、実験データも読み込む必要がある。NEXP は実験データの角度の数を指定する。第 8、9 組の入力は、‘G’ か ‘A’ を指定しなければ、読み込まれない。

第 8 組 grid search G を指定した時は、(NGRID(M), DGRID(M), M=1, NG) をここに書く。ここで、NG は 入力時に光学ポテンシャルパラメータの直後に付けられた ‘G’ の数であり、1 又は 2 が許される。

NGRID は繰り返し回数であり、DGRID はパラメータの増分である。DGRID は負の値でも構わない。DGRID は、D 又は E 付きのいわゆる科学的数値表現も受け付ける。

NGRID や DGRID の値の直前に、3 文字の記号 ‘+/-’ を付ける事が出来る。‘+/-’ という記号が付けられた場合、対応するパラメータ X は、X-NGRID*DGRID から、X+NGRID*DGRID まで、DGRID 毎に値をかえながら罰金関数を計算する。

3 文字記号 +/- を NGRID と DGRID の双方に付けても良いが、一方に付けた時と同じ動作をする。

入力パラメータ中で最初に現れた ‘G’ に M=1 が割り当てられ、次の ‘G’ 付きパラメータに M=2 が対応する。

自動探索 ‘A’ を指定した時は、ITERMX, CONV, NREP をここに書く。

ITERMX は、自動探索の繰り返しの最大回数であり、CONV は罰金関数の最小減少幅である。この値を参考にして、収束判定をする。あまり小さくしすぎない方がよいだろう。NREP は、可変計量法による極値探索が失敗した時、失敗した時点で

の光学ポテンシャルパラメータを初期値として極値探索を再開する回数を指定する。

第9組 実験データ。

単数又は複数のコメント行が実験データ行に先行しても良い。実用上、コメント行が先行した方が良好だろう。コメント行の第1桁は次の5種類の文字のどれかでなければならない。(C, c, !, #, %)

実験データの実質部分は [第7組] で指定した NEXP 行で構成され、一行には、重心系の散乱角 (度単位)、重心系での微分断面積 (mb/sr)、及び微分断面積の絶対誤差 (mb/sr) が書かれている事。

入力はこれでお仕舞い。

注 初心者利用を想定して、このプログラムでは default を設定している入力が幾つかある。default 値は入力パラメータを利用して計算している。

初心者はこの default 値の付近で入力値を変更して、複数の計算を実行し出力の変動を掴んで貰いたい。

自動探索中にこの参照値が大きく変化すると問題が発生する場合がある。

入力例光学模型パラメータによる $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ 弾性散乱の計算を行った。

12C+12C のポテンシャル

$(V, W, r_V, r_W, a_V, a_W, r_C) = (120, 34.02, 0.71, 0.96, 0.84, 0.69, 1.3)$

form factor は V も W も Wood-Saxon volume 型 (単位は、MeV と fm)

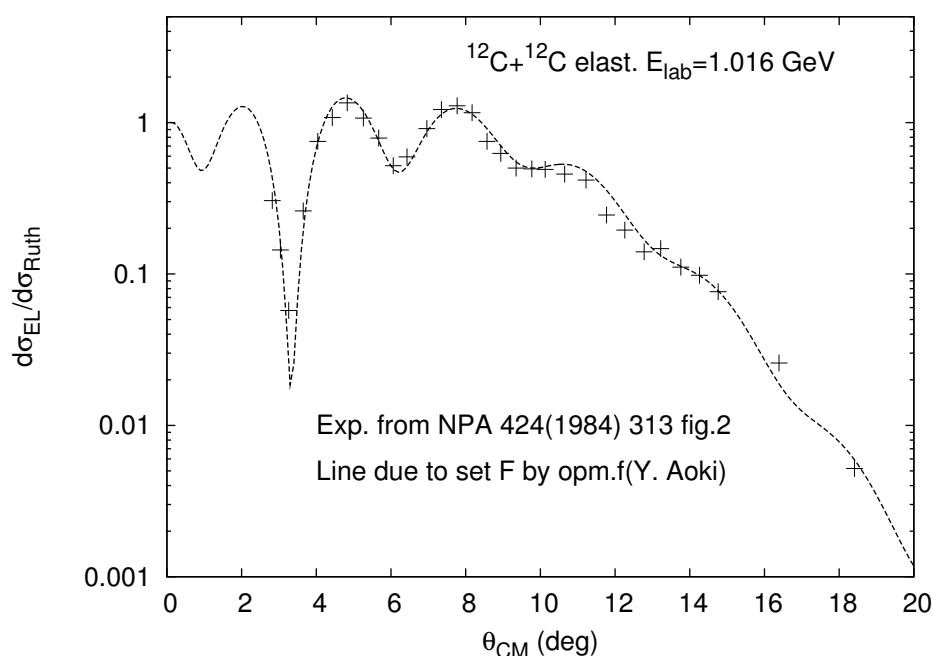
半径パラメータの定義は、 $r \times (A_1^{1/3} + A_2^{1/3})$

論文: M. Bueneard et al., Nucl. Phys. A424 (1984) 313

この論文の 1.016 GeV データは再現出来たと思う。以下に入力を示す。

```
1 2 3 4 5 6 7 8 9 0      Nucl. Phys. A424,pp313 set F of tab. 1
0 2 0 0 0 0 0 1 0 0      12C(12C,12C), E=1016 MeV.
0 0 -120   3.251  0.84 /real WS V R a
1 0 -34.02 4.395  0.69 /Imag WS V R a
5.953  0 0 0           /Rcoul Lmin, Lmax, Ldel
0.1  20  .1           /1st and last angles, angle increment [deg]
```

この計算に対する、断面積の計算値と実験値を比較した図を載せておこう。計算後気がついたが、この系では波動関数を対称化しなければならない。しかし、プログラム中で対称化はなされていない。引用した論文中でも波動関数の対称化には言及していなかったと思う。



図のマークは、実験値を論文の Fig. 2 から読み取って数値化したもの。但し、誤差は読み取らなかった。破線は opm による出力。入力から判るように、積分パラメータは全てプログラムが内部で判断している。

出力例

省略。多分見れば判ると思います。

grid search の場合の入力例

```

1 2 3 4 5 6 7 8 9 0      heading
0 2 0 0 0 0 0 0 0 0      40Ca(D,D), E=40 MeV
0 0 -82.0G 4.0 0.7 /real Woods-Saxon Depth, Radius diffuseness
1 0 -13.5G 4.5 0.75 /real Woods-Saxon Depth, Radius diffuseness
4.46 0 30 1 4.46 / Rcoul Lmin, Lmax, Ldel
1.0 120.0 1.0 91 /1st, last and inc. angles, Nexp
+/-5 1.0 5 +/-1.0D-2 /NGRID, DGRID or ITERMX and CONV
#Ang(deg) Xsec(mb/sr) Ruth(mb/sr) Xsec/Ruth
10.00 6.0758E+03 6.6173E+02
11.00 5.2627E+03 2.9456E+02
*****
98.00 4.2404E+00 4.8139E-01

```

```

99.00    3.6564E+00    1.8372E-01
100.00   4.0531E+00    4.7251E-01

```

この例では二つのパラメータに対して 'G' 記号をつけ、更に両者に対して +/- の機能を要求している。次に、この入力に対する出力を示す。

```

                                opm version 2                Y. Aoki    2009/12/25
      2   4   6   8  10                title
0 2 0 0 0 0 0 0 0 0      40Ca(D,D), E=40 MeV

```

sys	Ename	Z	A	J	pi	M(u)
1	CA	20	40	0	+	39.9516
2	H	1	2	1	+	2.0136
3	H	1	2	1	+	2.0136

```

Elab(1+2)= 40.0000    Ecm= 38.0807 [MeV]
      Eta =  0.7065      k=  1.8683 [/fm]

```

```

(Npow Nstep)=( 6 3)  RMX= 1.4850e+01 =( 222) x ( 6.6904e-02) [fm]

```

```

(Lmin Lmax Ldel)=( 0 30 1) [hbar]

```

```

      Potential parameters
      ISI   type   depth[MeV]   radius[fm]   dif.[fm]
      0     0     -82.0000      4.0000      0.7000
      1     0     -13.5000      4.5000      0.7500
      RC                                4.4600
STR= +/-5 +/-1.0 5 +/-1.0D-2 /NGRID, DGRID or ITERMX and CONV
NN=  5  JS=  1  1  0  1  FN=  5.00e+00  1.00e+00  5.00e+00  1.00e-02

```

```

      target for search
      Pparm(3,1)= -82.00000 +/- 1.000e+00 * 5
      Pparm(3,2)= -13.50000 +/- 1.000e-02 * 5

```

上の二つが grid search の対象。中心値と変化量及び繰り返し回数
が出力されている。

```

(Ang0 Ang1 Dang)=( 1.00 120.00 1.00)[deg]  Nang= 120

```

```
#OPM30 fine      targ1      targ2
      2.2629e+03  -8.7000e+01  -1.3550e+01
      2.2629e+03  -8.6000e+01  -1.3550e+01
*****
      2.2629e+03  -7.7000e+01  -1.3450e+01
```

fine の列は罰金関数の値、targ1 は最初のパラメータ、targ2 の列は 2 番目のパラメータの値。

```
#OPM30: min,fine=    2.2629e+03
#      at T1 T2=   -8.2000e+01  -1.3500e+01
```

上の 2 行は、罰金関数の最小値とこの最小値を与える二つのパラメータのあたり。

以下の出力は、この最小値を与える場合のパラメータで計算した微分断面積等。

```
#Ang(deg) Xsec(mb/sr)  Ruth(mb/sr)  Xsec/Ruth    Near X/Ruth  Far X/Rth
      1.000  6.21091e+07  6.16404e+07  1.00760e+00  1.01286e+00  1.55631e-05
      2.000  3.62943e+06  3.85311e+06  9.41948e-01  9.59227e-01  9.82654e-04
*****
     120.000  1.63653e+00  6.35492e-01  2.57522e+00  1.28368e-02  2.23633e+00
#  Xtot=    1.18138e+03[mb]
最後の Xtot は全反応断面積
```

automatic search の場合の入・出力例

次に automatic search の例を示す。まずは入力例

```
1 2 3 4 5 6 7 8 9 0      heading
0 2 0 0 0 0 0 0 0 0      40Ca(D,D), E=40 MeV
0 0 -82.0A  4.0A  0.7A /real Woods-Saxon Depth, Radius diffuseness
1 0 -15.0A  4.0A  0.7A /real Woods-Saxon Depth, Radius diffuseness
4.46 0 30 1  4.46  / Rcoul Lmin, Lmax, Ldel
1.0 120.0 1.0 91  /1st, last and inc. angles, Nexp
50 1.0E-4, 3      /NGRID, DGRID or ITERMX, CONV and NREP
```

C mocked up 'experimental data'

```
#Ang(deg) Xsec(mb/sr)  error(mb/sr)
      10.00  6.0758E+03  6.6173E+02
      11.00  5.2627E+03  2.9456E+02
```



```

12.00    3.3202E+03    4.1549E+02
*****
99.00    3.6564E+00    1.8372E-01
100.00   4.0531E+00    4.7251E-01

```

ここでは手抜きをするために、光学ポテンシャルを与えて微分断面積を計算し、これに幾らか手を加え、模擬的な実験値と誤差を作り上げた。3、4行目の数値はこの模擬データを作る為のパラメータから遠くないパラメータを出発値として、文字 'A' を付加している。6行目は収束した暁に、実験の角度範囲をカバーする範囲で微分断面積を計算しなおす事を示す為に入力している。Nexp=91 は実験値が91点入力される事を示す。第7行は ITERMX, CONV, NREP と解釈される。2行のコメント行の後に、実験データが91行にわたり置かれる。ひょっとすると、CONV=1.0E-4 は小さすぎるかもしれない。

次は、この入力にたいする出力

```

                                opm version 2          Y. Aoki   2009/12/25
      2   4   6   8  10                title
0 2 0 0 0 0 0 0 0 0    40Ca(D,D), E=40 MeV

```

sys	Ename	Z	A	J	pi	M(u)
1	CA	20	40	0	+	39.9516
2	H	1	2	1	+	2.0136
3	H	1	2	1	+	2.0136

```

Elab(1+2)= 40.0000    Ecm= 38.0807 [MeV]
Eta =    0.7065      k= 1.8683 [/fm]

```

```

(Npow Nstep)=( 6 3)  RMX= 1.3660E+01 =( 204) x ( 6.6904E-02) [fm]

```

```

(Lmin Lmax Ldel)=( 0 30 1) [hbar]

```

```

Potential parameters
ISI   type   depth[MeV]   radius[fm]   dif.[fm]
  0     0   -82.0000     4.0000     0.7000
  1     0   -15.0000     4.0000     0.7000
      RC                      4.4600

```

ここまでは、入力値を再現したもの。次の行は文字 'A' が付けられたパラメータ

を確認している。これらのパラメータ 6 個を自動探索の対象とする。

```
target for search
Pparm(3,1)= -82.00000 A
Pparm(4,1)=  4.00000 A
Pparm(5,1)=  0.70000 A
Pparm(3,2)= -15.00000 A
Pparm(4,2)=  4.00000 A
Pparm(5,2)=  0.70000 A
```

(Ang0 Ang1 Dang)=(1.00 120.00 1.00)[deg] Nang= 120

上の行は、自動探索が成功した後に、最終的なパラメータを用いて微分断面積を計算すべき角度範囲を確認している。

次からは、自動探索の開始である。

OPM40 entered

OPM40 KKK= 1 この行は NREP=1 を示す。

```
Loop FX=  1  2.9939E+03
-8.20000E+01  4.00000E+00  7.00000E-01 -1.50000E+01  4.00000E+00
-9.65406E+00 -1.62384E+03 -6.84507E+03  7.59954E+01 -8.22110E+02
 7.00000E-01
-2.09303E+03
```

2.9939E+03 というのは、罰金関数の初期値である。大胆に探索をすすめると、最初の内はとんでもなく大きな罰金関数の値に出合う場合がある。

自動探索パラメータの下に、そのパラメータでの罰金関数の微分値が出力される。この様な行が、収束するか又は自動探索に失敗するまで出力される。

```
Loop FX= 79  4.6774E+01
-8.27691E+01  3.96397E+00  7.71030E-01 -1.33875E+01  4.42583E+00
-1.77722E-05  5.00152E-03  3.01433E-02  4.08448E-04 -4.43304E-03
 7.49965E-01
-8.15057E-03
```

今の場合は易しい場合であったから、NREP=1 で収束した。

因みに、'実験データ' を作ったパラメータは、以下の通り。

\begin{verbatim}

```
0 0 -81.826 4.0 0.765 /real Woods-Saxon Depth, Radius diffuseness
1 0 -13.124 4.49 0.719 /real Woods-Saxon Depth, Radius diffuseness
```

\end{verbatim}

以下に、Hessian の対角要素が出力される。

CNGRD: diag. of H of CNGRD

```
1  7.1543502E+00    2  9.7686600E-03    3  2.7832550E-04
4  8.3194791E-01    5  4.0843906E-02    6  5.9728071E-03
```

以下に Hessian の 6 個の固有値と固有ベクトルが出力される。

Eig. value= 7.44703E+00 E. vec:

```
9.7850E-01  3.5966E-02 -5.7905E-03  1.9401E-01  5.4594E-02
-2.4375E-02
```

Eig. value= 5.94852E-01 E. vec:

```
2.0144E-01  6.7850E-03 -5.6855E-03 -9.6295E-01 -1.7328E-01
4.5097E-02
```

Eig. value= 1.05559E-03 E. vec:

```
2.4704E-02 -2.7934E-02 -2.0361E-02  1.8099E-01 -8.4854E-01
4.9539E-01
```

Eig. value= 1.34211E-04 E. vec:

```
2.9362E-02 -7.1603E-01  1.8007E-01 -3.5719E-02  3.4848E-01
5.7559E-01
```

Eig. value= 8.40599E-05 E. vec:

```
2.2117E-02 -6.7639E-01  4.4430E-02  3.2052E-02 -3.4851E-01
-6.4617E-01
```

Eig. value= 4.60790E-06 E. vec:

```
9.9230E-04  1.6337E-01  9.8215E-01  4.3927E-03 -6.6148E-02
-6.5597E-02
```

最終的なパラメータとこのパラメータを用いた微分断面積が出力される。

Potential parameters

ISI	type	depth[MeV]	radius[fm]	dif.[fm]
0	0	-82.7691	3.9640	0.7710
1	0	-13.3875	4.4258	0.7500
	RC		4.4600	

IER= 0 len. func= 4.6774E+01

#Ang(deg)	Xsec(mb/sr)	Ruth(mb/sr)	Xsec/Ruth	Near X/Ruth	Far X/Rth
1.000	6.21684E+07	6.16404E+07	1.00857E+00	1.91684E+55	1.91684E+55
2.000	3.60915E+06	3.85311E+06	9.36685E-01	3.06647E+56	3.06647E+56

1 度と 2 度に対する Near/far 分解は狂っていると思える。これは
プログラム内部で安全側にパラメータを設定しているためである。

もう少し、pqcal の設定を厳しくしよう。

3.000 6.04086E+05 7.61302E+05 7.93492E-01 8.86742E-01 4.90124E-03

119.000 2.05095E+00 6.48562E-01 3.16230E+00 1.02260E-02 2.92547E+00

120.000 2.05424E+00 6.35492E-01 3.23252E+00 1.20727E-02 2.89456E+00

Xtot= 1.18845E+03 [mb]

野次馬根性でポテンシャルの実部と虚部の深さを対象として、この中心点中心として grid search して、罰金関数を放物線で近似してみた。その 2 次の係数は実 (虚) 部に対して 56.5 (235) 程度であった。曲率は約 5 倍の違いがあり、虚部が良く決定されている事になった。これらのパラメータに対応する対応する、CNGRD から出力される対角要素の比は $7.15/0.831$ だから約 100 倍。平方根を取って 10 倍。2 倍程矛盾があるようだ。入力値 $\text{CONV}=1.0 \times 10^{-4}$ が大きすぎるせいだろうか？

もっとも決定精度が高い実部と虚部の diffuseness を対象として同じ事をやってみよう。対角要素の比は $5.973 \times 10^{-3}/2.873 \times 10^{-4} = 20.79$ 程度に対し、放物近似の 2 次係数の比は約 19.85 であった。この程度ならば、誤差論として満足しよう。

解説

光学模型の初心者向けの解説をしておこう。

原子核標的に他の原子核を照射した時、弾性散乱以外に非弾性散乱・組替え (移行) 反応・吸収等の反応も起こるので、定量的な取り扱い是非常に困難である。弾性散乱を選択的に取り扱い、他の反応をポテンシャルの虚部に繰り込む手法を光学模型と呼ぶ。量子力学の意味で、入射波は標的と相互作用し、弾性散乱以外のチャンネルにも流束の一部は流れ込み、弾性散乱チャンネルの流束が減る。この減る部分をポテンシャルの虚部に押しつける訳である。

相互作用を中心力に限定し、そのポテンシャルを次式とする。

$$V(r) = V_R(r) + i V_I(r) + V_C(r) \quad (2.36)$$

ここで、 $V_R(r)$ と $V_I(r)$ は実関数であり、 $V_C(r)$ はクーロン力に対応する。重心系でのシュレーディンガー方程式は、次式とする。

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V \right) \psi = E \psi \quad (2.37)$$

散乱問題だから、エネルギーには $E > 0$ という条件がつく。軌道角運動量が $(l m)$ の解を $\psi_{lm}(\mathbf{r})$ と書くと、

$$\psi_{lm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} u_l(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.38)$$

ここで、 $Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ は球面調和関数であり、次の式で Legendre の陪関数と関係している。

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_{l|m|}(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (2.39)$$

動径部分は、以下の方程式を満足する。

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u_l(r) + V(r) u_l(r) = E u_l(r) \quad (2.40)$$

この微分方程式の以下の境界条件を満足する解を採用する。

$$u_l(0) = 0, \quad u_l(r) \rightarrow F_l + C_l \{G_l + i F_l\} \quad r \rightarrow \infty \quad (2.41)$$

ここで F_l と G_l は通常のクーロン波動関数であり、後で簡単な解説を加える。後半の境界条件において $C_l = 0$ ならば、点電荷による弾性散乱 (クーロン散乱) を表し、これに $V_R + i V_I$ ポテンシャルによる外向き散乱波がクーロン散乱に追加されている。 $V_C(r)$ として点電荷以外の、例えば有限の広がりも持つ帯電体の作るポテンシャルを採用する場合には、この効果も C_l に反映される。

C_l は S 行列要素 S_l と、以下の関係にある。

$$S_l = 1 + 2i C_l, \quad T_l = 1 - |S_l|^2 \quad (2.42)$$

振幅が 1 の入射波に対する外向き波野振幅が S であるから、 $1 - |S|^2$ は入射波が吸収される割合、古い概念では入射波がポテンシャル障壁を乗り越えて標的核内に入り込む割合と解釈され、吸収係数とか透過係数と呼ばれる。

実験条件は核力ポテンシャルの有無に拘らないから、入射波部分の境界条件はクーロン散乱のみがある場合と同じである。

$\psi(\mathbf{r})$ を $\psi_{lm}(\mathbf{r})$ で展開するが、展開係数は $\psi(\mathbf{r})$ の入射波部分が、電荷が無い時は、平面波の入射波部分と一致する様に決定する。即ち、

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{4\pi}{k r} \sum_{lm} i^l e^{i\sigma_l} Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) u_l(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.43)$$

ここで導入された σ_l はクーロン波の位相のずれと呼ばれる (後出)。 \mathbf{k} は入射粒子の波数ベクトル。この ψ の漸近形は入射平面波と外向き波の和になっている。

外向き波のみを取り出しその流束を計算し、入射波の流束で割ると微分断面積が、散乱振幅 $f(\theta)$ の 2 乗として計算される。但し、 θ は散乱角である。クーロン力がある時には、 u_l の漸近形を思いだすと、 F_l の部分からクーロン散乱の散乱振幅 $f_C(\theta)$ が登場し、残りの C_l に比例する部分からは核力 (光学ポテンシャル) に起因する寄与がある。従って、以下の散乱振幅が導ける。

$$f(\theta) = f_C(\theta) + \sum_l (2l+1) e^{2i\sigma_l} C_l P_l(\cos \theta) / k \quad (2.44)$$

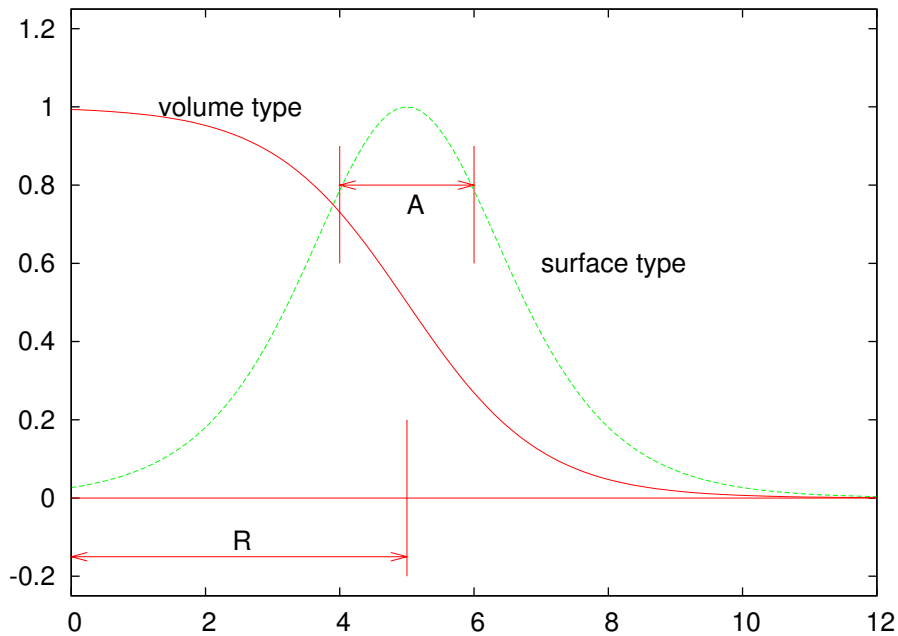
$$f_C(\theta) = -\frac{\eta}{2k \sin^2 \theta/2} e^{-i(\eta \ln \sin^2 \theta/2 + 2\sigma_0)} \quad (2.45)$$

微分断面積は、大きさが人間サイズに較べて無視出来る様な標的粒子の場合に、この標的粒子を集めてある大きさの標的を用意し、この標的に当たった入射粒子だけが散乱される事を想定して定義されている。クーロン散乱では、この想定に反して標的に当たらなかった粒子も、非常に微小な角度にはあるが、散乱される！従って微分断面積が前方で発散し、この影響で全断面積を発散する。

光学模型では、弾性散乱以外の効果は全て流束の減少として取り扱われているから、入射流束から放出される流束を差し引くと、弾性散乱以外のチャンネルへ流れた量が評価される。適当に規格化すると、全反応断面積 σ_R は次式で計算される。

$$\sigma_R = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 - |1 + 2i C_l|^2) \quad (2.46)$$

光学ポテンシャルの関数形は、Woods-Saxon(体積)型、及びその微分(表面)型にとられる場合が多い。以下に $R = 5$, $A = 1$ [fm] の場合の体積と表面型の振舞を図示する。



opm プログラムでは、この習慣を尊重しつつ、自由度を広げるために複数のポテンシャル関数を重ねあわせて、意図するポテンシャルの動径依存性を実現する。与えられたポテンシャルをここで定義した関数の重ね合わせで展開するのに、wv2.f というプログラムを利用する事ができる。

微分方程式の解法

1 階微分を含まない 2 階微分方程式の解法として Cowell の 3 点法が良く利用される。

この導き方は hctak の解説を見て下さい。要は、一定幅 h だけ離れた 3 点での関数値 $u_l(r-h)$, $u_l(r)$, $u_l(r+h)$ の関係を定めている。従って、 $u_l(r-h)$, $u_l(r)$ を与えると $u_l(r+h)$ が計算出来る。この計算結果を利用すると、 $u_l(r)$, $u_l(r+h)$ を用いて $u_l(r+2h)$ が計算できるという具合に、芋蔓式にどこまでも微分方程式を解く事が出来る。但し、この漸化式は関数値 u_l が増える方向に使用しないと累積誤差の被害を被る。

ここに登場した、積分の刻み幅 h を決定するのに KNTL(4) が利用される。

微分方程式を解き始める時の最初の一步を決める問題が残っている。ここで解く微分方程式は線形だから、絶対値は当面は問題としない。従って、 $u_l(r=0) = 0$ を利用し、 $u_l(h) = \epsilon$ (小さな数) とすれば原理的には問題が無い。細かい事を言うと、

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left(1 - \frac{h^2}{12} V(r) \right) u_l(r) = \begin{cases} 0 & \text{if } l \neq 0 \\ -\epsilon/6 & \text{if } l = 1 \end{cases} \quad (2.47)$$

Cowell の 3 点法では、 $O(h^4)$ の項までは正しい。だから、第 4 階差 (大雑把に言って 4 階微分) 迄は正しいが第 6 階差には誤差がある。従って $u_l(r)$ のテイラー展開が 6 階以上の高階微分から始まるような場所 (r が小さいところ) では近似精度が悪い。この悪い近似精度という事情は、 l が大きい場合におこる。 r が小さく l が大きい場合には $|u_l(r)|$ は非常に小さいので、このような領域では積極的に $u_l(r) = 0$ とする。即ち、有限の r から解き始める。こうすると、 $|u_l(r)|$ が、数値計算の意味で、発散する危険を回避できる。この件は必ずしも広く知られてはいないようだから、もう少し詳しく書いておこう。

動径方向シュレーディンガー方程式を解く時、原点から直接解き始めると波動関数の振幅が、数値計算の意味で過大になる場合がある。この対策として、軌道角運動量が大きな部分波に対しては原点から幾らか離れた位置から解きはじめる。この初期値を与える半径を決定する必要があり、opm では次の手法を用いている。

0 クーロンパラメータは小さいと考えて、球ベッセル関数を $j_L(x)$ とした時、 $x j_L(x)$ の第 1 ピーク値の 1/10 桁下の値を与える半径を初期値位置と仮定し、この半径を評価する。

1 $x j_L(x)$ が最初のピークを与える位置の計算。 $x j_L(x)$ を漸化式で計算するが、漸化式の計算が長くなりすぎると、途中で発散が起こり、 $L = 0$ まで旨く関数値を計算出来なくなる。最終的には、4 倍精度で計算し手を打った。

しかし、ピーク位置だけならば、 $L = 10000$ まで評価出来た。ピーク位置を計算したい L よりも幾らか大きな $L + 20$ の値から漸化式を用いて、 L を減らしていく。 L の位置に来たら計算を打ちきり、そこでの値と直前の値を用いて、 $x j_L(x)$ とその微分を値を比とし評価する。これで、ニュートン法が利用できる。

2 関数値とその10桁落ちの関数値を与える半径を評価する。2分法を利用して、評価した。サボリだが結論を簡単に出した。

次ぎにこの10桁落ちの半径を近似する式を作る。 $r(L) = (((L + z(1)) * L + z(2)) * L + z(3)) / ((L + z(4)) * L + z(5))$ と書く。

L の範囲	1	2	3	4	5
$L < 50$	-6.77767	12.2724	-5.43419	34.5598	-73.1199
$50 \leq L \leq 500$	631.134	-3578.26	-3128.57	742.118	19420.8

大きなL に対しては直線的に振舞うから、後者の係数はもっと大きなL にも適用出来る。

h の決定が未だ残っている。

実用的には、何種類か変えて微分方程式を解き、結果が安定するところを採用すればよい。

Cowell の3点法に登場する $1 - h^2 V(r)/12$ という因子の第2項は第1項(1)よりも小さくしなければならない。別の言い方をすると、波動関数が波を打っている領域で、一つの波を何個の r の点で表現するかと問うてもよい。従って、 h は波数の何分の1程度とするのが良いかと考えるのが妥当だと思える。KNTL(4) は、この観点から刻み幅 h 、プログラムでの変数名は DR、を決める指標としている。

漸近領域での振舞から、 C_l を決定する。 $|V_R(r_m) + iV_I(r_m)| \ll |V_C(r_m) + l(l+1)/r_m^2|$ を満足する r_m を先ず決定する。ここに登場した接続半径 r_m を利用者が決定するのに、KNTL(3)(=NPOW) が利用される。default では、核表面での値から6桁ポテンシャルの値が小さくなる半径を r_m として採用している。

動径方向波動関数 $u_l(r)$ を r_m 迄解いたとする。この計算値には、二つの未定係数、(規格化因子 N_l と、 C_l) がある。関数値とその微分を利用し、次の連立方程式を解き、境界条件を満足させる。

$$u_l(r_m) = N_l \{F_l + C_l (G_l + iF_l)\}, \quad u'_l(r_m) = N_l \{F'_l + C_l (G'_l + iF'_l)\} \quad (2.48)$$

波動関数を利用しないならば、 $u_l(r_m)$ の対数微分だけを計算すれば良い。波動関数の r 微分は、微分を計算したい点を中心とし、左右に各3点ずつ計7点での関数値を用いて、多項式近似により計算する。

残るのは、クーロン波動関数に関する知識である。

Mott と Massay 著、Theory of Atomic Collision を参考にするのが良いだろう。高柳の訳が吉岡書店から「衝突の理論」というタイトルで出版されている。一読を勧めます。

点電荷のポテンシャルに対するシュレーディンガー方程式を無次元化する。

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + 1 - \frac{2\eta}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] w = 0 \quad (2.49)$$

ここで、次の記号が導入された。

$$\rho = k r, \quad \eta = \frac{Z_1 Z_2 \alpha}{\beta} \quad (2.50)$$

但し、 $\alpha = e^2/4\pi\epsilon_0\hbar c$ は微細構造定数であり、 $\beta = v/c$ は衝突粒子の相対速度と光速の比である。 Z_1, Z_2 は衝突粒子の原子番号。この微分方程式の解を l, η, ρ の関数と考える。一つの解は原点で正則であり、次の様に規格化する。

$$F_l(\eta, \rho) = C_{Cl} \rho^{l+1} e^{-i\rho} M(l+1-i\eta, 2l+2, 2i\rho) \quad (2.51)$$

ここで、 $M(\alpha, \beta, z)$ は Kummer の合流型超幾何関数である。 C_{C0} は次式で定義され、 C_{Cl} は次の漸化式を満足する。

$$C_{C0}^2(\eta) = \frac{2\pi\eta}{e^{2\pi\eta} - 1}, \quad C_{Cl}(\eta) = \frac{\sqrt{l^2 + \eta^2}}{l(2l+1)} C_{Cl-1}(\eta) \quad (2.52)$$

第2の独立解 G_l は F_l を用いて Frobenius の方法で導ける。これらは、以下の漸近形を持つ (持たせる)。

$$F_l(\eta, \rho) \rightarrow \sin(\rho - \eta \ln 2\rho - l\pi/2 + \sigma_l) \quad (2.53)$$

$$G_l(\eta, \rho) \rightarrow \cos(\rho - \eta \ln 2\rho - l\pi/2 + \sigma_l) \quad r \rightarrow \infty \quad (2.54)$$

この漸近形を見ると、 $F_l(G_l)$ は球ベッセル関数 $x j_l(x)$ ($-x n_l(x)$) を拡張したものと判るだろう。

σ_l は、次式で定義される。

$$\sigma_l = \arg \Gamma(l+1+i\eta) \quad (2.55)$$

この位相は、 Γ 関数の対数に対して Stirling の公式、又は Γ 関数の鞍点法近似を利用すると簡単に評価出来る。

クーロン波動関数の計算には、Kummer の合流型超幾何関数の漸化式と Wronskian を利用する。漸化式は l に関するものと η に関するものを作る事ができる。 l に関するものから1個、 η に関するものは複素数として書けるから2個、Wronskian relation から1個、計4個の関係式が作れるから、符号を除いて、例えば $l=0$ に対する計算が可能となる。詳細は、僕のホームページを探すのが簡単かな？

ポテンシャル感受性の評価

散乱状態波動関数 (2.43) 式を利用して、ポテンシャルの期待値を計算したい。先ず、角度

積分をする。

$$\langle \psi | V(r) | \psi \rangle_{\mathbf{r}} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) |u_l(r)|^2 V(r) \quad (2.56)$$

この式に依り、波動関数はポテンシャルのどの部分を検出しているかが判る。

軌道角運動量毎にグラフを描くならば、どの軌道角運動量の部分波がポテンシャルのどの部分から影響を受けているかを判断できる。

更に、モーメントを計算するのも良いだろう。

波動関数を用いて物理量を計算するという考え方は、光学模型には持ち込まれていないようだが、もっと利用すべきだと思う。例えば、全反応断面積は虚部ポテンシャルの期待値と関係をつける事ができる。簡単な計算手順だけ書いておくので、興味を持つ人は視野を広げるために挑戦してもらいたい。

0 流れの密度、ここでは流束と呼んでいた、の式を書き下す。

1 流れの密度を、標的を中心とする大きな球面上で角度積分する。但し、内向き波成分と外向き波成分とは干渉しないと仮定する。

2 漸近形を用いて、 C_l で積分結果を表現し、全反応断面積の表現と比較する。

3 シュレーディンガー方程式とその複素共役に、 ψ^* , ψ を掛けて差をとる。

4 この式を、上記 1 の球に対して体積分する。

5 上記 2, 4 を比較する。

この結果の r 積分の式を見ると、入射波がどこで吸収されているかという事が判る。即ち、全反応断面積の式では全体的な吸収量という積分量しか与えられないが、被積分関数を見ると、波がどこで吸収されているか？ というよりミクロな情報が得られる事に気がつくだろう。

従って、 $\langle r V_I(r) \rangle_{\mathbf{r}} / \langle V_I(r) \rangle_{\mathbf{r}}$ というモーメントは、吸収半径を与える。

勾配公式を用いて、流れの密度 (流線) を可視化してみるのも面白いですよ。

near/far 分解

入射粒子が標的の右側を通して左側に散乱されたか、それとも左側を通して左側に散乱されたかを、散乱問題の中で議論出来る。

座標系を定義する時、入射粒子の運動量を \mathbf{p}_{in} 、検出粒子の運動量を \mathbf{p}_{out} として、 \mathbf{p}_{in} の方向を z 軸、 $\mathbf{p}_{in} \times \mathbf{p}_{out}$ の方向を y 軸とする右手系を採用する場合が多い。ここでもそ

うしている。検出器は xz 面内の $x > 0$ 半平面に置かれた事になる。この条件で、標的の左(右)側通行ビームの散乱を near (far) side scattering と呼んでいる。

この事情を記述するには、通常は定在波である Legendre 関数で散乱振幅を記述しているが、この部分を進行波を用いて記述すれば良い。先ず第1・2種 Legendre 関数の漸近形を引用する。

$$P_\nu^\mu(\cos \theta) = \frac{\Gamma(\nu + \mu + 1)}{\Gamma(\nu + 3/2)} \left(\frac{2}{\pi \sin \theta} \right)^{1/2} \cos[(\nu + 1/2)\theta - \pi/4 + \mu\pi/2] + O(\nu^{-1}) \quad (2.57)$$

$$Q_\nu^\mu(\cos \theta) = \frac{\Gamma(\nu + \mu + 1)}{\Gamma(\nu + 3/2)} \left(\frac{\pi}{2 \sin \theta} \right)^{1/2} \cos[(\nu + 1/2)\theta + \pi/4 + \mu\pi/2] + O(\nu^{-1}) \quad (2.58)$$

この両式の相違点は、振幅部分の因子 $\sqrt{2/\pi}$ が逆転している事と、 \cos の中の位相が $\pm\pi/4$ である。位相が丁度90度ずれているので、時間依存性は $e^{-i\omega t}$ を補い、振幅を調節して和や差を作ると、角度部分の進行波となる。

$$\tilde{Q}_{lm}^\pm(x) \equiv \frac{1}{2} \left[P_{lm}(x) \mp \frac{2i}{\pi} Q_{lm}(x) \right] \quad (2.59)$$

を定義すると、 $\tilde{Q}_{lm}^+(x)$ が far side, $\tilde{Q}_{lm}^-(x)$ が near side amplitude を担当する。即ち、

$$P_{lm}(x) = \tilde{Q}_{lm}^+(x) + \tilde{Q}_{lm}^-(x) \quad (2.60)$$

を用いて、散乱振幅の式に登場する $P_{lm}(x)$ の部分を (2.60) で置き換えれば near/far 分解が実現出来る。ここで、 $x = \cos \theta$ である。

但し、クーロン散乱の散乱振幅を部分波展開すると、非常に収束性が悪いので、特別な取り扱いが必要である。R.C. Muller (Phys. Rev. C12(1975) 1561) によると、以下の手順に依ればよい。

準備として、Legendre 関数に関する次の関係式を認める。

$$Q_l(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{1}{z-t} P_l(t) dt \quad (2.61)$$

$$P_l(x) = \frac{i}{\pi} \{Q_l(x+i\epsilon) - Q_l(x-i\epsilon)\} \quad (2.62)$$

$$Q_l(x) = \frac{1}{2} \{Q_l(x+i\epsilon) + Q_l(x-i\epsilon)\} \quad (2.63)$$

$Q_l(z)$ は、実軸上の2点、 $x = \pm 1$ を結ぶ線をカットとするので、この線の上と下から $z = x$ へ近ずくと、その値は一致せずに、(2.62) (2.63) の様になる。この二つの式を逆に解くと、

$$\tilde{Q}_l^\pm(x) = \mp \frac{i}{2\pi} Q_l(x \mp i\epsilon) \quad (2.64)$$

複合は同順とする。この式から、進行波は x 軸の上下での $Q_l(z)$ の値から計算できる。

$x = \cos \theta$ として、クーロン散乱の散乱振幅を $f_C(x) = \sum_l a_l P_l(x)$ と展開出来たとする。この展開に式 (2.61)–(2.64) を代入して、次の式を得る。

$$f_C(x) = \sum_l a_l P_l(x) = \frac{i}{\pi} \sum_l a_l \{Q_l(x + i\epsilon) - Q_l(x - i\epsilon)\} \quad (2.65)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{i}{2\pi} \sum_l a_l \int_{-1}^1 \left(\frac{1}{x + i\epsilon - t} - \frac{1}{x - i\epsilon - t} \right) P_l(t) dt \\ &= \frac{i}{2\pi} \int_{-1}^1 \left(\frac{1}{x + i\epsilon - t} - \frac{1}{x - i\epsilon - t} \right) f_C(t) dt \\ &= \frac{i}{\pi} \{f_{CQ}(x + i\epsilon) - f_{CQ}(x - i\epsilon)\} = f_{CN} + f_{CF} \end{aligned} \quad (2.66)$$

ここで、

$$f_{CQ}(z) \equiv \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \frac{1}{z - t} f_C(t) dt \quad (2.67)$$

式 (2.65) を見ると、クーロン散乱の散乱振幅に登場する $P_l(x)$ を $Q_l(z)$ に置き換えているが、この $Q_l(z)$ は式 (2.64) により、進行波に比例するから、クーロン散乱の散乱振幅を near/far 分解した式になっている。後半の式変形は和をとる為に行っている。

$f_{CQ}(z)$ を $z = x \pm i\epsilon$ に対して計算し、 $\mp i/\pi$ を掛けると、 f_{CN} , f_{CF} が計算出来る。次に、 $f_C(\theta)$ を書き下す。

$$\begin{aligned} f_C(\theta) &= -\frac{\eta}{2k \sin^2 \theta/2} e^{2i\sigma_0 - i\eta \ln \sin^2 \theta/2} \\ &= f_C(\pi) \left(\frac{1-x}{2} \right)^{-1-i\eta} \end{aligned} \quad (2.68)$$

この式を (2.67) に代入する。

$$\begin{aligned} f_{CQ}(z) &= \frac{1}{2} f_C(\pi) \frac{2}{z+1} \int_0^1 dv \left(1 - \frac{2v}{z+1} \right)^{-1} (1-v)^{-1-i\eta} \\ &= \frac{1}{2} f_C(\pi) \left[-\frac{1}{1+i\eta} F(1, 1+i\eta, 1+2i\eta; (1-z)/2) + \frac{i\pi}{\sinh \pi\eta} \left(\frac{z-1}{2} \right)^{-1-i\eta} \right] \end{aligned} \quad (2.69)$$

この最後の積分は自分では確認していない。参照論文の式 (13b) は $(z-1)^{-1-i\eta}$ となっているが、因子 2 は印刷時に欠落したのかな？

$((z-1)/2)^{-1-i\eta}$ に $z = x + i\epsilon$ (near) 又は $z = x - i\epsilon$ (far) を代入する。

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow +0} \left(\frac{x + i\epsilon - 1}{2} \right)^{-1-i\eta} &= \lim_{\epsilon \rightarrow +0} -\frac{2}{1-x-i\epsilon} \exp \left\{ -i\eta \ln \left(\frac{x + i\epsilon - 1}{2} \right) \right\} \\ &= -\frac{2}{1-x} \exp \left\{ -i\eta \left(\ln \frac{1-x}{2} + i\pi \right) \right\} = -e^{\pi\eta} \left(\frac{1-x}{2} \right)^{-1-i\eta} \end{aligned} \quad (2.70)$$

同様に

$$\lim_{\epsilon \rightarrow +0} \left(\frac{x - i\epsilon - 1}{2} \right)^{-1-i\eta} = -e^{-\pi\eta} \left(\frac{1-x}{2} \right)^{-1-i\eta} \quad (2.71)$$

従って、

$$f_{CN}(\theta) = +\frac{i}{\pi} f_{CQ}(x + i\epsilon) = f_C(\theta) \left[\frac{1}{1 - e^{-2\pi\eta}} - \frac{i}{2\pi} (\sin^2 \theta/2)^{1+i\eta} S(\theta) \right] \quad (2.72)$$

$$f_{CF}(\theta) = -\frac{i}{\pi} f_{CQ}(x - i\epsilon) = f_C(\theta) \left[-\frac{e^{-2\pi\eta}}{1 - e^{-2\pi\eta}} + \frac{i}{2\pi} (\sin^2 \theta/2)^{1+i\eta} S(\theta) \right] \quad (2.73)$$

ここで、

$$S(\theta) = \frac{1}{1+i\eta} F(1, 1+i\eta, 2+i\eta; \sin^2 \theta/2) \quad (2.74)$$

但し、 $F(\alpha, \beta, \gamma; z)$ はガウスの超幾何関数である。

両者を加えると、自明ではあるが、 $f_C(\theta)$ となる。

散乱振幅 $f(\theta)$ が以下の様に、Legendre 関数で展開出来たとする。

$$f(\theta) = \sum_{lm} f_{lm} P_{lm}(\theta) \quad (2.75)$$

この散乱振幅 $f(\theta)$ は、荷電粒子の弾性散乱ならば クーロン力による部分 $f_C(\theta)$ と核力による部分 $f_N(\theta)$ の和で書き表す。

中心力しか散乱に寄与しないならば、 m による和は不要である。一方、スピン依存力が散乱に寄与する場合には m による和は必要である。opm.f では中心力しか扱わないので不要だが、hctak.f ではたとえ $V_{13}(r_{13})$ や $V_{23}(r_{23})$ が中心力のみしか含まなくても、このポテンシャルを \mathbf{r} , \mathbf{R} へ座標変換をし、多重極展開する事に依りスピン依存性が導入される場合がある。この (2.75) の Legendre 関数を (2.59) を用いて、 \tilde{Q}^\pm で置き換えて $f_{N \text{ or } F}(\theta)$ を定義する。

一方、微分断面積は $\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2$ と表せる。従って、 $\sigma_{N \text{ or } F}(\theta) = |f_{N \text{ or } F}(\theta)|^2$ を定義すれば、near side cross section $\sigma_N(\theta)$ や far side cross section $\sigma_F(\theta)$ が計算出来る。

通常の荷電粒子の弾性散乱では、前方では σ_N が σ_F を圧倒し、後方では逆に σ_F が σ_N よりも断然大きくなる。この両者の強度が入れ替わる角度付近では両者が激しく干渉

し、微分断面積が散乱角とともに大きく変動する。このマニュアルに与えた、 $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ の 1.016 GeV のデータの例では、3 度付近の深い谷が Near/Far 振幅の干渉角度になっている。

ここでの N/F 分解は、式 (2.58) の誤差項 $O(\nu^{-1})$ を無視した議論だから、小さな軌道角運動量が散乱の主要項である場合には、この N/F 分解の議論は曖昧になる。

数値計算のメモ。

Legendre (陪) 関数の計算。opm.f だけならば $m = 0$ を対象とすれば良いが、elx.f も視野にいれると $m \neq 0$ の可能性を考えておく。

第 1・2 種 Legendre 関数は共通の漸化式をもつので、これを利用する。 $m = 0$ の場合の漸化式。

$$P_{l+1}(x) = ((2l+1)x P_l(x) - l P_{l-1}(x))/(l+1) \quad (2.76)$$

但し、初期値は以下の通り。

$$P_0(x) = 1, P_1(x) = x, \quad Q_0(x) = \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+x}{1-x} \right), Q_1(x) = x Q_0(x) - 1 \quad (2.77)$$

$m > 0$ に対しては次の漸化式を用いる。

$$P_{l,m+1}(x) = \{(l+m) P_{l-1,m}(x) - (l-m)x P_{l,m}(x)\}/\sqrt{1-x^2} \quad (2.78)$$

計算精度の確認は次の Wronskian relation を使用する。

$$P_{l,m}(x) Q_{l-1,m}(x) - P_{l-1,m}(x) Q_{l,m}(x) = \frac{(l+m-1)!}{(l-m)!} \quad (2.79)$$

右辺は $m = 0$ の時 $1/l$ であり、 $m > 0$ の場合には整数となる。

m が大きくなると、 $P_{l,m}(x)$, $Q_{l,m}(x)$ 共に絶対値が非常に大きくなるから、式 (2.79) の左辺は大きな数の差となり、桁落ちが激しくなる。そこで絶対誤差はからに大きくなるが、相対誤差はその場合でもかなり小さな値に押えられる。

$S(\theta)$ は $\sin^2 \theta/2$ が $1/2$ より大きい小さいかで計算法を以下の様にする。

$\sin^2 \theta/2 \leq 1/2$ の時、

$$S(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin^{2n} \theta/2}{1+n+i\eta} = \frac{1}{1+i\eta} - \ln(\cos^2 \theta/2) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(1+i\eta) \sin^{2n} \theta/2}{n(n+1+i\eta)} \quad (2.80)$$

別の収束を加速する方法を思い付いたのでメモしておこう。

$\sin^2 \theta/2 \leq 1/2$ の時、次の様な評価式を作ってみた。

$$S(x) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n+1+i\eta} \quad (2.81)$$

この式の両辺に $(1-x)$ を掛け、和の部分に $n=0$ からでなく、 $n=1$ から書き改める。

$$(1-x)S(x) = \frac{1}{1+i\eta} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{(n+i\eta)(n+1+i\eta)} \quad (2.82)$$

この変形により、右辺の和の収束速度が加速された。もう一度、同じ操作を行う。

$$(1-x)^2 S(x) = \frac{1}{1+i\eta} \left\{ (1-x) - \frac{x}{2+i\eta} \right\} + \sum_{n=2}^{\infty} \frac{2x^n}{(n-1+i\eta)(n+i\eta)(n+1+i\eta)} \quad (2.83)$$

この変形により、右辺の和の収束速度が加速された。もう一度、同じ操作を行う。

$$(1-x)^3 S(x) = \frac{1}{1+i\eta} \left[(1-x)^2 - \frac{x}{2+i\eta} \left\{ (1-x) - \frac{2x}{3+i\eta} \right\} \right] - \sum_{n=3}^{\infty} \frac{6x^n}{(n-2+i\eta)(n-1+i\eta)(n+i\eta)(n+1+i\eta)} \quad (2.84)$$

この操作により収束は加速されるが、最後の和項の分子の係数が階乗的に大きくなるので、収束の効率は期待した程には加速されなくなるので、もう止めよう。対数を使用する式は、系統的に式変形するのが面倒であり、結果の式が点検しにくいので、(2.80) は採用しない事にしよう。

$\sin^2 \theta/2 > 1/2$ の時には、 $\alpha + \beta = \gamma$ となっている場合の $F(\alpha, \beta, \gamma; z)$ に対する式を利用する。

$$S(\theta) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\Gamma(k+1+i\eta)}{k! \Gamma(1+i\eta)} [\psi(k+1) - \psi(k+1+i\eta) - \ln(\cos^2 \theta/2)] \cos^{2k} \theta/2 \quad (2.85)$$

ここで、 $\psi(x)$ は di-gamma 関数であり、次の関係式が成立する。

$$\psi(z+1) = \psi(z) + \frac{1}{z} \quad (2.86)$$

di-gamma 関数は 関数の親類だから、鞍点法を用いた漸近展開を利用するのが良いだろう。絶対値が大きな変数に対し、次の展開が有効だ。

$$\psi(z) \sim \ln(z) - \frac{1}{2z} - \frac{1}{12z^2} + \frac{1}{120z^4} - \frac{1}{252z^6} + \frac{1}{240z^8} - \frac{1}{132z^{10}} \cdots \quad (2.87)$$

この式は $|\arg(z)| < \pi$ という制限があるから、 $k+1 > |\eta|$ という条件で使用できる。この展開を用いると、 $\sin^2 \theta/2$ が大きい時の計算が出来る。従って、絶対値が大きな項を先に計算して、小さな k の値へ (2.86) を使って下げて行く。関数 $S(\theta)$ は散乱角に依存する部分と、散乱角に依存しない部分の積和で与えられる。散乱角に依存しない部分は、事前に計算して配列に保存しておくとう
127

光学ポテンシャルパラメータの自動探索

光学模型に対する Schrödinger eq. (2.37) を極座標を用いて書く。

$$\frac{d^2}{dr^2} u_l(r) = \left\{ \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (E - V) \right\} u_l(r) \quad (2.88)$$

ここで、角運動量による展開 (2.38) を仮定した。動径方向波動関数 $u_l(r)$ は、境界条件 (2.41) を満たす。

ポテンシャル $V(r)$ が $\delta V(r)$ だけ増加した時、動径方向の解は $u_l(r)$ から $v_l(r)$ に変化し、 C_l も δC_l だけ増加したとする。 $v_l(r)$ に対する (2.37) に対応する式を書き下し、この式と (2.37) から次の式を評価する。

$$\begin{aligned} I_l &\equiv \int_0^\infty \left(v_l \frac{d^2 u}{dr^2} - u_l \frac{d^2 v_l}{dr^2} \right) dr \\ &= \lim_{r \rightarrow \infty} \{ v_l(r) u'_l(r) - u_l(r) v'_l(r) \} \\ &= \delta C_l (O F' - F O') = k \delta C_l \end{aligned} \quad (2.89)$$

ここで、(2.41) や v_l に対する境界条件及びクーロン波動関数の Wronskian relation $F'_l G_l - G'_l F_l = k$ を利用した。但し、ここで ダッシュ (') は r に関する微分を表す。

一方、この積分は Schrödinger eq. を直接的に利用しても評価出来る。

$$\begin{aligned} I_l &= \frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty [v_l(r) V(r) u_l(r) - u_l(r) \{V(r) + \delta V(r)\} v_l(r)] dr \\ &\sim -\frac{2\mu}{\hbar^2} \int_0^\infty \delta V(r) u_l(r)^2 dr \end{aligned} \quad (2.90)$$

即ち、 C_l をポテンシャルの任意のパラメータ p で微分した形で書き直すと、

$$\frac{\partial C_l}{\partial p} = -\frac{2\mu}{k \hbar^2} \int_0^\infty \frac{\partial V}{\partial p} u_l(r)^2 dr \quad (2.91)$$

この式に依り、 C_l 係数のポテンシャルパラメータによる微分が評価出来る。

C_l 係数が決まると、微分断面積 $\sigma(\theta)$ は次式で与えられる。

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \left| f_C(\theta) + \sum_l C_l D_l(\theta) \right|^2 \quad (2.92)$$

ここで、 $f_C(\theta)$ はクーロン散乱の散乱振幅であり、荷電粒子対の衝突に際してのみ加える必要がある。 $D_l(\theta)$ はクーロン散乱の位相・幾何学的因子・Legendre 関数の積で与えられる。

散乱角 θ_i での実験値の微分断面積とその誤差を σ_i , δ_i と書く。ここで添字 i は散乱角度を指すとする。計算値が実験値を再現する程度を与える指標として、以下の式を定義し、罰金 (目的) 関数と呼ぶ。

$$S \equiv \sum_i \left(\frac{\sigma(\theta_i) - \sigma_i}{\delta_i} \right)^2 \quad (2.93)$$

罰金関数が小さくなるように、複数のポテンシャルパラメータの組を調節する。

罰金関数のポテンシャルパラメータによる微分は次式で評価出来る。

$$\frac{\partial S}{\partial p} = 2 \sum_i \frac{\sigma(\theta_i) - \sigma_i}{\delta_i^2} \frac{\partial \sigma(\theta_i)}{\partial p} \quad (2.94)$$

$$\frac{\partial \sigma(\theta)}{\partial p} = 2\Re \left(f^*(\theta) \sum_l D_l(\theta) \frac{\partial C_l}{\partial p} \right) \quad (2.95)$$

ここで星印 * は、複素共役を表す。

非線形極小化に関する事項

別の機会に書いたメモをコピーしておく。Simplex 法と可変計量法と呼ばれる二つの系統の処方が良く利用される。前者は、パラメータによる微分を利用しないので、プログラミングは簡単であるが収束は遅い。但し失敗する確率は小さい。後者は、微分を利用するので収束が速く、最終的には Hessian も与えてくれるので、パラメータの誤差に関する議論が出来る。従ってここでは 可変計量法を採用する。

可変計量法 (共役勾配法)

m 次元空間のある点 \mathbf{x}_0 から出発して、関数 χ^2 の極小値を探す訳だが、各点でこの関数の微分を計算出来るとする。説明の為に以下の線形方程式を解く問題を先ず引用する。

$$H\mathbf{x} + \mathbf{b} = 0 \quad (2.96)$$

この空間内に m 個の独立なベクトル \mathbf{d}_i ($i = 1, \dots, m$) をとり、これらのベクトルが $(\mathbf{d}_i, H\mathbf{d}_j) \propto \delta_{i,j}$ を満足するならば、これらのベクトル \mathbf{d}_i はお互いに共役であるという。この共役ベクトルが与えられているならば、上の連立 1 次方程式は簡単に解ける。解を以下の様に展開して、

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_0 + \sum_i \lambda_i \mathbf{d}_i \quad (2.97)$$

連立方程式に代入し、左から \mathbf{d}_i を掛ける。その結果、展開係数 λ_i は以下の様に確定する。

$$\lambda_i = -\frac{(\mathbf{d}_i, H\mathbf{x}_0 + \mathbf{b})}{(\mathbf{d}_i, H\mathbf{d}_i)} \quad (2.98)$$

これで、問題は解けた。この式は i 以外を含まないので、式 (2.97) の和をとる順番はどうでもよい。そのように、共役ベクトルが作ってある。問題は、共役なベクトルをどのようにして作るかにあり、世の中の共役勾配法による線形方程式の解法は、この点に努力を集中していると言って良いだろう。

上の x を展開する式で、 d_i は独立でさえあれば、共役である必要は無いのでは？という疑問があるだろう。原理的にはそれでも良いが、この時には線形方程式を解くという問題は、全然簡単にならない。

行列 H の固有ベクトルは u_i は、ここで述べた共役性を満足する。従って固有ベクトルが確定出来るような行列には必ず共役なベクトルが存在する。

更に言えば、 d_1 を適当に与えた時、以下の漸化式により共役ベクトルを作る事が可能である。

$$d_{i+1} = H d_i - \frac{(d_i, H^2 d_i)}{(d_i, H d_i)} d_i - \frac{(d_i, H d_i)}{(d_{i-1}, H d_{i-1})} d_{i-1} \quad (2.99)$$

但し、 $i = 1$ の場合には、右辺第 3 項は不要である。

線形方程式を解く事は、以下で定義される 目的関数 (χ^2 になぞらえられる) $S(x)$ を最小化する事とは等価である。

$$S(x) = a + (x, b) + 1/2(x, Hx) \quad (2.100)$$

微分して 0 とおくと、最初に述べた連立方程式に辿り着く。

任意のベクトル x_0 から出発して、ベクトル d_1 の方向に沿って、関数 $S(x)$ の極小値を与える点を探し $x_1 = x_0 + \lambda_1 d_1$ にたどり着く。目的関数が上で与えた $S(x)$ の時、この λ_1 は上で与えた λ_1 と一致する。点 x_1 から d_2 方向に沿って極小点を探す。この手続きを繰り返すと、 $S(x)$ が 2 次形式ならば m 回で、極小点にたどり着く。 $S(x)$ が非線形ならば、更に何回か ‘お鉢巡り’ を繰り返す必要があるだろう。

非線形の極小化過程は、方向ベクトル d_i の決定と、その方向に沿っての関数値が極小になる点を探すという二つの作業を納得がいくまで繰り返す事である。ここで利用している手法では、ある方向に沿っての極小値探索は不要という事である。

Davidon の可変計量法では、最初の d_1 としては $\nabla_x \chi^2$ を採用し、この方向の線上に最小値を探し、この位置を x_1 と置く。上に与えた行列 (の逆行列) をこの位置での微分 $\nabla \chi^2(x_1)$ を用いて改良していく。もしも旨く 逆行列 H^{-1} が推定できれば、上に与えた連立 1 次方程式は簡単に解けてしまう。即ち、 $x = H^{-1}b$ と与えられてしまう。

χ^2 極小化問題では、行列 H は与えられていないので、線形問題の場合の様に簡単ではない。

共役勾配法は Hestenes と Steifel のいわゆる世紀の大発見を Davidon が極小化に応用したものであるが、Davidon の論文は難しいので Fletcher の解説を皆が引用する様である。

参考文献: R. Fletcher, The Computer Journal 13(1970) 317

関数の極小化において、パラメータ空間の谷に沿って極小値を探す事が大切である。効率を重視しすぎて、大胆な歩幅を採用すると、谷沿いに探さずに、岡や峰を越えて別の谷に乗り換えてしまう事がある。

Fletcher の論文にある計算例のひとつは、この例になっていると思われる。専門家の論文にも見落としがあるのだと想像している。

誤差に付いて

次の様に考えるのが良いと個人的には思っている。 χ^2 の極小値を与える \mathbf{x}_{min} が決定されたとする。この時の χ^2 の値が 1 程度の大きさならば、測定やパラメータの決定が妥当であると考えられ、この判定を 2 乗判定と呼ぶ。

この極小値付近では χ^2 は以下の様に振舞うはずである。

$$\chi^2(\mathbf{x}_{min} + \delta\mathbf{x}) = \chi^2(\mathbf{x}_{min}) + \frac{(\delta\mathbf{x}, H\delta\mathbf{x})}{2} + O(\delta x^3) \quad (2.101)$$

Taylor 展開の内、1 階微分の項は極小値の条件により 0 である。右辺第 2 項が、誤差情報を含んでいる。ここで、 H は以下の様な 2 階微分を成分とする行列である。

$$H_{ij} = \frac{\partial^2 \chi^2}{\partial x_i \partial x_j} \quad (2.102)$$

この行列 H を誤差行列と呼ぶ場合もある。誤差分布関数が ガウス関数で与えられると仮定すると、誤差 ξ が発生する確率は、 $\exp\{-\xi^2/(2\sigma^2)\}$ と書けた事を思い出そう。従って、 $(\delta\mathbf{x}, H\delta\mathbf{x})/2 = \sum_i \delta q_i^2 / 2\sigma_i^2$ と変形出来たとすると、 σ_i が第 i パラメータの誤差を表現しているはずである。

この行列は一般に言って非対角要素を含む。即ち、決定されたパラメータの値はお互いに相関している。従って個別のパラメータの誤差を云々する前に考えておくべき事がある。そこでこの行列を対角化し、その固有値と固有ベクトルを考える。行列 H の固有値 λ_i を対角要素として持ち、他の要素は全て 0 である行列を Λ 、対応する固有列ベクトル \mathbf{u}_i を並べて作られた行列 U を持ってくる。

$$HU = U\Lambda, \quad \text{又は} \quad H = U\Lambda U^\dagger \quad (2.103)$$

この記号を使うと交差項が消える。

$$(\delta\mathbf{x}, H\delta\mathbf{x}) = (\delta\mathbf{x}, U\Lambda U^\dagger \delta\mathbf{x}) = \sum_i \lambda_i \delta q_i^2 \quad (2.104)$$

一般的に言えば行列 H は非対角要素があるがこの表現では相関が無い、即ち完全に独立な誤差ベクトルを以下の様に定義出来る。 $\delta\mathbf{q}_i = \delta q_i \mathbf{e}_i$ と定義する。当然ながら、 \mathbf{e}_i は第 i 成分のみが 1、他は 0 という基本単位ベクトルである。この誤差ベクトルの大きさは、 $\delta q_i = 1/\sqrt{\lambda_i}$ とする。現実のパラメータ空間での完全に独立な誤差ベクトル $\delta\mathbf{x}_i$ は、 $\delta\mathbf{q}_i$ と、以下の関係にある。

$$\delta\mathbf{x}_i = U\delta\mathbf{q}_i = \delta q_i \mathbf{u}_i \quad (2.105)$$

この m 個の誤差ベクトルの第 j 成分が、パラメータ x_j の誤差を与える。各独立誤差ベクトルの j 成分の 2 乗和を計算する。

$$\delta x_j^2 = \sum_i (\delta q_i U_{ji})^2 = (H^{-1})_{j,j} \quad (2.106)$$

最後の式は、次の様にして導く。

$$H_{j,j}^{-1} = (U \Lambda^{-1} U^{-1})_{j,j} = \sum_i \frac{1}{\lambda_i} U_{j,i}^2 \quad (2.107)$$

即ち、パラメータ x_j の誤差は行列 H の逆行列の対角成分の平方根である。従って、実際問題として固有値や固有ベクトルの計算は不要である。行列 H を経由して誤差を評価したいならば、その固有値 λ_j を計算して逆数を取り、その平方根を計算すれば良い。

別の言い方をすると、固有ベクトルの方向にパラメータを増加させた時、固有値はパラメータ空間の曲率を与える。即ち曲率が大きい程その方向のパラメータは正確に決定されていると言える。

ここで登場した行列 H は、可変計量法で推定する行列 H^{-1} とは逆行列の関係にある。逆行列の固有値は、元の行列の固有値の逆数であり、固有ベクトルは両行列で共通であるから、誤差の推定という意味では、可変計量法は非常に有難い方法である。

パラメータの誤差評価に関連する副プログラムの解説

罰金関数の極値付近での振舞いを記述する為に、Hessian の固有値と固有ベクトルを計算している。この部分の詳細は忘れてしまった。そこで、他のメモからの抜粋をコピーしておく。

実対称行列を対象とする。先ず elementary orthogonal matrix という概念を紹介しよう。この行列を、小山と山本は 素直交行列、一松 は基本直交行列と呼んでいる。

\mathbf{u} を実単位列ベクトル、即ち $(\mathbf{u}, \mathbf{u}) = 1$ 、とし、行列 U をつくる。

$$U = 1 - 2\mathbf{u}^\dagger \mathbf{u}, \quad \text{即ち } U_{i,j} = \delta_{i,j} - 2u_i u_j^* \quad (2.108)$$

この行列 U は直交行列である。

この行列 U を列ベクトル \mathbf{v} に掛ける。

$$U \mathbf{v} = \mathbf{v} - 2(\mathbf{u}, \mathbf{v})\mathbf{u} = \mathbf{w} \quad (2.109)$$

\mathbf{u} は、単位ベクトルという以外には条件が無いので、ベクトル \mathbf{w} はノルムが \mathbf{v} と等しいという以外には色々の形をとらせる様に \mathbf{u} を選べる。良く利用されるのは、 \mathbf{w} が基本単位ベクトルに比例するという選択である。もしも \mathbf{v} がある行列の列ベクトルならば、その行列の特定の列ベクトルの一つの成分以外は 0 と出来る事を意味する。この手法を繰り返すと、行列の左下半分を全て 0 とするような変換が可能となる。この変換は Householder 変換として知られている。

対称行列にこの手法を直接適用すると、非対称行列になる。対称性を保ったまま変換するには、右からも転置した行列を掛ける。即ち、以下の様に Householder 変換を拡張する。

N 次実対称行列 A と直交行列を P_1 を以下の様に分解しよう。

$$A = \begin{pmatrix} c & \mathbf{d}^T \\ \mathbf{d} & B \end{pmatrix}, \quad P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & Q \end{pmatrix} \quad (2.110)$$

ここで、 $c = A_{1,1}$ 、 \mathbf{d} は行列 A の第 1 列ベクトルから、 $A_{1,1}$ を除いて作られた $(N-1)$ 個の成分を有する列ベクトルである。 Q は $N-1$ 行 $N-1$ 列の基本直交行列であり、 \mathbf{u} は $(d_1 - \lambda, d_2, \dots, d_{N-1})^T$ に比例する単位ベクトルとする。但し、 $\lambda^2 = (\mathbf{d}, \mathbf{d}) = \sum_{i=2}^N A_{i,1}^2$ であり、計算精度を確保するために、 λ は d_1 とは異符号とする。この時、 P_1 で変換された行列 $A_1 = P_1 A P_1$ の第 1 列ベクトルは、(対称行列だから第 1 行も) 最初の二つの成分だけが 0 でなく、残りの成分は全て 0 となる。

A_1 の右下の $N-1$ 行 $N-1$ 列行列を新しい A 行列だと看做して同様の操作を繰り返して行くと、 $(N-1)$ 回の直交変換で、 A は対称な 3 重対角行列に変換される。

$$A_{N-1} = P A P = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & 0 & \cdots \\ 0 & \beta_2 & \cdots & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \beta_{N-1} & \alpha_N \end{pmatrix} \quad (2.111)$$

ここで、 $P = P_{N-1} \cdots P_2 P_1$ は一つの直交行列である。

直交変換であるから、 A と A_{N-1} の固有値は等しい。この変換も、Householder 変換と呼ばれる場合もある。

固有値の計算

上で与えた操作に依り、かなり構造の単純な行列の固有値を計算する問題に帰着出来た。問題の次数が低い場合や、全部の固有値を計算する必要がなければ、ここで代数方程式を解くという選択もあり得る。ここでは、全ての固有値を計算するという場合を想定し QR 法を採用する。

Q をユニタリー行列、 R を右上三角行列 R として、次の事実がある。

1) 与えられた行列に対して、QR 分解を行い、これを逆順に掛ける。

$$C_0 = Q_1 R_1, \quad C_1 = R_1 Q_1 \quad (2.112)$$

C_1 を C_0 だと考えて、同様の操作を繰り返し C_2, \dots, C_N を計算する。

この時、 C_N , ($N \rightarrow \infty$) の主対角成分には左上から右下に向かって、固有値が絶対値の大きな順に並び、左下要素は 0 に収束する。証明は、例えば一松信「数値解析」(朝倉書店) 51 ページを見よ。

QR 法の原理的な手順は、Gram-Schmidt の正規直交化を思い起こせば良い。

2) C_0 が対称な 3 重対角行列ならば、 C_1 も対称な 3 重対角行列である。

従って、何回 1) の操作を繰り返しても 3 重対角行列である。

3) ある定数 c と単位行列 E を用い、 $C - cE$ という行列をつくる。新しい行列 $C - cE$ の固有値 μ は C の固有値 λ とは $\mu = \lambda - c$ の関係にある。この操作を原点移動と呼ぶ。

少し解説をしておこう。任意のベクトル \mathbf{x} を、 C の固有ベクトル \mathbf{u}_i , ($i = 1, 2, \dots, N$) で展開する。

$$\mathbf{x} = \sum_i x_i \mathbf{u}_i \quad (2.113)$$

この式に左から行列 C を k 回掛けると、

$$C^k \mathbf{x} = \sum_i \lambda_i^k x_i \mathbf{u}_i \quad (2.114)$$

λ_i は、固有ベクトル \mathbf{u}_i に対応する固有値である。右辺は、 k が増すと絶対値が一番大きな固有値に対応する成分が抜きん出て来る事を意味する。複数回行列をかけるだけでは、絶対値が最大の固有値しか顔を出さない。そこで、直交化を組み合わせると、絶対値が最大でない固有値も独立に顔を出すようになる。繰り返しに対する収束率は、固有値の大きさの比になり、絶対値が大きな固有値から順に並ぶのも推察出来るだろう。

収束率を上げる為には、最も小さな絶対値の固有値 λ_{min} を推定してこの推定値分だけ、全ての対角要素から差し引いた行列に対して、QR 法を適用すれば良い。

λ_{min} の推定は、右下隅の 2 行 2 列の行列に対する固有値問題 (即ち 2 次方程式を) 解き、右下の行列要素が最小になる方の解を採用し、原点移動をするのが良いようである。2 行 2 列を取り上げる理由は、固有値が複素数、絶対値が等しい場合を想定するからである。

何度か QR 法の過程を繰り返し、右下隅の値が収束すれば、この部分を切り離し、 $N-1$ 又は $N-2$ 次の固有値問題を解く。

参考文献 戸川隼人著 マトリックスの数値計算 (オーム社 昭和 46 年) pp 210

固有ベクトルの計算

固有値が計算出来ると、固有ベクトルも簡単に計算出来る。これには、逆反復法が最適だろう。先ず、行列 C とその逆行列 C^{-1} の固有値は一方の逆数であり、固有ベクトルは同一であるという事実に着目し、固有値分だけ原点移動した逆行列を取り上げる。先に計算

されたのは、本物の固有値 λ_i に対する近似値 $\tilde{\lambda}_i$ だと考えて、未知の固有ベクトル \mathbf{u}_i が満足する式を書く。

$$(C - \tilde{\lambda}_i)^{-1} \mathbf{u}_i = \{1/(\lambda_i - \tilde{\lambda}_i)\} \mathbf{u}_i = \mathbf{x} \quad (2.115)$$

係数 $1/(\lambda_i - \tilde{\lambda}_i)$ は、時には発散するほどの極端に大きな数である。逆行列を右辺に移すと、

$$\mathbf{u}_i = (C - \tilde{\lambda}_i) \mathbf{x} \quad (2.116)$$

即ち、未知のベクトル \mathbf{x} に右辺で定義された行列を掛けると、固有ベクトル \mathbf{u}_i が計算できるという魔法の様な関係式が得られた。最初は、任意にベクトル \mathbf{x} をでっちあげて、(2.116) を解き、固有ベクトル \mathbf{u} の近似値を作る。計算精度を上げるために、最初に得られた (2.116) 左辺のベクトルを規格化して、右辺の \mathbf{x} の代用にすると良い。 $x_i = 0$ という例外的な場合以外は、2 - 3 回このプロセスを繰り返すと収束するだろう。

固有ベクトルの計算には、元から与えられた行列 A を用いても良いし、 C を用いても良い。 A の固有ベクトルを並べて作った行列 U と C の固有ベクトルを並べて作った行列 V とは、 $U = X V$ の関係にある。ここで行列 X は、先に A 行列を C に変形するのに導入された。

OPM プログラムの構造

Main

OPM10	NUCSPE		
	GETPP		
	GETPM		
CPHAS2			
CWF	CF3		
	CF2		
	COUPS		
OPM20	POTCAL		
	SEINT		
	FCNEAR		
	PQCAL		
OPM30	FCAMP		
	POTCAL		
	SEINT		
OPM40	CNGRD	OPM45	POTCAL
			POTDER
			SEINTA
		HTRANS	
		QREV	
		EVECX	

OPM20

一番左に主プログラムがあり、右に書かれたプログラム単位は左に書かれたプログラム単位の下請けプログラム単位である。

プログラム単位毎の機能の説明

Main 全体の制御

- 1) 入出力ファイルを開く
- 2) 基本定数を定義する
- 3) 副プログラムを順次呼ぶ
- 4) 入出力ファイルを閉じる

OPM10 データ入力

- 1) 全ての入力データを読み込む
- 2) 核反応の記述欄を解析し、質量・電荷や入射エネルギーを定義する
- 3) 弾性散乱固有のパラメータと計算に必要なパラメータを決定する
- 4) 計算パラメータの出力

5) 以下の様な default パラメータの決定法

RMX 最大積分半径：核力ポテンシャルが 10 進数換算で $NPOW(KNTL(3))$ 桁小さくなる半径とする。

LMAX 最大軌道角運動量：上記 RMX が変曲点となる軌道角運動量

$L_{MIN}=L_{MAX}=L_{DEL}=0$ と入力して、内部で決定させるのが妥当だろう。

DR 積分刻み幅： $1 / (\text{波数} \times 2^{NSTEP})$ $NSTEP=KNTL(4)$ 。

$NSTEP=3, 4$ 程度が妥当である。

NUCSPE 反応記述欄の解読

質量等の核データファイル umtab を利用する

GETPP 光学ポテンシャルパラメータ、PPARAM, RC を読み込む

自動探索を想定すると、パラメータの直後に文字 'A', 'G' を書く事がある。この文字を識別して、読み込みの確認と後の仕事の準備の為に、IDP という配列を定義する。

GETPM NGRID, DGRID 変数の値を読み込む。PPARAM に記号 'G' 指定があると、繰り返し指定 NGRID 又は 歩幅指定 DGRID の直前に 3 文字記号 $+/-$ を付ける場合がある。JSGX=1 ならば、3 文字記号は使用せず、=1 ならば 3 文字記号を使用する事を示す。

CPHAS2 $\exp(2i\sigma_L)$ を複素配列 ESIG に返す

CWF クーロン波動関数を計算する

解説は省略する。下請けを利用している

OPM20 光学ポテンシャルの下での微分断面積計算を制御する

- 1) ポテンシャル表を計算し、PTAB 配列に書き込む
- 2) 動径方向シュレーディンガー方程式を解き、対数微分を CCOEF 配列に書き込む
- 3) クーロン波動関数と位相を計算する
- 4) 上記対数微分を C_l 係数に換算する
- 5) 微分断面積を計算し、出力する

POTCAL ポテンシャル表を実際に計算する

配列 PTAB には 複素中心力ポテンシャルを書き込む。

この POTCAL 副プログラム内では、配列 PTAB は実数配列として扱われるが、

OPM20, SEINT 副プログラム内では複素配列として利用される。

SEINT シュレーディンガー方程式を解く

- (1) PTAB に 一様帯電球のクーロンポテンシャルと重心の運動エネルギーが足し込む
- (2) Schrödinger eq. を解き、接続点でクーロン波動関数と繋ぐ
- (3) 部分波散乱振幅を計算する
- (4) 光学ポテンシャルの角度積分を計算する (感受性評価を参照)

FCNEAR 散乱振幅の near/far 分解を想定し、クーロン散乱の near side scattering amplitude をクーロン散乱の振幅で割ったもの (FCN) を返す。

PQCAL 第 1 種と第 2 種の Legendre 関数 (PL, QL) を返す。

OPM30 grid search の流れを制御する。

FCAMP クーロン散乱の散乱振幅 (FC) を返す。

OPM40 光学ポテンシャルの自動探索の制御をする。

CNGRD 共役勾配法 (可変計量法) を用いて、罰金関数の極小値を探す。

OPM45 自動探索の罰金関数 (FX) 及びそのパラメータによる微分 (GX) を返す。

POTDER 光学ポテンシャルのパラメータによる微分 (PDER) を返す

SEINTA 機能的にはほとんどが SEINT と重複する。C 係数 (CCOEF) 及びそのパラメータによる微分 (CDER) を返す。

HTRANS CNGRD が計算した極小値付近での Hessian (H) を三重対角化する。

QREV 上で三重対角化された行列の固有値を計算し、配列 (A) に返す。

EVECX 三重対角化された行列とその固有値を用い、逆代入法により、固有ベクトルを配列 (U) に返す。

使用する変数の意味

NRX 積分点数 (入力、整数変数)

PTAB ポテンシャルの表 (入力、複素配列)

CLDER 波動関数の対数微分 (出力、複素配列)

LMAXX 最大軌道角運動量 (入出力、整数変数)

ひょっとして、内部で変更されるかもしれないので、LMAX をコピーして使用している。

NS 積分開始点。安全の為に、原点から積分を開始しない場合がある。

指導原理は、 $x \times j_L(x)$ が最初のピークを持つ点でのピーク値の 10^{-10} の値を与える最初の半径を推定し、その点を積分開始点としている (後出)。

この積分開始点とポテンシャル表の長さを比較し、必要ならば軌道角運動量を減らす必要がある。

CU 現在積分中の点と過去の 2 点の波動関数の値を保存する複素配列。変数 I1, I2, I3 がこの順番で過去の値を保存している。

CP (ポテンシャルと波動関数の積) に数値積分の為に補助定数を掛けたものが書き込まれている。IP1, IP2, IP3, IP4, IP5 が古い順に CP に対するポインターになっている

C1 接続点での波動関数の微分を保持する。接続点の両側 3 点ずつの波動関数の値を利用している

C0 接続点での波動関数の値を保持する

R2I $1/r^2$ に対応する値を保持する。計算速度を上げるために、最初に一度だけ計算する

ポテンシャルの行列要素計算の為に、以下の変数を追加した。

U 計算途中の波動関数の絶対値の 2 乗

UV ポテンシャルの行列要素。 $\sum_l (2l+1) u_l(r)^2 V(r)$

CV 光学ポテンシャルの表

module /OPMCOM/の変数

PPARAM 光学ポテンシャルパラメータを保持 (2次元実数配列) 第 1 添字は、ISI,ISD,V,R,A の 5 個の変数に対応し、第 2 添字はカード番号である。これらの添字はパラメータの自動探索に際し、探索対象パラメータとポテンシャルパラメータの対応を維持するのに使用される。

EM 原子質量単位での質量を保持する (3 個の実配列) 1 は標的、2 は入射粒子、3 は放出粒子。ここでは 3 は使用していない

ANG0,ANG1,DANG 微分断面積を計算する角度情報 (実数変数)

ANGTAB 実際の散乱角度を保持する数表。これらの角度情報は、与えられた光学ポテンシャルの下での微分断面積の一般的な振舞いを与えるのに使用される。

DR 微分方程式を解く時の刻み (実数変数)

ECM 重心系でのエネルギー (実数変数)

EFAC $2\mu/\hbar^2$ (実数変数)

ETA 重心系でのクーロンパラメータ (実数変数)

FK 重心系での波数 (実数変数)

RC 電荷半径 (実数変数)

RMX 最大積分半径 (実数変数)

RMAS 換算質量 (実数変数 [MeV])

FCOU, GCOU, FPCOU, GPCOU 接続点でのクーロン波動関数を保持する 1 次元実配列。添字は軌道角運動量に対応する。

VCOU クーロンポテンシャルを保持する 1 次元実配列。添字は r に対応する。

PL, QL 第 1 種と第 2 種の Legendre 関数を保持する 1 次元実配列。添字は軌道角運動量に対応する。Legendre 関数の計算は、この配列を経由する場合としない場合がある。第 2 種の場合には、多項式項の計算に第 1 種 Legendre 関数を使用しているの、これを保持している方が有利だから、この配列を導入した。

R2I 遠心力ポテンシャルを想定し、 $(DR)^2/240 r^2$ を保持する 1 次元実配列。添字は r に対応する。

CCOEF SEINT(SEINTA) にて C_L を保持する複素 1 次元配列。OPM20, OPM30, OPM40 では、これに他の係数を掛けたものを保持する。添字は軌道角運動量に対応する。

CE クーロン散乱の位相のずれに対応する $e^{2i\sigma_l}$ を保持する複素 1 次元配列。添字は軌道角運動量に対応する。

FC クーロン散乱の散乱振幅を保持する複素 1 次元配列。添字は散乱角に対応する。

CGK 散乱振幅の内、 C_L 係数と Legendre 関数以外の部分を保持する複素 1 次元配列。添字は軌道角運動量に対応する。

PTAB 光学ポテンシャルの値を保持する複素 1 次元配列。添字は r に対応する。

KNTL 制御変数 (整数配列)

IA 質量数 (3 個の整数配列)

IS 粒子 1 から 3 のスピンの 2 倍 (3 個の整数配列)

IZ 原子番号 (3 個の整数配列)

JP パリティ (3 個の整数配列)

NANG 散乱角の数、 $(ANG1-ANG0)/DANG+1$ 、 を保持する。

NRX r 積分の点数

LMIN,LMAX,LDEL 軌道角運動量の制御変数 (整数変数)

module ASGRD の変数

自動探索関連のパラメータを保持する。

ISAG 自動探索の対象パラメータに付与された記号が 'G' か 'A' かを識別する。'G'('A') なら 1(2). それ以外は 0。

IDP 自動探索対象のパラメータの、PPARAM 配列上の位置を示す、整数型 1 次元配列。
第 1 (1 0) の桁は何番目の PPARAM の第 1 (2) 添字を記録している。もしも RC
が探索対象ならば、1 0 の桁は NPOT(KNTL(2)) 以上の値を指している。

JD 'G' 又は 'A' を付けられた、パラメータ数。

NG 'G' を付けられたパラメータ数

NAS 'A' を付けられたパラメータ数

NGRID grid search 時の繰り返し点数。

DGRID grid search 時のパラメータの増分。

ITERMX 自動探索時の最大探索回数。全ての独立な方向への探索を終える度に一つずつ増える。CNGRD 副プログラムでは Large loop とコメントしているループである。

CONV 自動探索時の収束判定の基準。

XTAB 自動探索の対象となるパラメータの表。パラメータの現在値を保持している。

NEXP 実験データの角度の数

ANGEX 実験データの角度の表。(度単位)。1 次元実数型配列。この角度は、ANGTAB
とは独立に保持される。即ち、こちらの角度に対するデータが自動探索の対象となる。

SEX 微分断面積 (第 1 添字) とその誤差 (第 2 添字)。実数型 2 次元配列。単位は mb/sr
である。常に絶対値を要求している。

PDER ポテンシャルの微分を保持する 2 次元実配列。第 1 (2) 添字は r (ポテンシャルパラメータの ID) を表す。

CDER C_L 係数のポテンシャルによる微分を保持する複素 2 次元配列。第 1 (2) 添字はポテンシャルパラメータの ID (L) を表す。

module FUND の変数

AMU 1 原子質量単位をエネルギー (MeV) 換算した値

CFAC $e^2/4\pi\epsilon_0$ [MeV fm⁻¹]

HBARC $\hbar c$ [MeV fm]

EMAS 電子質量をエネルギー換算した値原子質量から原子核質量に変換する場合、この電子質量分を補正している。逆に言えば、電子の束縛エネルギーは補正していない

PI 勿論、円周率である。

RAD 角度を度表示から ラジアン単位に変換する変換係数

2.5 bgpot

ここでは、核子光学ポテンシャルに関する 3 個のプログラム bgpot.f, jlmptot.f, wv2.f の情報を記す。

bgpot.f 主に、核子光学ポテンシャルの具体的な数値を与える事を目的とした、簡単なプログラム。以下の論文を参照している。

BG Becchetti et al., Phys. Rev. 182 (1969) 1190

CH86 Varner et al., Phys. Lett. B185(1987) 6

Menet Menet et al., Phys. ReV. C4 (1971) 1114

CH89 Varner et al., Phys. Rep. 201 (1991) 59

Watson Watson et. al., Phys. Rev. 182 (1969) 977

Koning Koning and Delaroche Nucl. Phys. A713 (2003) 231

Daehnick Daehnick et. al., (DCV 79 F) Phys. Rev C21 (1980) 2253

jlmptot.f jlmptot.f は、以下の JLM 論文と呼ばれる論文の、核子光学ポテンシャルの中心力部分を計算するプログラムである。

依拠した論文は、以下のものである。

J.-P. Jeukenne, A. Lejeune, and C. Mahaux, Phys. Rev. C 16(1977)80.

ww2.f 光学ポテンシャルが、関数値表として与えられた時、この関数を Woods-Saxon, Woods-Saxon の微分、又はその和で展開するプログラム

bgpot

核子と重陽子の global potential として時々引用される例に対して、ポテンシャルパラメータを出力する対話形式のプログラム。

入射粒子とその実験室系での運動エネルギー、標的核の原子番号と質量数及び上記論文の略号を入力する。

対話形式であり、日本語で訊いて来るので、数値や記号を入力すればよい。

出力するポテンシャルの関数型の定義は、ポテンシャルの強さにおける負号を除いて、TWOSTP/TWOFNR と同じである。

$$V(r) = \frac{V_R}{1 + e_R} + \frac{\lambda_\pi^2}{r a_{ls}} \frac{V_{ls} e_{ls}}{(1 + e_{ls})^2} \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} + i W \left\{ \frac{1 - C_{SD}}{1 + e_I} + C_{SD} \frac{4 e_I}{(1 + e_I)^2} \right\} \quad (2.117)$$

ここで、

$$e_R \equiv \exp\left(\frac{r - R_R}{a_R}\right), \quad e_I \equiv \exp\left(\frac{r - R_I}{a_I}\right), \quad e_{ls} \equiv \exp\left(\frac{r - R_{ls}}{a_{ls}}\right) \quad (2.118)$$

であり、半径 R_x と半径パラメータ r_{0x} とは、標的の質量数 A を介して、以下の関係がある。

$$R_x = r_{0x} \times A^{1/3}, \quad \text{ここで、} x = R, I \text{ or } ls \text{ である} \quad (2.119)$$

λ_π は荷電 π 粒子のコンプトン波長であり、 $\lambda_\pi^2 = 2 \text{ fm}^2$ と近似している。

但し、Watson potential のスピン・軌道力では、 $\frac{\lambda_\pi^2}{r a_{ls}}$ でなく $\frac{\lambda_\pi^2}{R_{ls} a_{ls}}$ となっている。軽い原子核で、原点付近の振舞をおとなしくするためである。

TWOSTP/TWOFNR のマニュアル等は以下のホームページから入手してください。

<http://web.tac.tsukuba.ac.jp/~yaoki>

jlmipot

標的核の陽子・中性子密度を与えて、核子光学ポテンシャルの中心力部分を推定するプログラム。

入(出)力ファイル名は jlm.in(jlm.out) であり、論理機番は 5 (6) とする。入力は、一行が最大 80 文字で構成される行単位であり、一行目を除いて FORTRAN の規約による無書式である。

1 組 (KTRL(i), i=1,10), TITLE, FORMAT(10I2,A50)

KTRL(1) 1 ならば陽子光学ポテンシャルの計算

KTRL(2) 陽子密度の項数. もしも負ならば JLM 論文の式 (37,38,39) を使用する。

KTRL(3) 中性子密度の項数もしも負ならば JLM 論文の式 (37,38,39) を使用する。

KTRL(4) = $n (> 0)$ 密度関数を n 点おきに出力する。 $n = 0$ 又は負ならば出力しない。

KTRL(5) = $n (> 0)$ V_0, V_1, W_0, W_1 を n 点おきに出力する。 $n = 0$ 又は負ならば出力しない。

KTRL(6-10) 利用していない

TITLE 特に利用していない。忘備メモとして利用

2 組 IZ, IA, EIN, RC, DR, NR, FRANG

IZ 原子番号

IA 質量数

EIN 入射エネルギー [MeV]

RC 電荷半径 [fm]

DR, NR 出力するポテンシャル表の刻み幅 [fm] と点数

FRANG finite-range 補正用パラメータ [fm] もしも非常に小さな値ならば、JLM 論文の式 (59) の値 $FRANG(=t) = 1.2$ [fm] を使用する。

3 組 ((DPAR(m, n), m= 1, 4), n= 1, KTRL(2)) 陽子密度関数のパラメータ。KTRL(2) 行からなる。KTRL(2) 組の関数を重ね合わせる。KTRL(2) が負ならば、この組は入力してはいけない。

DPAR(1,*) =1 ならば、Woods-Saxon、=2 ならばその微分の 4 倍

DPAR(2,*) = ρ_0 [fm^{-3}] ρ_0 は相対的な荷重である。内部で、陽子数に規格化される。

DPAR(3,*) = R , [fm]

DPAR(4,*) = a , [fm]

4 行目 ((DPAR(m,n), M=1,4), n=1, KTRL(3))

中性子密度関数のパラメータ。KTRL(3) 行からなる。KTRL(3) が負ならば、この組は入力してはいけない。

いわゆる JLM 論文のメモ

弧の論文は Reid hard core potential と 中性子密度、陽子密度、核子密度等 $\rho_n, \rho_p, \rho (= \rho_n + \rho_p)$ 、 $\alpha = (\rho_n - \rho_p)/\rho$ から、核子光学ポテンシャルの中心力部分を作り上げる事を目的とする。

中性子と陽子の光学ポテンシャルは次式とする。

$$\begin{aligned} V_n(\rho, E) &= V_0(\rho, E) + \alpha V_1(\rho, E) \\ W_n(\rho, E) &= W_0(\rho, E) + \alpha W_1(\rho, E) \\ V_p(\rho, E) &= V_0(\rho, E) + \Delta_c(\rho, E) - \alpha V_1(\rho, E - V_C) \\ W_p(\rho, E) &= W_0(\rho, E) + W_C(\rho, E) - \alpha W_1(\rho, E - V_C) \end{aligned} \quad (2.120)$$

$V_n, V_p, (W_n, W_p)$ は核子ポテンシャルの実 (虚) 部を表す。クーロンポテンシャル V_C は別途計算するのだろう。

ここで、

$$V_0(\rho, E) = \sum_{i,j=1}^3 a_{i,j} \rho^i E^{j-1} \quad (2.121)$$

展開係数の表はこの式の後半に纏めた。

V_0 がきまると、クーロン項は以下の式で与えられる。

$$\begin{aligned} \Delta_c(\rho, E) &= V_0(\rho, E - V_C) - V_0(\rho, E) \\ W_C(\rho, E) &= W_0(\rho, E - V_C) - W_0(\rho, E) \end{aligned} \quad (2.122)$$

この式は、式 (2.120) と見比べると、陽子に対しては、入射エネルギー E を $E - V_C$ と置き換えて計算しなさいと言っている。

更に、有効質量、k 質量 と E 質量 m^*, \tilde{m}, \bar{m} も計算出来る。

$$\frac{m^*(\rho, E)}{m} = 1 - \frac{d}{dE} V_0(\rho, E) = \frac{\tilde{m}}{m} \times \frac{\bar{m}}{m}, \quad \frac{\tilde{m}(\rho, E)}{m} = 1 - \sum_{i,j=1}^3 c_{i,j} \rho^i E^{j-1} \quad (2.123)$$

アイソスピン依存項は、次式を利用する。

$$V_1(\rho, E) = \frac{\tilde{m}}{m} \sum_{i,j=1}^3 b_{i,j} \rho^i E^{j-1} \quad (2.124)$$

フェルミエネルギー ϵ_F は次式とする。

$$\epsilon_F = \rho(-510.8 + 3222 \rho - 6520 \rho^2) \quad (2.125)$$

虚部ポテンシャルの計算は、次式による。

$$W_0(\rho, E) = \left[1 + \frac{D}{(E - \epsilon_F)^2} \right]^{-1} \sum_{i,j=1}^4 d_{i,j} \rho^i E^{j-1}$$

$$W_1(\rho, E) = \frac{m}{\bar{m}} \left[1 + \frac{F}{E - \epsilon_F} \right]^{-1} \sum_{i,j=1}^4 f_{i,j} \rho^i E^{j-1} \quad (2.126)$$

ここで、 $D = 600$ [MeV²]、 $F = 1$ [MeV] とする。

核子密度

JLM 論文では陽子と中性子の密度は、同じ関数形だと仮定する

$$\rho^{(\kappa)}(r) = \frac{\rho_0^{(\kappa)}}{1 + \exp[(r - C_\rho)/a_\rho]} \quad (2.127)$$

ここで、 $a_\rho = 0.54$ [fm]、半径は $C_\rho = (0.978 + 0.0206 A^{1/3})A^{1/3}$ [fm]、密度パラメータは

$$\rho_0^{(\kappa)} = \frac{3\kappa}{4\pi C_\rho^3(1 + \pi^2 a_\rho^2/C_\rho^2)} \quad (2.128)$$

最後の式 (2.128) では $\kappa = N$ or Z (核子数) であり、他の式では陽子と中性子の識別記号である。

こうして作った核子光学ポテンシャルではポテンシャルの期待値 J/A は経験的な値と矛盾ないが、 $\langle R^2 \rangle^{1/2}$ は小さめに出るようだ。

プログラム jlmopot では、陽子密度と中性子密度を独立に Woods-Saxon 型とその微分型の複数項の重ね合わせで表現出来る様にしている。

finite-range 補正

上記、rms 半径が小さくでるという欠点を補うために、以下の補正をする。即ち、体積分を保ちつつ、ガウス関数でポテンシャルをならす。

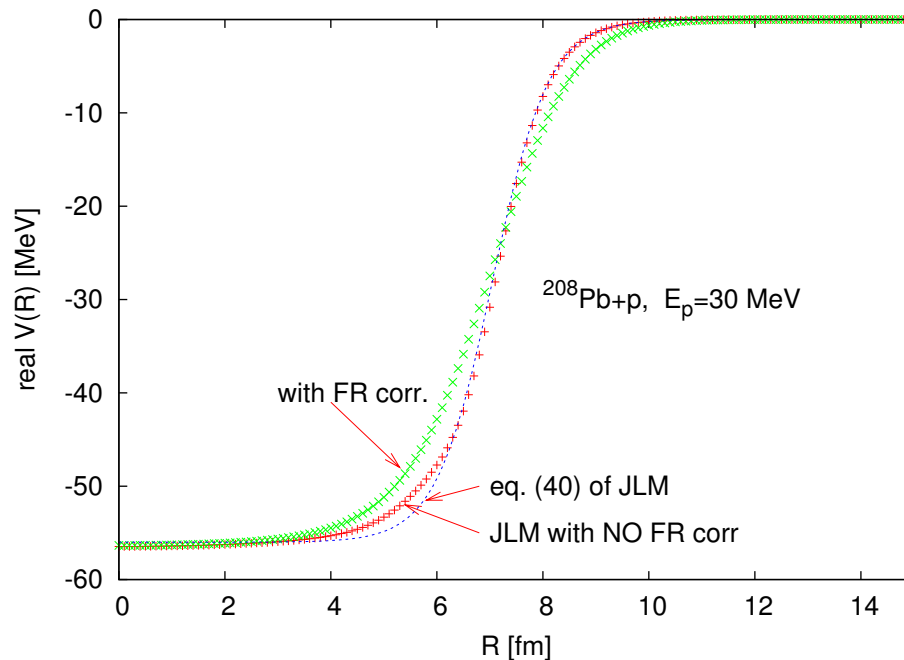
$$\tilde{V}(r) = (t\sqrt{\pi})^{-3} \int d\mathbf{r}' V(r') \exp \left\{ - \left(\frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{t} \right)^2 \right\}$$

$$= \frac{1}{rt\sqrt{\pi}} \int_0^\infty dr' r' V(r') \left[\exp \left\{ - \left(\frac{r - r'}{t} \right)^2 \right\} - \exp \left\{ - \left(\frac{r + r'}{t} \right)^2 \right\} \right] \quad (2.129)$$

特に $r = 0$ の時は、

$$\tilde{V}(r=0) = \frac{4}{t^3 \sqrt{\pi}} \int_0^\infty dr' r'^2 V(r') \exp \left\{ - \left(\frac{r'}{t} \right)^2 \right\} \quad (2.130)$$

30 MeV 陽子ポテンシャルの計算結果と、式 (40) の数値との比較を図示すると以下の通り



以下に、jlmpot への入力例を置く。多分説明は不要だろう。

```
1-1-1 0 0 0 0 0 0 0 12C+proton E=30 MeV
82 208 30.0, 7.41 0.1, 200 1.2 /Z A Ein Rcoul, DR NR Frang
```

次に、この入力に対する出力を置く。この出力の日本語文字部分は、後から加えた解説である。

```
12C+proton E=30 MeV
KTRL--1: 1 2:-1 3:-1 4: 0 5: 0 6: 0 7: 0 8: 0 9: 0 10: 0
target Z and A= 82 208 Ein= 30.0000 MeV
Rmax= 0.100 x 200 Rc= 7.410 fm Frang= 1.200 fm
```

```
Proton density parameters
WSPOT: ID V R A
1 1.000 6.5178 0.5400
```

```

      Neutron density parameters
WSPOT:  ID      V      R      A
         1      1.000  6.5178  0.5400

```

この次に、陽子に対する副プログラムから、 V_0 , V_1 , W_0 , W_1 の表が出力される。

```

#JLMPVW:
# r(fm)    V0          V1          W0          W1
  0.00 -5.3947E+01  1.1876E+01 -6.3412E+00  7.2746E+00
  0.10 -5.3946E+01  1.1876E+01 -6.3414E+00  7.2749E+00
  0.20 -5.3945E+01  1.1875E+01 -6.3421E+00  7.2756E+00
  ++++++
 19.80 -2.5415E-09  8.6026E-10 -1.6316E-09  1.1269E-09
 19.90 -2.1111E-09  7.1446E-10 -1.3546E-09  9.3582E-10
 20.00 -1.7535E-09  5.9338E-10 -1.1247E-09  7.7716E-10

```

次に、陽子の光学ポテンシャルが出力される。 V , W の列は Local Density Approximation でのポテンシャルであり、FRmade と記された列は、finite-range 補正 (式 (51b, 52)) を加えたものである。

```

#      Proton  Optical potential
# r(fm)    V          FRmade      W          FRmade
  0.000 -5.64592E+01 -5.63443E+01 -7.88006E+00 -7.93683E+00
  0.100 -5.64587E+01 -5.63438E+01 -7.88035E+00 -7.93712E+00
  0.200 -5.64571E+01 -5.63421E+01 -7.88113E+00 -7.93796E+00
  0.300 -5.64545E+01 -5.63393E+01 -7.88241E+00 -7.93936E+00
  ++++++
 19.900 -2.26220E-09 -6.97483E-09 -1.55258E-09 -4.81808E-09
 20.000 -1.87905E-09 -5.72213E-09 -1.28907E-09 -3.95114E-09
      Jv Jw= -4.16972E+02 -4.16972E+02 -1.35865E+02 -1.35865E+02 MeV/fm**3
rms Rv Rw=  5.83215E+00  6.01448E+00  6.66863E+00  6.82866E+00 fm

```

最後の2行は、ポテンシャルの核子当たりの体積分と、平均二乗半径である。夫々、finite-range 補正をしないのとしたのが出力されている。

以下に上で登場した展開係数の表を記録しておく。

	$a_{i,j}$ の表			
	j=1	j=2	j=3	j=4
i=1	-9.74×10^2	$+1.126 \times 10^1$	-4.250×10^{-2}	
i=2	$+7.097 \times 10^3$	-1.257×10^2	$+0.5853$	
i=3	-1.953×10^4	$+4.180 \times 10^2$	-2.054	
	$b_{i,j}$ の表			
i=1	$+3.601 \times 10^2$	-5.224	$+2.051 \times 10^{-2}$	
i=2	-2.691×10^3	$+5.130 \times 10^1$	-0.2470	
i=3	$+7.733 \times 10^3$	-1.717×10^2	$+0.8846$	
	$c_{i,j}$ の表			
i=1	$+4.557$	-5.291×10^{-3}	$+6.108 \times 10^{-6}$	
i=2	-2.051	-0.4906	$+1.812 \times 10^{-3}$	
i=3	-6.509×10^1	$+3.095$	-1.190×10^{-2}	
	$d_{i,j}$ の表			
i=1	-1.483×10^3	$+3.718 \times 10^1$	-0.3549	$+1.119 \times 10^{-3}$
i=2	$+2.988 \times 10^4$	-9.318×10^2	$+9.591$	-3.160×10^{-2}
i=3	-2.128×10^5	$+7.209 \times 10^3$	-7.752×10^1	$+0.2611$
i=4	$+5.125 \times 10^5$	-1.796×10^4	$+1.980 \times 10^2$	-0.6753
	$f_{i,j}$ の表			
i=1	$+5.461 \times 10^2$	-1.120×10^1	$+0.1065$	-3.541×10^{-4}
i=2	-8.471×10^3	$+2.300 \times 10^2$	-2.439	$+8.544 \times 10^{-3}$
i=3	$+5.172 \times 10^4$	-1.520×10^3	$+1.717 \times 10^1$	-6.211×10^{-2}
i=4	-1.140×10^5	$+3.543 \times 10^3$	-4.169×10^1	$+0.1537$

Woods-Saxpon potential の体積分

$\rho_0^{(\kappa)}$ の式 (39) は以下の様にして計算すればよい。

$$I = \int_0^\infty \frac{r^2}{1 + e^{(r-R)/a}} dr = \left(\int_0^R + \int_R^\infty \right) \frac{r^2}{1 + e^{(r-R)/a}} dr = I_1 + I_2 \quad (2.131)$$

I_1 では、指数関数は 1 より小さいからそのまま級数展開する。

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^R r^2 \sum_{n=0}^\infty (-)^n e^{n(r-R)/a} dr = \frac{R^3}{3} + \sum_{n=1}^\infty (-)^n e^{-nR/a} \int_0^R r^2 e^{nr/a} dr \\ &= \frac{R^3}{3} + \sum_{n=1}^\infty (-)^n \left\{ \frac{aR^2}{n} - \frac{2a^2R}{n^2} + \frac{2a^3}{n^3} \right\} - 2a^3 \sum_{n=1}^\infty (-)^n \frac{e^{-nR/a}}{n^3} \end{aligned}$$

I_2 では指数関数は 1 よりも大きいから、逆数を分子と分母に掛けてから級数に展開する。

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_R^\infty r^2 \sum_{n=0}^\infty (-)^n e^{(n+1)(R-r)/a} dr = \sum_{n=0}^\infty (-)^n e^{(n+1)R/a} \int_R^\infty r^2 e^{-(n+1)r/a} dr \\ &= \sum_{n=0}^\infty (-)^n \left\{ \frac{aR^2}{n+1} + \frac{2a^2R}{(n+1)^2} + \frac{2a^3}{(n+1)^3} \right\} \end{aligned}$$

I_2 の第 1、3 項は I_1 の対応する項と相殺するから、 $b \equiv e^{-R/a}$ とおくと、

$$\begin{aligned} I &= \frac{R^3}{3} + 4a^2 R \left(1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} - \cdots \right) + 2a^3 \left(b - \frac{b^2}{2^3} + \frac{b^3}{3^3} - \cdots \right) \\ &= \frac{R^3}{3} \left\{ 1 + \left(\frac{\pi a}{R} \right)^2 \right\} + 2a^3 \left(b - \frac{b^2}{2^3} + \frac{b^3}{3^3} - \cdots \right) \end{aligned} \quad (2.132)$$

ここで次式を利用した。

$$\left(1 - \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} - \cdots \right) = \zeta(2) - 2 \times \frac{1}{4} \zeta(2) = \frac{\pi^2}{12}$$

$\zeta(n)$ はリーマンの ζ 関数である。式 (2.132) の右辺第 2 項

$$b - \frac{b^2}{2^3} + \frac{b^3}{3^3} - \cdots = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-b)^n}{n^3} = \frac{1}{\Gamma(3)} \int_0^{\infty} \frac{(-b)t^2}{e^t + b} dt \quad (2.133)$$

は、岩波の数学公式集 II pp 55 に依ると、初等関数では表せないそうだ。右辺の積分を見ると、堂々巡りをしそうだ。

核子密度の式では、式 (2.132) の後半を無視した式が使用されている。

2.6 wv2

wv2.f プログラム

上の様な計算で、ポテンシャルの関数表が出力された時、このポテンシャルを Woods-Saxon 型やその微分型でパラメータ化出来ると、取扱が便利になるかもしれない。そこで、この関数値の表を Woods-Saxon 型やその微分型で展開するプログラムを書いた。

例によって、入(出)カファイルは ws2.in (wsv.out) であり、論理機番は 5 (6) である。入力は以下の通り。

1 NR, DR, ID, NPOW, MAXN, CONV 書式指定せず

各変数の意味は以下の通り。

NR, DR 関数表の点数と r の刻み幅。関数表は $r = 0$ から始まっているとしている。

ID =1 ならば、Woods-Saxon 型、=2 ならばその微分の -4 倍、=3 ならばこれらの重ね合わせ。

NPOW 関数にかかる荷重をきめるパラメータ。後述。

MAXN 自動探索の繰り返し回数。(パラメータ数) 回の繰り返しを 1 回と数える。

CONV 目的関数の変化を、この数と比較して収束判定をする。

2 V, R_V, A_V, W, R_W, A_W の初期値。

但し、ID=1 ならば最初の 3 個、ID=2 ならば、後の 3 個のパラメータのみを入力する。

現在では、ID=1, 2 に対しては ID を負で入力すると CHECK という副プログラムを呼び、自動的に初期値を設定しているので、入力値は無視される。

3 ポテンシャルの数値表。NR+1 個の数値が並び、これは $r = 0$ から順番に DR 刻みで並んでいると解釈される。

以下に入力例を示す。

```
200 0.1 1 0 10 1.0D-3 /NR DR ID Npow MaxN Conv
-50, 2.0, 0.5 /V R A initial values
-5.64592E+01
-5.64587E+01
+++ +++ ここに、残りの 199 個の数値が並ぶ。
```

次に、この入力に対する出力例を示す。

```
WV2: ID= 1 Npow= 0 NR and DR= 200 0.10 fm
MaxN= 10 Conv= 1.000E-03
Fx Conv= 4.86147E+01 1.00000E-03
Vvol Rvol Avol
-55.78171 7.0765 0.5601

ID= 1 -5.57817E+01 7.07648E+00 5.60126E-01
#r[fm] Input fitted diff.
0.000 -5.6459E+01 -5.5782E+01 6.7767E-01
0.100 -5.6459E+01 -5.5781E+01 6.7721E-01
0.200 -5.6457E+01 -5.5781E+01 6.7565E-01
0.300 -5.6455E+01 -5.5781E+01 6.7310E-01
+++ +++
```

解説

フィットしたい関数表の前から i 番目の座標値を r_i ($r_i < r_{i+1}$)、その点での関数値を V_i とする。展開する関数を $f(r)$ とし、この関数は N 個のパラメータ p_i , ($i = 1, 2, \dots, N$) を持つとする。当てはめるとは、パラメータ群の値を調節して、以下の目的 (罰金) 関数の極小値を探す事だとする。

$$S = \sum_i \{w(r_i) (f(r_i) - V_i)\}^2 \quad (2.134)$$

ここで、 $w(r)$ は常に正の値を持つ荷重関数であり、wv2 では $w(r) = r^{NPOW}$ とする。NPOW は外部から入力される 0 又は小さな自然数である。

opm.f の所で幾らか述べたが、ポテンシャルのどの部分を入射粒子が感じているかという計算をしてみると、標的原子核の内部領域のポテンシャルの値はあまり重要ではない。

重イオンでは吸収が大きいので、一般的にも言える事であろう。この事情を光学ポテンシャルに反映させるには、外側での振舞に重点をおいてあてはめを行う方が良いと考えた訳である。

wv2 では当てはめ関数 $f(r)$ は次式とする。

$$f(r) = \frac{V}{1 + e_V} + \frac{4W e_W}{(1 + e_W)^2} \quad (2.135)$$

但し、

$$e_V \equiv \exp\left(\frac{r - R_V}{A_V}\right), \quad e_W \equiv \exp\left(\frac{r - R_W}{A_W}\right) \quad (2.136)$$

と略記した。従って、最大6個のパラメータ V, R_V, A_V, W, R_W, A_W を利用する。目的関数 S のパラメータによる微分、 ∇S 、が計算出来るから、共役勾配法を利用して極値を探す。極値を与えるパラメータの値は、出発点に依存する。

共役勾配法関係の解説は、opm プログラムの方を参照。

共役勾配法が了解できれば、CNGRAD 副プログラムが正常終了した後の、行列 H の固有値と固有ベクトルを計算すればよい。Good luck !

2.7 wsf, ft プログラム

wsf プログラムは実ポテンシャルを与えた時、このポテンシャルの下での束縛状態や散乱状態を調べる。具体的には、以下の機能を持つ。

束縛状態 ポテンシャル及び束縛状態波動関数の節の数、軌道角運動量、固有スピンと軌道角運動量との和 n, l, j を与えて束縛状態波動関数を計算する。この場合、束縛エネルギーはプログラムが決める。逆に、ポテンシャルの深さを調節して、与えられた束縛エネルギーを再現する事も可能である。

束縛状態波動関数を Fourier 展開する。

散乱状態 軌道角運動量 l 、固有スピンと l との和 j を与えて散乱状態波動関数を計算する。

共鳴があるならば、共鳴エネルギーとその幅を返す。

位相のずれのエネルギー依存性を計算する。

上記の束縛エネルギーを再現するポテンシャルに対する散乱状態を取り扱う事もできる。

入・出力関係

入(出)カファイルは、論理機番 5 (6)、ファイル名は wsf.in(wsf.out) である。元来、入力形式は hctak の前半と同じとなるように設計したが、機能を追加したので、この制御の為に、先頭に 1 行を追加した。

先頭の 1 行の内容は (KTWSF(i), i=1,5) であり、その機能は以下の通りとする。書式は自由書式である。

KTWSF(1) =1 粒子 1、2、3 のスピンを 0 と再定義する。

その後、この機能は hctak の入力、KNTL(1)=-1 としても実現する事とした。

KTWSF(2) =n 束縛状態波動関数を KTWSF(2) ステップで出力する。

KTWSF(3) =1 束縛状態波動関数の Fourier 変換をする

KTWSF(4) =1 位相のずれの詳細を出力する。

KTWSF(5) =n 共鳴波数付近の散乱状態波動関数を出力する。

波数半幅を W とした時、(KTWSF(5)*W/10) を単位とし 共鳴波数を中心とし、この 0 又は 1 から 4 倍の波数に対する波動関数表を出力する。見出し部分に対応する波数が書かれる。

残りの部分は、hctak の入力の前半部分と同じだから、そちらを見て下さい。但し、NR12=0 というオプションは wsf では利用出来ないようだ。他にも、利用できない機能があるかもしれない。

hctak との共通入力部で本当に必要なのは、束縛状態や散乱状態の量子数とポテンシャルを規定する部分だけである。従って、KNTL, FKSMIN、NKSBIN 等の変数には意味は無い。

FKSMAX は、位相のずれを出力する場合の、波数の上限として使用している。

解説

ポテンシャルを与え、その束縛状態や散乱状態を解く事が基本的機能である。エネルギー固有状態に対応する波動関数を r 表示で数値計算する。ポテンシャルは、中心力とスピン・軌道力だけだとすると、 $j = l + s$ で与えられる j は良い量子数である。従って、波動関数は $u_{lj}(r) Y_{lm}(\hat{r})/r$ と書く。但し、ベクトル球面調和関数を次式で定義した。

$$Y_{lm}(\hat{r}) \equiv \sum_{m_l+m_s=m} \langle l m_l s m_s | j m \rangle Y_{lm_l}(\theta, \phi) \chi_{sm_s} \quad (2.137)$$

χ_{sm_s} はスピン波動関数だとしておく。動径方向波動関数 $u_{lj}(r)$ は次の方程式を満足する。

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{lj}(r) = \left\{ \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} (V - E) \right\} u_{lj}(r) \quad (2.138)$$

この解が満足する境界条件の一つは $r = 0$ のものであり、 $u_{lj}(0) = 0$ 。漸近領域での境界条件は束縛状態と散乱状態とで異なる。

$$u_{lj} \rightarrow \begin{cases} \kappa r h_l^{(1)}(i \kappa r) & \text{if } E < 0 \\ \cos \delta_{lj} F_l(k r) + \sin \delta_{lj} G_l(k r) & \text{if } E > 0 \end{cases} \quad (2.139)$$

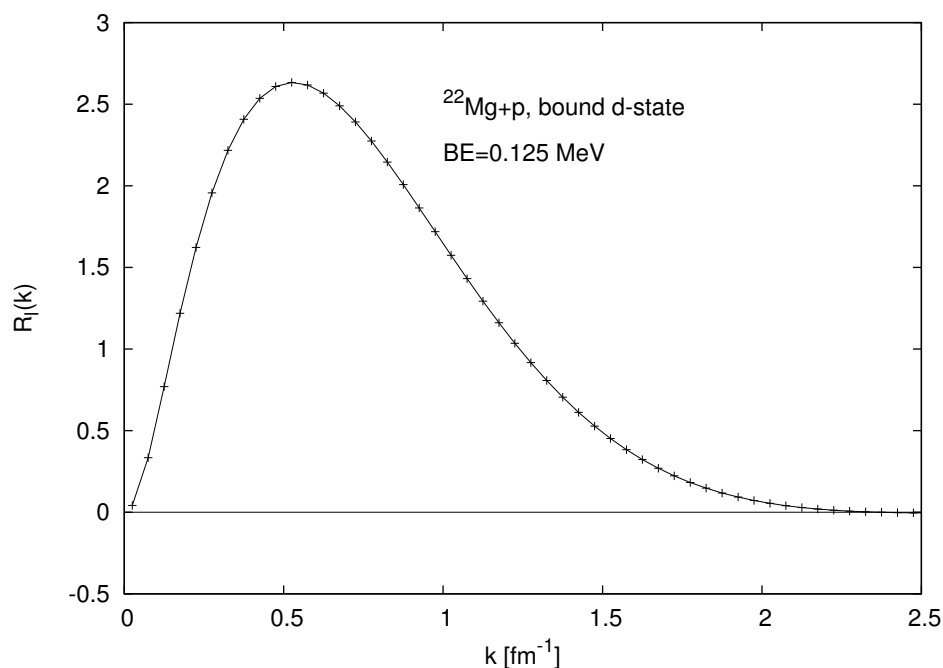
ここで、 $\kappa = \sqrt{2\mu|E|}/\hbar$, $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$ であり、後者は波数として知られている。 δ_{lj} は位相のずれである。

この微分方程式の解き方は hctak の「hctak の概念的理解に向けて」に書いたのものでそちらを読んで下さい。

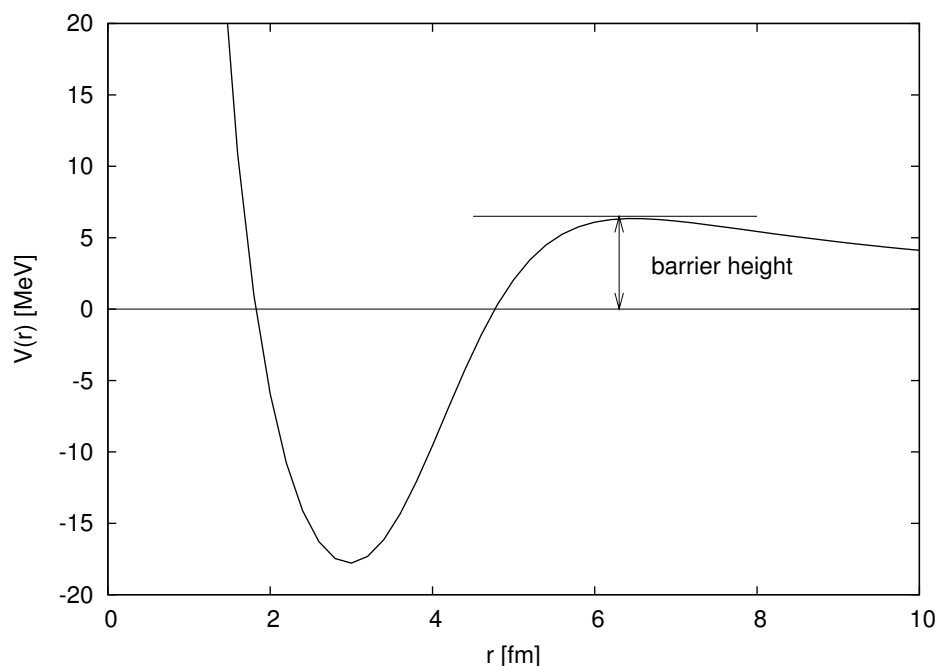
束縛状態波動関数の Fourier 展開は、ft というプログラムの解説を読んで下さい。出力するのは、以下の式で定義される $R_{lj}(k)$ である。

$$R_{lj}(k) \equiv \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty r dr u_{lj}(r) j_l(kr) \quad (2.140)$$

束縛状態の Fourier 展開は、対応するチャンネルの最大波数に対する入力値 FKSMAX 迄の波数を 50 等分し、この波数に対する変換表を出力する。この刻み幅を変更したければ、FTRANS 副プログラムの先頭付近の 50 と設定してある NKMAX を変更すればよい。以下に、束縛エネルギーが 0.125 MeV の $^{22}\text{Mg}+p$ d-状態波動関数の Fourier 展開を示す。

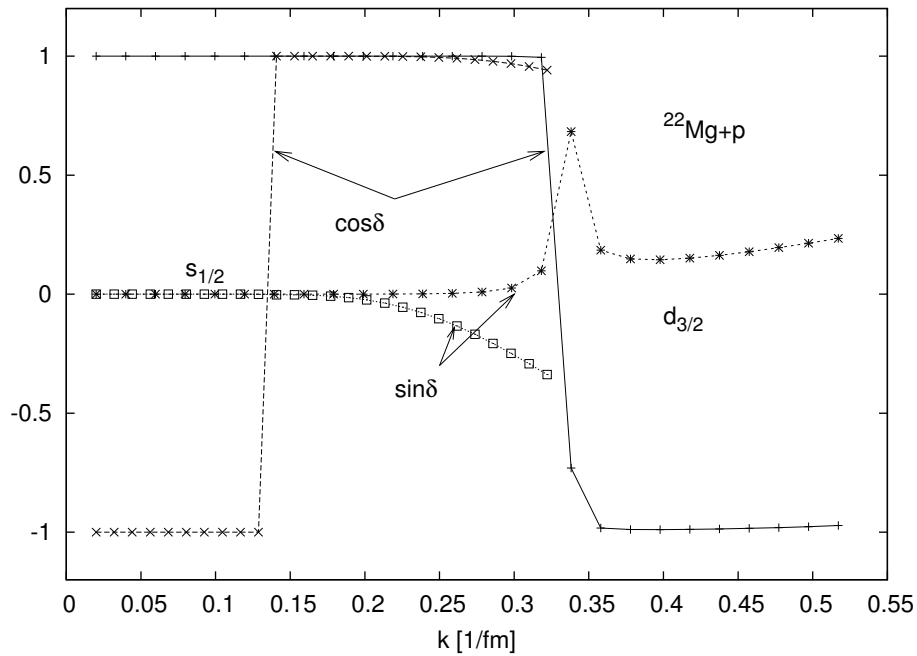


残るのは、散乱状態における共鳴である。共鳴に関するメモをここに書こう。hctak のマニュアルと重複するところがあるのでそちらも、読んで下さい。遠心力やクーロン力といった斥力と、引力である核力の競合により下の図の様なポテンシャルが作られているとしよう。



ポテンシャル障壁高さ (potential barrier height) よりも低いエネルギーに対して、共鳴の有無を調べる。

共鳴状態は、 $\cos \delta_{lj} = 0$ だとしておく。 $|\sin \delta_{lj}| = 1$ だとしても、原理的には同じであるがプログラム上では大きく事情が異なる。即ち、幅が非常に狭い場合にも、共鳴点を挟むあるエネルギー範囲で、 $\cos \delta_{lj}$ は符号を変えるので共鳴の存在を検出しやすいが、 $\sin \delta_{lj}$ の値を見ていては、見過ごす恐れがある。因みに、あるポテンシャルを与えて $^{22}\text{Mg} + \text{p}$ 系における $s_{1/2}$, $d_{3/2}$ 単一粒子状態に対する位相のずれを計算すると以下の図の様であった。 $s_{1/2}$ 共鳴状態は、小さな波数迄しか計算していないのは、障壁高さが低いからである。



$\cos \delta$ の方は共鳴点を境として、 ± 1 から ∓ 1 に変化している。一方 $\sin \delta$ の方は、 $d_{3/2}$ では 1 点だけで値が大きく変化しているが、 $s_{1/2}$ 状態に対しては、図に示した計算点の間隔では全然共鳴的な振舞いをしていない。 $\cos \delta$ の波数依存性を調べる理由がこれで判るだろう。

共鳴幅の定義は、 $\cos \delta_{lj} = \pm 1/\sqrt{2}$ を与えるエネルギー（波数）から計算する。出力されるのは半幅である。

共鳴エネルギーがポテンシャル障壁高さに近い時、低エネルギー側から半幅を決める事は可能だが、共鳴よりも高い運動エネルギー側からは半幅を決める事が出来ない場合がある。この場合には、片側半幅をもって半幅と定義している。この場合には `wsf` は警告を出力する。

共鳴エネルギー付近では、エネルギーと位相のずれの関係は、共鳴エネルギーの下から共鳴エネルギーに近ずくと、波が引き込まれる方向（第 1 象限では位相が増える方向）に変化するはずである。FORTRAN を使用していると、組み込み関数の偏角はいつも主値になるようにとられるから、 π , 2π 等の変化があるような場合には増えているはずの角度が急に 2π 減っている場合があるだろう。従って、この共鳴に対する要求 $d\delta/dE > 0$ はプログラムには組み込まれていない。FORTRAN の組み込み関数である `ATAN2` の主値は $[-\pi, +\pi]$ であるが、位相のずれは 2π を越えるようにした方が良い場合がある。又、 $|\sin \delta|$ が非常に小さい時には、計算誤差の為に間違っ符号をとる場合がある。これらに対する対策をとる必要がある。`wsf` では、位相のずれの絶対値を波数が `FKSMAX` の時に `ATAN2` の主値となるようにした。引力的ポテンシャルの場合には、大きな波数に対して

位相のずれは第 1 象限にあるはずだ。もしも FKSMAX が小さすぎると、変な位相のずれを出力する場合がある。

hctak ではこれらの対策は難しいので、三重微分断面積をする場合には、wsf を走らせて位相のずれの波数依存性を確認しておくべきであろう。

変化の激しい部分は、波数幅を細かくして出力すべき表の修正を行う。

入力例を次に示す。

```

0 1 1 1 0          /KTWSF (added on 08/09/29)
  2   4   6   8  10   | title begins
1 3 0 0 0 0 0 0 2 0   (p+22Mg)+12C, E=100.37 MeV
  system 1-2
2  5   5   1   1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, IDVS: d5/2
0  0   0.1258   /NODS, ISBE, BES: depth adjust ! modified BE search
1  0.1   1.9     /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
2  3   3   0   1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, IDVS: d3/2
1  0.1   1.9     /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
0  1   1   0   1 /LSTAB, ISTAB, JSTAB, NBND, IDVS: 1s1/2
1  0.1   1.9     /NKSBIN FKSMIN FKSMAX
1 300 0.05   0 2 /NVPS, NR12, DR12, Lammin, Lammax
1  3   -7.5     3.50255 0.65          /fixed LS pot.
-2 1 -46.8655 3.50255 0.65 3.50255/VPS(1-6)
  system 1-3 potential

```

以下の行は無意味

出力とその見方

WSF ver. 2007/10/01 by Y. Aoki

```

  2   4   6   8  10          title
1 9 0 0 0 0 0 0 2 0   (p+22Mg)+12C, E=100.37 MeV

```

sys	Ename	Z	A	J	pi	M(u)
1	H	1	1	1/2	+	1.0073
2	MG	12	22	0	+	21.9930
3	C	6	12	0	+	11.9967
Elab((1+2)-3)=						100.3700 MeV

```

*****system 1-2 in jj coupling*****
CH ls 2*s1 2*j1 2*s2 2*I12 Nbnd Nkbin k(min) k(max) Pid
 1 2 1 5 0 5 1 1 0.1000 1.9000 1
 2 2 1 3 0 3 0 1 0.1000 1.9000 1
 3 0 1 1 0 1 0 1 0.1000 1.9000 1

```

bound states

```

Ch Node BE isBE?
1 0 0.1258 0

```

System 1-2: potential parameters

```

Pid I1 I2 V(MeV) R(fm) a(fm) ROC(fm)
 1 1 3 -7.50000 3.50255 0.65000 0.00000
 1 1 1 -46.86550 3.50255 0.65000 3.50255
I1=1(2) fixed (floating) part I2=1(2) volume (surface) type

```

N12= 10 NR12= 300 DR12= 0.0500 fm. Lambda= 0 to 2

System 1-2 ch. ID= 1

potential parameters

```

I1 I2 V(MeV) R(fm) a(fm)
 1 3 -7.50000 3.50255 0.65000
WSPOT: for N= 1 VP= 1.0000 3.0000 -7.5000 3.5025 0.6500
NR= 518 be recommended !
 2 1 -46.86550 3.50255 0.65000
WSPOT: for N= 2 VP= -2.0000 1.0000 -46.8655 3.5025 0.6500
NR= 518 be recommended !
R Coul= 3.50255

```

WSBND: ISBE= 0

```

Loop LS NS NN Vfac BE(MeV) FI
 0 2 0 0 1.00000 0.12580 -1.77514E-06

```

<r>= 3.6845E+00 sqrt(<r*r>)= 3.9118E+00 fm

ここから、上の出力は hctak の出力と同じだから、そちらを参照されたい。
次からは、上で指定された各種の量子数で指定される状態に対して共鳴状態の

存在を調べる。

先ずは $d5/2$ 状態に対して調べる

WSRES: for Ls= 2 Btop= 5.3792 MeV k range=[0.030, 0.498]

上の行で、Btop は障壁高さであり、共鳴の存在を調べた波数範囲が 1/fm 単位でその右に出力されている。

No resonance found

共鳴は検出出来なかった

KTWSF(3)=1 ならば、ここに Fourier 展開し、波数依存性が出力される。

KTWSF(4)=1 ならば、ここに位相のずれの波数依存性が出力される。

次は $d3/2$ 状態。

System 1-2 ch. ID= 2

potential parameters

I1	I2	V(MeV)	R(fm)	a(fm)
----	----	--------	-------	-------

1	3	-7.50000	3.50255	0.65000
---	---	----------	---------	---------

WSPOT: for N= 1 VP= 1.0000 3.0000 -7.5000 3.5025 0.6500

NR= 518 be recommended !

1	1	-46.86550	3.50255	0.65000
---	---	-----------	---------	---------

WSPOT: for N= 2 VP= -1.0000 1.0000 -46.8655 3.5025 0.6500

NR= 518 be recommended !

R Coul= 3.50255

上の出力は、用いたポテンシャルパラメータ

WSRES: for Ls= 2 Btop= 5.8161 MeV k range=[0.030, 0.518]

調べた波数範囲が上の行に書かれる

Eres= 2.44599MeV k= 3.3564289E-01 /fm

k_c= 3.3564289E-01 +/- 2.604E-03 [/fm] : {cos(delta)=1/sqrt(2)}

del(k_c): 2.763E-03 -2.444E-03 [/fm]

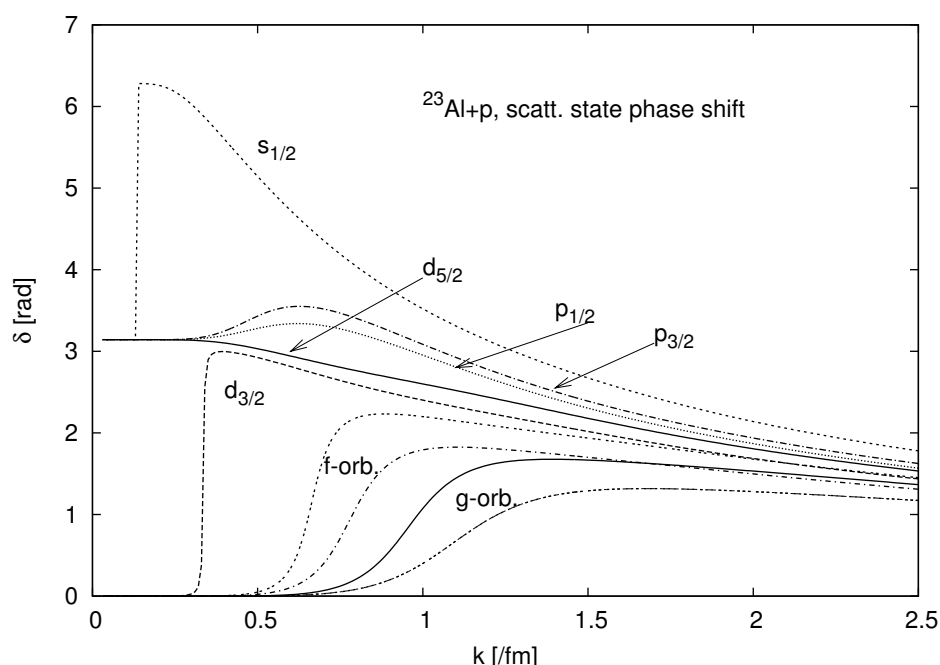
上の3行は、検出した共鳴状態の情報。共鳴エネルギーと波数。次の行は波数幅。最後の行は、実際に共鳴点の上下に於いて、 $|\cos(\delta)|=1/\sqrt{2}$ を満足する半幅である。

以下に入力された全ての量子状態別の共鳴探索結果が続くが、省略する。

WSRES 副プログラムのパラメータを変更すると、探索途中の位相のずれや、波動関数等も出力する事ができる。共鳴探索には、二分法を利用している。

興味がある人は、この副プログラムを読んでみるとよいだろう。説明は省略する

最後に入力した陽子単一粒子状態に対する位相のずれのエネルギー依存性をグラフにまとめておこう。



$d_{3/2}$, $s_{1/2}$ 状態にのみ共鳴があり、共鳴点で大きく位相のずれが増えているのが判る。

wsf2.f プログラムは、中心力ポテンシャルに束縛されたエネルギー的に縮退した二つの状態をつくる。自由度として、二つの Woods-Saxon 型ポテンシャルの重ね合わせで目的の中心力ポテンシャル、深さを調節して、実現する。

入・出力ファイルは例に依って wsf2.in・wsf2.out であり、論理機番は 5・6 である。このプログラムは未だ習作であるので、基本機能しか実現していない。必要に応じて、機能を付け加える必要があるだろう。

入力は、以下の 4 行よりなる。FORTRAN の意味での自由書式である。

第 1 行 EM(1), IZ(1), EM(2), IZ(2)

EM は原子質量単位での質量、IZ は原子番号。添字の 1 と 2 は粒子の識別番号。重心系を使用するので、1 と 2 の区別は特に無い。

第2行 NOD(1), LMOM(1), NOD(2), LMOM(2), BE

NOD は動径部分波動関数の節の数であり、0 から数える。LMOM は \hbar 単位の軌道角運動量。二つの縮退した状態を考えるから、二つのデータが必要である。BE は MeV 単位で表した束縛エネルギー。縮退させるから、一つだけ入力する。

第3行 V1,R1,V2,R2,AR,RC

V1, V2 は MeV 単位で表したポテンシャルの深さ。負ならば束縛状態を作る可能性がある。

R1, R2 は Woods-Saxon 型ポテンシャルの半径 [fm]。

AR は Woods-Saxon 型ポテンシャルのぼやけパラメータ [fm]。AR は二つのポテンシャルで共通のものを使用している。

RC は一様帯電球の半径。[fm]

第4行 NR, DR

NR は、Schrödinger eq. を解く時の点数。

DR はその刻み幅。[fm]

次に掲げるのは、入力例

```
1.007825032070E+0 1, 2.199957384300E+1, 12 /EM1, IZ1, EM2, IZ2
0 2 1 0 0.125 /N1, L1 N2 L2 BE
-55.0 3.5, 4.0 2.3 0.65 3.5 /V1 R1 V2 R2 AR RC
300 0.1 /NR DR
```

次に出力例を示す。

```
Z and mass      =   1  1.00783      12 21.99957
nod1 l_1 nod2 l_2=  0  2  1  0  BE=  0.1250
V1 R1 V2 R2= -55.0000   3.5000   4.0000   2.3000  Ar=  0.6500
NR and DR=  300  0.1000  RC=  3.5000
```

この4行は、入力データ。次の行は波数とクーロンパラメータ

```
k and Eta=   7.61928E-02   5.26632E+00
  L N1 N2   VA           VB           DL
  1  0  1  1.0000E+00  1.0000E+00  8.2894E-02  9.1744E-02
  2  0  1  9.5054E-01  9.9986E-01  2.1126E-02  2.3416E-02
  3  0  1  9.2398E-01  9.9985E-01  3.2813E-03  3.8870E-03
  4  0  1  9.1895E-01  9.9986E-01  3.3832E-04  1.0807E-03
  5  0  1  9.1846E-01  9.9987E-01  5.6670E-05  8.1381E-04
```

```
6 0 1 9.1842E-01 9.9987E-01 3.3312E-05 7.9165E-04
```

この上の6行は、L が繰り返し回数であり、15回で収束しなければ計算が破綻したとする。次の2列 N1 N2 は二つの波動関数の計算された節の数。VA, VB は二つの Woods-Saxon 型ポテンシャルの深さに掛けた修正量。DL は接続点での対数微分の差に比例する量。ポテンシャルの修正量が小さくなれば (10^{-5}) 収束したと判断している。

次からは、束縛状態波動関数の数表。

CAL2B: bound state wave functions

```
# r(fm)      u1(r)      u2(r)
0.10  8.1469888E-05  5.7033273E-02
0.20  6.4924417E-04  1.1303919E-01
0.30  2.1771095E-03  1.6700972E-01
*****
29.90  2.7065252E-04 -1.2237323E-03
30.00  2.6391651E-04 -1.1932760E-03
<r> sqrt(<r**2>)= 3.6487E+00 3.8790E+00 4.2446E+00 4.8253E+00
```

最後の4個の数値は、 r と $\sqrt{r^2}$ の期待値 [fm] のはず。

調和振動子模型では、 $2n+l$ が一定状態はエネルギー的に縮退している。このプログラムではこのような場合を想定している。従って、二つの縮退した状態は節の数が一つだけ異なり、軌道角運動量が2単位異なる。次の手順により、ポテンシャルパラメータを決定するのが妥当だろう。

0) 標準的なポテンシャルを想定し、このポテンシャルでの二つの状態の束縛エネルギーを計算する。又は束縛エネルギーを与えて、ポテンシャルの深さを決定する。

二つの波動関数のグラフを描き、節と腹の位置を確認しておく。

1) 例えば、束縛エネルギーが小さい方の波動関数を標準として選ぶ。この時には、束縛エネルギーの大きな方の状態の束縛エネルギーを選択的に減らす様に、補助的ポテンシャルを導入すればよい。即ち、小さな束縛エネルギー状態波動関数の節であり、且つ他方の波動関数の腹に近い部分でポテンシャルを浅くする様にパラメータを選ぶ。

2) 上で選んだパラメータを入力して、wsf2 に詳細は詰めさせる。

このプログラムは未だ真剣にテストしていないので、変な入力に対して誤動作をする可能性が大きい。wsf.f を用いて遊んでみるのも良いと思う。

このプログラムの動作を見ていて、次の遊びを思い付いた。原子核の殻模型を考える。例えば Cohen-Kurath の殻模型パラメータは、 $0p_{1/2}$, $0p_{3/2}$ 状態の単一粒子エネルギー ϵ_j

を与えている。この二つの状態の ϵ_j を一つのポテンシャルで再現する可能性はある。即ち、このポテンシャルの下での単一粒子波動関数が計算出来る。次に、2 粒子間の相互作用の形を仮定し、ここで得られた波動関数を用いて行列要素を計算する。この行列要素は、Cohen-Kurath が与えた残留相互作用の行列要素と比較出来る。出来るだけ両行列要素が等しくなる様に、先に仮定したポテンシャルの形 (使用したパラメータ) を修正する。こうすると、経験的な核力の振舞いが推定出来る。誰か、やってみると面白そうなテーマだ。既にやっている人がいるような気がするが。。。

解説

wsf.f における束縛状態波動関数計算の簡易版になっている。但し、修正量が二つあると言う意味で、機能拡張してある。

二つの中心力ポテンシャルを $f(r)$, $g(r)$ とし、正しいポテンシャルは次式とする。

$$\frac{d^2 u_i(r)}{dr^2} = \left\{ \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}(-E + \alpha f(r) + \beta g(r) + V(r)) \right\} u_i(r) \quad (2.141)$$

ここで、添字 i は二つの波動関数を区別する。実際に数値計算するのは、 $\alpha = \beta = 1$ という方程式であり、その解を $v_i(r)$ と書く。この解は、内部と外部から解き、接続点 r_m で内外の解の振幅は一致させている。但し、正解ではないから、接続点での微分は不連続である。 α , β を推定する為に、次の式を利用する。

$$\begin{pmatrix} \alpha - 1 \\ \beta - 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle f \rangle_1 & \langle g \rangle_1 \\ \langle f \rangle_2 & \langle g \rangle_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_1 \\ L_2 \end{pmatrix} \quad (2.142)$$

ここで、次の量を定義した。

$$\langle f \rangle_i \equiv \sum v_i^2(r) f(r) dr \quad (2.143)$$

$$L_i \equiv \frac{\hbar^2 v_i(r_m)}{2\mu \hbar^2} \{v_i^E(r_m + h) - v_i^I(r_m + h)\} \quad (2.144)$$

$\langle g \rangle_i$ も同様に定義している。

プログラムの構造

主プログラムは (1) 入力データを読み、(2) 基本的な物理定数を決める為に DEFFND 副プログラムを呼び、(3) ポテンシャルを定義するために副プログラム PDEF を呼び、最後に (4) 束縛状態を計算する副プログラム CAL2B を呼び。

PDEF 副プログラム

5 組のポテンシャルを $V(*,1) - V(*,5)$ に計算して返す。

$V(r,1)$, $V(r,2)$ が深さを調節して、縮退状態を実現する二つのポテンシャル表である。

$V(r,3)$, $V(r,4)$ には、二つの状態の遠心力ポテンシャルを書き込む。

$V(r,5)$ には、クーロンポテンシャルを書き込む。

ここで、第 1 添字 r は DR おきに 相対距離を与える。

CAL2B 副プログラム

いわゆる Fox-Goodwin 法で動径方向の方程式を 2 回解く。解は配列 $U(r,1)$, $U(r,2)$ に書き込まれる。節の数が過不足していれば 10% ずつポテンシャルの深さを調節する。節の数が正しければ、上に述べた連立 1 次方程式を解いて深さを修正する。

使用している配列は、上に述べた 2 行 2 列の行列と (接続点での対数微分の DR 倍の差) を A, DL としている。

他の配列の意味は以下のとおり。

ND: 計算された波動関数の節の数

MT: 接続点の位置、遠心力が異なるので二つの波動関数では等しくない

FM: 外部解の接続点での値の平方の逆数

DM: 内部解の接続点での値の平方の逆数

ft.f は、波動関数の Fourier 変換による 波数分布を調べる目的で書かれた。

入出力ファイル名は ft.in 及び ft.out であり、その論理機番は 5 と 6。入力は 3 行とその後に展開の対象となるデータ表が来る。FORTRAN の意味での自由書式とした。入力仕様は以下の通り。

第 1 行目 (KTRL(i), i=1,5)

KTRL(1) =NY 独立な Fourier 展開データ数. NY の最大値は 5 としておく。

KTRL(2) =n 読み込んだデータを n 点おきに出力する。

KTRL(3) > 0 入力データは内挿して使用する

KTRL(4) > 0 入力する関数表が $u_l(r)/r$ である。=0 ならば $u_l(r)$ を入力する。

KTRL(4) > 0 ならば入力データには、 r を掛けてから Fourier 展開する。この機能は、実際に数値積分の対象とするのは、 R_{lm} でなく u_l だから必要となる。

KTRL(5) 使用していない。

第 2 行目 NR, NK, DRX, DK

NR Fourier 展開の対象となる独立データ点数

入力に際しては、一行に KTRL(1)(=NY)+1 列の数値を置く。第 1 列は独立変数の値 r 、残りの列は NY 個の従属変数の点 r での値。

NK Fourier 展開後のデータ点数。この後に入力される DK と組み合わせて、 k の値が DK おきに NK 点にわたり展開結果が出力される。

DRX 実際に数値積分する刻み幅。この値は、 $KTRL(3) > 0$ ならば、後で入力する RTAB の刻み幅よりも小さくても良い。

DK Fourier 展開の波数の刻み幅

第3行目 LTAB

KTRL(1) 個の 0 又は自然数であり、各入力データを Fourier 展開する次数の表

第4行目以降 RTAB, FF

ここには、展開されるデータの数表が書かれる。RTAB は r の表であり、0 から始めるべきだが等間隔である必要はない。但し、小さい順に並んでいなければならない。FF は展開されるべき従属変数の数表である。以下の形式で読み込まれる。

```
READ(5,*) (RTAB(M), (FF(N,M), N=1, NY)), M=0, NR)
```

即ち、一行には特定の r に対する独立変数の値と、対応する従属変数の値の組を書いておく。この行数が、NR+1 行に及ぶ。

入力例

```
2 0 0 0 0 /ktrl
250 200 0.1 0.05 /NR NK DR DK
2 0 /Ltab
0.0 0.0 0.0
0.1000 8.5017216E-05 5.7220046E-02
0.2000 6.7737682E-04 1.1337449E-01
0.3000 2.2706878E-03 1.6741933E-01
*****
24.8000 7.8551916E-04 -3.2967933E-03
24.9000 7.6576393E-04 -3.2162342E-03
25.0000 7.4637166E-04 -3.1368883E-03
```

出力例

上記入力に対する出力である。

```
N= 1 Sum= 9.9999963E-01
N= 2 Sum= 9.9999346E-01
```

この2行は、入力された従属変数のノルムである。入力表が $u(r)$ ならば、このノルムは 1 になるから、入力値の確認として使用すればよい。その後で、以下の表が出力される。

第1列は k であり、第2、3列は入力された表の第2、3列を Fourier 展開したものである。

```
# Fourier transform
N= 1 Sum= 9.9999963E-01
N= 2 Sum= 9.9999346E-01
# Fourier transform
0.0500 8.62788E-02 -1.26320E+01
0.1000 3.15206E-01 -1.11419E+01
0.1500 6.14565E-01 -9.15086E+00
*****
9.9500 -6.21554E-06 -2.62671E-05
10.0000 -5.27781E-07 -2.59213E-06
```

ここで、出力されるのは、後で定義されている $\tilde{R}_l(k)$ である。数値計算が正しく行われたかどうかを調べる為に、この出力をもう一度 Fourier 展開してみればよい。但し、この出力は k で割ってあるから、次に入力する時には KTRL(4)=1 としておく事。更に、この場合のテスト出力も r で割られたもの出るから、一番最初の入力値 $u(r)$ と比較するためには、 r を掛けなければならない。

束縛状態波動関数の Fourier 展開
束縛状態波動関数を次式とし、これを Fourier 展開する。

$$R_{lm}(\mathbf{r}) = \frac{u_l(r)}{r} Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.145)$$

Fourier 展開するとは、以下の積分変換を施す事だとする。

$$\tilde{R}_{lm}(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3/2} \int d\mathbf{r} R_{lm}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{k}} \quad (2.146)$$

以下の Rayleigh 展開と球面調和関数の直交性もちいる。

$$e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{k}} = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.147)$$

その結果、

$$\tilde{R}_{lm}(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} i^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}}) \frac{1}{k} \int_0^\infty dr u_l(r) \{kr j_l(kr)\} \quad (2.148)$$

この式の内 $i^l Y_{lm}(\hat{\mathbf{k}})$ を除いた部分を出力する。

$$\tilde{R}_l(k) \equiv \tilde{u}_l(k)/k \equiv \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty dr u_l(r) kr j_l(kr)/k \quad (2.149)$$

実際に計算すべき事

与件 軌道角運動量 l 、動径波動関数の表 $u_l(r)$, r の刻み幅と点数、計算すべき波数の最小値、最大値とその刻み幅。

1) $x j_l(x)$ の計算法

原点から外に向かって以下の微分方程式を解く。

$$j_l''(x) = \left\{ \frac{l(l+1)}{x^2} - 1 \right\} j_l(x) \quad (2.150)$$

原点付近で級数展開する事により、積分を開始する。

2) 被積分関数の積分点での値を内挿する。3 次のスプラインを使用する。

3) 与えられた k に対して、 r を積分変数として数値積分する。

スプラインの簡単な解説

物理屋が好む、常識的な関数 $f(x)$ が区間 $[x_0, x_n]$ で定義されている。但し、 $f(x)$ は陽的には知られていなく、 (x_i, f_i) , $(i = 0, 1, \dots, x_n)$ という $(n+1)$ 個の点でのみ与えられているとする。この $(n+1)$ 個の点を節点という。但し、 x_i は値が小さい順に並んでいるとする。数値積分をするためには、この区間内の任意の点での関数値を利用したい。3 次のスプラインだとして説明する。そこで、一つの区間 $[x_{i-1}, x_i]$ を取り上げて、この区間内では区分的な 3 次式を考える。3 次式は 4 個のパラメータを決めれば確定する。そのパラメータの二つはこの区間の両端での値である。これでは、パラメータの値を確定する自由度がありすぎる。次の要求をする。一つの節点を取り上げる。その左右の区間では独立に 3 次式が作られている。この取り上げた節点での 1 階と 2 階の微係数の値は、右から計算しても左から計算しても同一だとする。これで、両端を除いた全ての点での自由度が確定する。あと二つの条件を付けると、全てのパラメータが確定する。ここでは、両端付近での 4 点での値を用いて両端点での 2 次微分を直接推定する。これにより、全ての自由度が確定する。

プログラムの構成

MAIN

GETFF フーリエ展開したい関数の節点を定義する。呼び出し列は以下の通り。この部分は利用者の責任で適当に書き換えればよい。

CALL GETFF(NX, NY, XTAB, YTAB)

引数の意味：

NX 関数表の大きさ。節点の数 + 1

NY 従属変数の数。

XTAB 節点の独立変数の値を定義した $NX + 1$ 個の大きさの 1 次元実倍精度配列
配列は 0 から始める事。

YTAB DIMENSION YTAB(0:NX, NY) として定義された二次元実倍精度配列。

NX, NY を与えて、節点を定義して返す。節点の独立変数は必ず値が小さい順に並んでいる必要があるが、等間隔である必要は無い。

S3SPL1 3 次スプラインを用いて、関数値を内挿するための準備作業をする。呼び出し列は以下の通り。

CALL S3SPL1(NX, X, Y, DY2)

引数の意味：

NX 関数表の大きさ。節点の数 + 1

X,Y 節点の値を定義した $NX+1$ 個の大きさの 1 次元実倍精度配列

DY2 $NX+1$ 個の倍精度実配列。内挿すべき関数を $y(x)$ と書いたとすると、各節点での $y''(x)/6$ が返される 1 次元実倍精度配列

S3SPL2 3 次のスプラインを用いて、内挿して関数値を返す。事前に S3SPL1 を呼びだしておかねばならない。呼び出し列は以下の通り。

CALL S3SPL2(NX, X, Y, DY2, XX, YY)

引数の意味：

NX 関数表の大きさ。節点の数 + 1

X,Y 節点の値を定義した $NX+1$ 個の大きさの 1 次元実倍精度配列

DY2 $NX+1$ 個の倍精度実配列。内挿すべき関数を $y(x)$ と書いたとすると、各節点での $y''(x)/6$ が書かれた 1 次元実倍精度配列

XX, YY 関数値を推定すべき点の独立座標が XX であり、内挿値 YY が返される。

XJ $x \times j_l(x)$ の表を返す。 $x \times j_l(x)$ の表を返す。呼び出し列は以下の通り。

CALL XJ(L,DX,NXM,XJTAB)

引数の意味：

L 球ベッセル関数の次数。0 又は自然数

DX, NXM 独立変数 x の刻み幅と点数

XJTAB NXM 個の倍精度実配列。XJTAB(n) は $x \times j_l(x)$, $x = DX \times n$ が返される。

内部では、小さな x に対し級数展開で初期値を計算し、Cowell 3 点法で微分方程式を解き、関数表をつくっている。

2.8 elx プログラム

hctak が出力する S 行列要素を利用して、弾性散乱微分断面積を出力する。FORTRAN90 を使用している。

入力

入・出力ファイル名は elx.in, elx.out であり、論理機番は 5 と 6 である。但し、hctak からの S 行列ファイルは、論理機番 7 で使用される。

入力は、1 行が 80 文字のカード形式であり、第 1 枚目は KNTL(n), (n=1,2,3,4,5) と 50 文字の忘備メモとする。書式は FORMAT(5I2,A50) である。

現在のところ、KNTL 変数に意味は持たせていない。

第 2 枚目は、ANG0, ANG1, DANG の 3 変数であり、重心系での散乱角を指定し、ANG0 から ANG1 迄、DANG ごとに計算する。角度の単位は、度である。第 4 の変数 JT2LIM は hctak で使用された全系の角運動量の最大値の 2 倍 JT2MAX を、この値に制限して弾性散乱を計算する時に使用する。角運動量の上限が充分かどうか調べるのに使用する。

第 3 枚目は、S 行列の書かれた hctak からの出力ファイル名を書く。通常は、hctksmat である。入力は、これでおしまい。

入力例

```
0 0 0 0 0 test test
0.1 20.0 0.1 /ang0, ang1, dang, JT2LIM
hctksmat
----- elx への入力はおしまい -----
```

解説

弾性散乱チャネルの S 行列要素又は C 係数 ($C_{l_f l_i}^j = (S_{l_f l_i}^j - \delta_{l_f, l_i})/2i$) を与えて、弾性散乱微分断面積を計算したい。この $C_{l_f l_i}^j$ は、opm プログラムの解説で C_l とかいたものと物理的には等価であるが、入射粒子がスピン・軌道力を持っていたり、相互作用の多重極

展開に起因する軌道角運動量移行を伴う為に、軌道角運動量が良い量子数になっていない場合への拡張になっている。従って、入射 (放出) 波の軌道角運動量 l_i (l_f) という添字を持つ。この場合でも、空間の回転対称性を仮定するから、全系の角運動量 (j) は運動の恒量である。

入射・放出粒子の波数を k_i, k_f とし、単位ベクトルにはハット記号をつける。入射ビームの方向を z 軸、 $\mathbf{k}_i \times \mathbf{k}_f$ の方向を y 軸とすると、散乱振幅は次式で与えられるとする。

$$f_{m_f m_i} = f^C(\theta) \delta_{m_f m_i} + f_{m_f m_i}^N(\theta) \quad (2.151)$$

$$\begin{aligned} f_{m_f m_i}^N(\theta) = \sum_{l_i l_f j} \frac{\sqrt{4\pi}}{k} \sqrt{2l_i + 1} e^{i\sigma_{l_i}} \langle l_i 0 s m_i | j m_i \rangle \\ \times C_{l_f l_i}^j e^{i\sigma_{l_f}} \langle l_f m s m_f | j m_i \rangle Y_{l_f m}(\hat{\mathbf{k}}_f) \end{aligned} \quad (2.152)$$

ここで、標的スピンは 0、 s は入射粒子のスピンであり、 m_i, m_f は始・終状態の z 軸成分である。

$$f^C(\theta) = -\frac{\eta}{2k \sin^2 \theta/2} e^{-i(\eta \log \sin^2 \theta/2 + 2\sigma_0)} \quad (2.153)$$

はクーロン散乱の散乱振幅、 η, k はクーロンパラメータと波数である。

σ_l は軌道角運動量 l に対するクーロン散乱の位相のずれである。

核力に起因する散乱振幅 $f_{m_f m_i}^N$ は CG 係数計算の都合により、以下の様に変形しておく。

$$\begin{aligned} f_{m_f m_i}^N(\theta) = \frac{(-)^{(m+|m|)/2}}{k} \sum_{l_f} (-)^{s-m_i} \hat{l}_f \sqrt{\frac{(l_f - |m|)!}{(l_f + |m|)!}} P_{l_f m}(\cos \theta) e^{i\sigma_{l_f}} \\ \times \sum_j \hat{j} (s m_f l_f m | j m_i) \sum_{l_i} (s m_i j - m_i | l_i 0) e^{i\sigma_{l_i}} C_{l_f l_i}^j \end{aligned} \quad (2.154)$$

ここで、 $\hat{l} \equiv \sqrt{2l+1}$ という略号を使用した。更に、パリティが保存するから $(-)^{l_f} = (-)^{l_i}$ である。散乱振幅は、 $f_{m_f m_i}^N = (-)^{m_f - m_i} f_{-m_f - m_i}^N$ という対称性を持つから、 $m = m_i - m_f \leq 0$ の範囲でのみ計算を実行。因みに、この式の右辺の後半部分は散乱角に依存しないから、角分布を計算する前に一度だけ計算しておく。

参考文献

N. Glendenning 著、Direct Nuclear Reactions, Academic Press,(1983) pp139 (8.60)

プログラムの内部の解説

共通領域の変数とその意味

ETA クーロンパラメータ。

FK 波数 [1/fm]

IS 入射粒子のスピン の 2 倍

JT2MIN 全系の角運動量の 2 倍の最小値。但し標的核のスピンは 0 とする。

JT2MAX 同上、最大値

JMX 独立な全系の角運動量の数

KNTL(5) 当面使用していない

LMAX 最大軌道角運動量

LS 入射粒子の内部構造軌道角運動量

NANG 散乱角度の数 (ANG1-ANG0)/DANG+1

NCC CDCC の独立チャンネル数。

NS IS+1、入射粒子のスピン多重度

ELXCAL

ファイルから S 行列を読み込み、C 係数に変換して、ELX を呼び出す。ここで、必要な変数 (配列) を宣言し、記憶域を確保している。この部分の説明は、かなりサボっている !!

複素配列、C は C_{l_f, l_i}^j を保存し、その第 1 (2) 添字は l_f (l_i) に対応する。添字の値は、 $LF=2 \times (l_f - j) + 2s + 1$ をとる。 l_i も同様。第 3 添字は j に対応し、添字の値は $J=(2 \times j - JT2MIN)/2+1$ である。

ELX

C 係数やその他のパラメータを利用して、微分断面積を計算する。

前半では角度に依存しない部分を計算し、 j の和をとっている。後半は角度に依存する部分を計算している。

使用している配列の意味

ANGTAB 実際の散乱角の表。単位は度

FLM $FLM(m) = \sqrt{(2l+1)(l-|m|)!/(l+|m|)!}$

PLM Legendre 関数 P_{lm} の表。

VCI $\langle s m_i j - m_i | l_i 0 \rangle$ の表。 $m_i = -s$ から小さい順に書き込まれる。

VCF $\langle s m_f l_f m | j m_i \rangle$ の表。第 1 変数は m_f が小さい順に、第 2 変数は m_i の小さい順に書き込まれる。

CESIG $\exp(i\sigma_l)$ の表

CLJ C 係数の表。第 1 変数は l_f 、第 2 変数は l_i 、第 3 変数は j に対応する。パリティ保存を要求せずに鷹揚に配列をとっている。とは言っても、 l_i や l_f は j を指定した時、 $|j-s| \leq j \leq j+s$ という条件が付くから、この範囲でしか配列は確保していない。
171

FC クーロン散乱の散乱振幅

GC 核力の散乱振幅の式で、 $(-)^{(m+|m|)/2}$ 及び $P_{l_f m}(\theta)$ を除いた部分。但し、 m は 0 又は正に限定している。 m が負の項の絶対値は対応する m が正の項と等しいから、微分断面積だけを計算するならば、 $m < 0$ 部分の計算をする必要無い。従って、 $(-)^{(m+|m|)/2}$ だけ、この式は正しくない。

CPHAS

クーロンパラメータ η と最大軌道角運動量 l_{max} を与えて、 $\exp(i\sigma_l)$ を返す。

SUBROUTINE CPHAS(LMAX, ETA, ESIG)

引数の意味

LMAX l_{max}

ETA η

ESIG $\exp(i\sigma_l)$, ($l = 0$ to l_{max}) を書き込む倍精度複素配列

FCCAL

波数、クーロンパラメータ、角度表等を与えて、クーロン散乱の散乱振幅と微分断面積の表を返す

SUBROUTINE FCCAL(ETA, FK, ESIGO, NANG, ANGTAB, FC)

ETA クーロンパラメータ

FK 波数 [1/fm]

ESIGO $\exp(2i\sigma_0)$

NANG 散乱角度の数

ANGTAB 散乱角度表 [度]

FC クーロン散乱振幅の表

PLMCAL

Legendre 関数 $P_{l m}(\cos \theta)$ を計算する

SUBROUTINE PLMCAL(THETA, LMAX, MMAX, PLM)

引数の意味

THETA ラジアンで与えた角度

LMAX 最大 l

MMAX 最大 m

PLM $P_{lm}(\cos \theta)$ の表。第 1 (2) 添字は $l(m)$ 。0 から最大値迄をとる。

VCCM3E

Clebsch-Gordan 係数 $\langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j_3, m_3 \rangle$ の表を $m_1 = -j_1, -j_1 + 1, \dots, j_1$ の順に配列 VCTAB に返す。非物理的領域には 0 が書き込まれている。

SUBROUTINE VCCM3E(J1, J2, J3, M3, VCTAB)

引数の意味

J1 j_1 の 2 倍

J2 j_2 の 2 倍

J3 j_3 の 2 倍

M3 m_3 の 2 倍

VCTAB 計算結果を返す $2j_1 + 1$ 個の大きさの配列

弾性散乱の計算では、以下の CG 係数を並べ変えておく。

$$\langle l_i 0 s m_i | j m_i \rangle = (-)^{l_i - j + m_i} \frac{\hat{j}}{\hat{l}_i} \langle s m_i j - m_i | l_i 0 \rangle \quad (2.155)$$

$$\langle l_f m_l s m_f | j, m_i \rangle = (-)^{j - l_f - s} \langle s m_f l_f m_l | j m_i \rangle \quad (2.156)$$

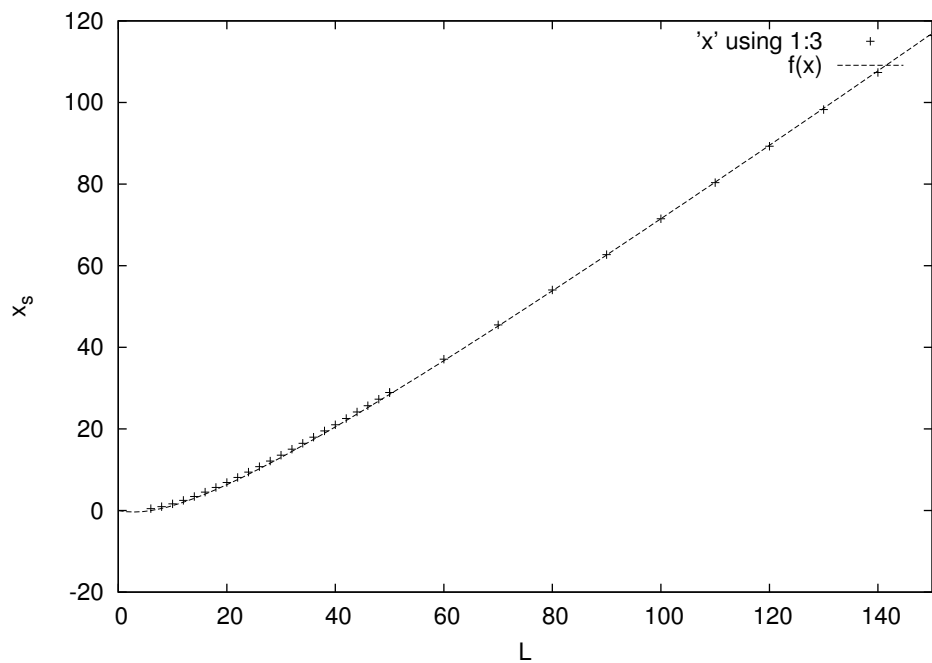
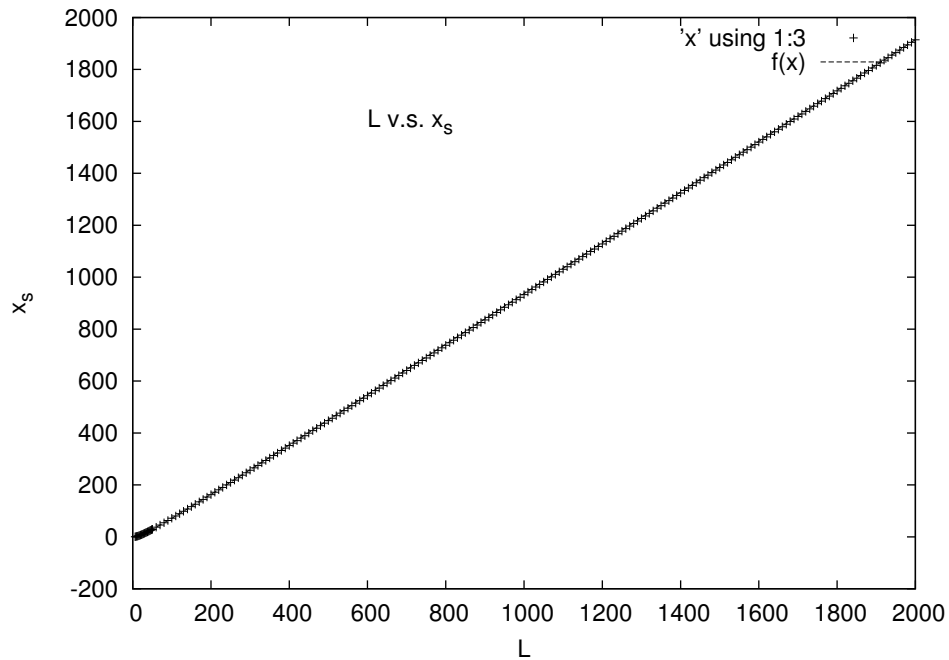
xscal に関するメモ

幾らか気になるので 球ベッセル関数の最初のピーク位置とそこでの値がピーク値の 10^{-8} 倍になる半径をもう一度確認しておく。

障害となる点及び今回の手法には後で記録しておく。

結果

hetak に組込まれた推定式は良く出来ていると思った。hetak に組込まれた式と今回の計算結果を比較した図を以下に示す。



手法記録

前回返は漸化式を用いて、大きな L から下向きに関数値を計算し $L = 0$ で規格化していた。しかし、漸化式を用いての計算は L を減らして行くと最初の内は関数値が大きくなるからいいのだが、途中で振幅がほぼ一定になり振動を繰り返す。従って、関数値がたまたま小さくなる場合には精度が落ちている場合がある。これはまずいので、関数値の評価法を改良する必要がある。

別の表現をすると、 $j_{L-1}(x) = (2L+1)j_L(x)/x - j_{L+1}(x)$ に於いてある L に対して、右辺 第 2 項が第 1 項よりも大きくなる場合があり、その後の漸化式の適用では振動を繰り返す。

対策

内部から微分方程式を解けば、この問題は回避出来る。変曲点よりもそれなりに内側から積分を開始すると、第 1 ピークの位置は開始位置には依存しない事を確認した。第 1 ピークの位置 $x_p(L)$ と L の関係は以下の様に書ける。

$$x_p(L) = (a \times L + b) \times L + c; \quad 5 \leq L \leq 2000 \quad (2.157)$$

$$a = -1.95530940174349e - 06 \quad b = 1.00730451348907, \quad c = 3.42087998916608 \quad (2.158)$$

但し L が小さい範囲では幾らか再現性は悪い。 $0 < L < 100$ ならば、以下の関係の方が良い。

$$a = -0.000174934450488189, \quad b = 1.03931308952876, \quad c = 2.08060364533271 \quad (2.159)$$

2 次の係数は非常に小さいので、直線近似は非常に良い。

次は、ピーク位置での関数値の因子倍の半径を計算することである。これは積分計算していれば簡単だ。積分値を記憶しておいて、ピーク検出後に関数表と対応する半径を見直せば良い。

関数値がピーク値の 10^{-8} になる位置 x_s を与える値を計算してみた。次式を用いるとすると、パラメータは次の表のようになった。

$$x_s = ((p * x + q) * x + r) / (x + s) \quad (2.160)$$

	$0 < L < 100$	$100 < L < 2000$
p	0.910174251162854	0.98132310118092
q	-3.91062674580673	-3.91062674580673
r	1.38277205808606	1804.85478277682
s	21.9545836049262	49.0827109138245

大きな角運動量に対しては、ほぼ直線的に振舞うから、 L の上限は 2 0 0 0 を越えても適用可能だと思う。

計算プログラムは、fjl.f である。

2.9 trix プログラム

trix.f は hctak から出力される S 行列要素の表を利用して、二・三重微分断面積を計算するプログラムである。

trix.f の入力

trix.f の標準入出力ファイルの名前は trix.in, trix.out であり、論理機番は 5 と 6 である。これ以外に hctak からの S 行列の出力ファイルを論理機番 7 で利用する。更に、原子核データファイル umtab を論理機番 8 で使用している。これらのファイルは trix の実行時に利用可能でなければならない。

入力形態は、一行が 80 桁のカード単位で行う。1、2 枚目の書式は確定しているが、他は FORTRAN の意味での自由書式である。この自由書式に関しては hctak の解説の直後を参照。

第 0 枚目 桁表示と忘備メモ

第 1 枚目 (KTRL(i), i= 1, 10),TITLE: FORMAT(10I2,A50)

KTRL は、機能制御の変数であり、TITLE も忘備メモであり、計算に影響を与えない。

KTRL(1) = 1: 粒子 1 と 2 を入れ換える。

入れ換えの操作は、論理機番 5 からの入力が全て終了し、散乱状態に関する計算結果が読み込まれる前に行われる。

但し、KTRL(2), KTRL(3), ANG の内容は入れ換えない。即ち、これらのパラメータは粒子 1 と 2 を入れ換え後の状態を指定する。

KTRL(2) スリット 1 (粒子 1 を検出するスリット) に関する情報: カード 4 に角度情報を入力する。

0 立体角は無限小

1 円形スリット

2 矩形スリット

KTRL(3) スリット 2 (粒子 2 を検出するスリット) に関する情報: カード 5 に角度情報を入力する。

0 立体角は無限小

1 円形スリット

2 矩形スリット

KTRL(4) 散乱角度を変化させながら、複数回三重微分断面積を計算する。

KTRL(4) は 1 から 4 の場合が有効であり、以下の表の角度を変化させながら三重微分断面積を計算する。角度情報は、第 6 枚目のカードで指定する。

1: 粒子 1 の極角 θ_1	2: 粒子 1 の方位角 ϕ_1
3: 粒子 2 の極角 θ_2	4: 粒子 2 の方位角 ϕ_2

KTRL(5) 一つのスリットに対して、三重微分断面積を平均する。当面、二つの副プログラムがこの機能を提供している。

KTRL(5) = 1 ならば、TXAV2Q 副プログラムを呼び、

KTRL(5) = 2 ならば、AXAV2G 副プログラムを呼ぶ。

前者は、Quasi Monte Carlo 法を用い、後者は Gauss-Legendre 積分法を利用する。

KTRL(6) 二重微分断面積を計算する。計算する副プログラムの選択。

KTRL(6) = 1 ならば、DDXQMC 副プログラムを呼び、

KTRL(6) = 2 ならば、DDXGT 副プログラムを呼ぶ。

KTRL(7) 二重微分断面積をスリット 1 の張る立体角 (θ_1, ϕ_1) で積分する。

KTRL(7) = 1 ならば、DDXINQ 副プログラムを呼び、

KTRL(7) = 2 ならば、DDXING 副プログラムを呼ぶ。

前者は 4 次元積分を QMC 法で、後者は Gaussian quadrature で行う。

KTRL(8) 当面は使用していない。

KTRL(9) 二・三重微分断面積の単位指定。

= 0 ならば $mb/(d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1)$ 。

= 1 ならば、 $mb/(d\Omega_1 d\Omega_2 dp_1)$ 。即ち、粒子 1 の運動量スペクトルを想定している。

KTRL(10) = 1 通常の微分断面積のみを出力する。=0 ならば入射・放出粒子のスピン偏極を指定した断面積も出力する。但し、入射ビームの進行方向が量子化軸の方向である。

第 2 枚目 SFILE : FORMAT(A20)

hctak からの S 行列を出力したファイル名。必ず、trix を実行する directory に存在しなければならない。更に、hctak から出力されたときのままでなければならない。

第 3 枚目 QVAL, NE1, E1MN, E1MX, JT2LIM

QVAL (1+2) 系の基底状態のエネルギー固有値。常識的には負である。[MeV]

NE1 計算すべき、粒子 1 の運動エネルギーの数

E1MN, E1MX 計算すべき粒子 1 の運動エネルギーの上下限を指定する

無入力や非常識な値ならば内部で、適当に調整する。従って、NE1 よりも減る場合がある。

JT2LIM 全系の最大角運動量を JT2LIM に減らす。但し、0 ならば hctak での JT2MAX を採用する。プログラムの動作テスト時に使用すると時間が節約出来る。

第 4 枚目 (ANG(i,1), i=1,5)

粒子 1 を検出する方向と検出器 1 の立体角を規定する角度 [度]。ANG(4,1), ANG(5,1) は円形スリットでは使用されない。後出のスリットパラメータの定義図を参照。

ANG(1,1) 極角 (θ_1) [度]。

ANG(2,1) 方位角 (ϕ_1) [度]。

ANG(3,1) 円形スリットならば半頂角。矩形スリットならば、xz 面内の開き角の半分。スリットパラメータ図の $\angle AOH$ に対応する。

ANG(4,1) 矩形スリットの yz 面内の開き角の半分。スリットパラメータ図の $\angle BOH$ に対応する。

ANG(5,1) スリットの捻り角。[度]。

第 5 枚目 (ANG(i,2), i=1,5)

粒子 2 を検出する方向と検出器 1 の立体角を規定する角度。粒子 2 に対する、第 4 枚目と同じ情報を書く。

第 6 枚目 EPS, NFGMX, NANG, ANGMIN, DANG

EPS は、二重微分断面積と三重微分断面積のスリット平均をする副プログラム DDXQMC と TXAVR で、収束判定に使用される小さな数。

DDXQMC では 0.01, TXAVR では 0.1 程度を想定している。

NFGMX の意味

スリット 2 の張る立体角で QMC 法を用いて二重積分をする時、Fibonacci 数を用いて優良格子点を作る。ある種の、常識的な、定義での Fibonacci 数の最初から (NFGMX-1) と NFGMX 番目を用いて計算を開始する。

二重微分断面積をスリット 1 の立体角で積分するのは、時間を要する。QMC 法でこの 4 重積分をするが、後述の P.L'ecuyer の論文から引用した $t = 8$ から $t = 20$ を用いて、最大 13 回積分を繰り返し、結果が収束すればその値を、収束しなければ最後の値を返す。この収束判定は、積分結果の増分と新しい積分結果の EPS 倍を比較して行う。

ここで、もしも NFGMX の入力値が 8 ($t=8$ に対応) から 20 ($t = 20$ に対応) の範囲にあれば、この指定された回数に対応する 4 重積分を一回だけ行う。 $t = 8$ は、特定の E_1 に対して、三重微分断面積を約 256 回評価する。

KRTL(4) が指定されていると、ANGMIN から DANG 刻みに NANG 回、三重微分断面積の計算を繰り返す。角度の単位は、度。

当面は、これでお仕舞い。

KTRL の値による計算の優先順位

まず KTRL(7) を調べ正ならば二重微分断面積の角度平均、即ち粒子 1 のエネルギー (運動量) スペクトルを計算する。

次は KTRL(6) が 0 かどうかを調べ、二重微分断面積を計算する。

その後で、KTRL(5) が指定され、且つ KTRL(2), KTRL(3) が 0 かどうかを調べる。必要ならば三重微分断面積のスリット平均をする。三重微分断面積は、立体角で割った値が出力されている。

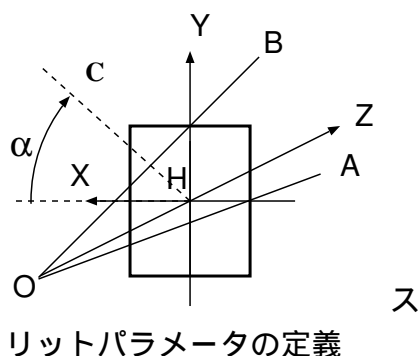
その後で、KTRL(4) が 0 かどうかを調べ、0 でないならば角度を変えながら三重微分断面積を繰り返して計算する。

これらの全ての検査ををすり抜けたならば、単純な三重微分断面積を計算する。

現在の構成では、KTRL(4) から KTRL(7) の内の一つの機能の実行を終えるとプログラムは停止する。主プログラムの GOTO 55 を消せば、複数の機能を順次実行させる事が可能である。

スリット角度の詳しい定義

矩形スリットを例にとり、図を用いて説明する。標的中心を O とする。xyz 軸は、Madison convention を想定している。



まずスリットを図の様に、一つの辺が xz 面に平行にして、中心を z 軸上に置く。第 3 番目の角度は、 $\angle AOH$ 、第 4 番目の角度は、 $\angle BOH$ である。第 5 番目の角度は、スリット全体を図の状態から Oz を回転軸として、正の X 軸が正の Y 軸の方向へ向かって回転する角度 $\angle CHX (= \alpha)$ である。このスリットは、 $(ANG(1,i), ANG(2,i), (i=1 \text{ or } 2))$ の指定に従って、検出器の設定角度に、後出の回転行列 (2.180) を利用して移動される。

入・出力例

$^{58}\text{Ni}+d$, $E_d = 56 \text{ MeV}$ の三重微分断面積を、陽子と中性子を 0 度で検出する場合。hctak への入力の内、NKBIN を全てのスピン状態に対して 4 から 10 に増やして S 行列を再計算した後、trix を走らせた。以下に示すのは、この場合の入出力である。例によって、日本語表示部分は、説明の為に後から書き込んだものである。まず、入力例

```
2  4  6  8 10      | title begins
0 0 0 0 0 0 0 0 1  56Ni(d,d)
```

```

hctksmat
-2.22  50  0  0  0  /Qval, NE1, E1MN, E1MX, JT2LIM
0  0  0  0  0      /ANG1(i,1),i=1,5 粒子1の検出角度
0  0  0  0  0      /ANG2(i,2),i=1,5 粒子2の検出角度
0.1 50  10  2  2    /EPS, NFGMX, NANG, ANGMIN, DANG
*****
KTRL(1): excahnge particle 1 <--> 2
KTRL(2): shape of slit 1
KTRL(3): shape of slit 2
KTRL(4): scatt. angle controle
KTRL(5): set spins to 0
KTRL(6): double differential cross sections
KTRL(7): interg DDX over theta_1. NOT supported yet.
:::
KTRL(10): do not print pol. Xsec

```

次は、この出力例。但し、少しずつプログラムの変更をしているので、細部は異っているかもしれない。

```

Your input KTRL= 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1
               title=      56Ni(d,d)
S mat. file=hctksmat                Qval= -2.2200 [MeV]

Ang(*,1):   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00 [deg]
Ang(*,2):   0.00   0.00   0.00   0.00   0.00 [deg]
Slit(1):                Slit(2):
今回は、スリット情報は使用していない。

```

sys	Ename	Z	A	J	pi	M[u]
1	H	1	1	1/2	+	1.0073
2	N	0	1	1/2	+	1.0087
3	NI	28	58	0	+	57.9200

Elab((1+2)-3)= 56.0000 MeV

NLSJ= 4 ISJJ= 0
 4種類のスピン状態があり、チャネルスピン表示での計算である。jj 結合ならば ISJJ=1 と表示される。

```

LS JS II NK IP
0  2  2 11  1

```

```

2   2   2  10  12
2   2   4  10  22
2   2   6  10  32

```

LS、JS、II は各スピン状態の内部軌道角運動量、チャンネルスピン、全角運動量。
 NK は異なる波数状態の数。最初のスピン状態のみ基底（束縛）状態を含むから、1 1
 であり、他は1 0となっている。
 IP は、各スピン状態の先頭へのポインター

```

IS1 IS2 IIO ISN ISX LSMAX IIMAX MSMAX MLMAX
1   1   2   2   2     2     6     2     4

```

```

NLJI NLJK   NCM KCMX  NG12   NG3  JTMIN  JTMAX
18   44   198  102   18   92    0    90

```

1 行目の変数は、実際に計算に関係するパラメータであり、2 行目は、JTMIN と
 JTMAX を例外として、配列の大きさに関係する。

次の出力も、内部的に使用している変数の値や配列の大きさである。

```

Main: malloc. parameters
NS0 NS1 NS2 NE1 NLSJ NLJI MLMAX  LMAX JMNX  NYL
3   2   2  50   4   18    4   48   46   245

```

これらの変数の内の重要なものについては、後で説明が登場する。
 エラーやプログラムの改良時以外は不必要だろう。

```

TRIX0: E1 range: 0.0000E+00 5.3598E+01 step  1.072 MeV
      P1 range: 0.0000E+00 3.1706E+02           MeV/c
      S  range: 0.0000E+00 3.0936E+02           MeV/c
      Sp Shx Amom= 3.0936E+02 3.0181E+02   7.7006E+00 MeV/c

```

E 1 と P 1 は粒子 1 がとり得る運動エネルギーと運動量の範囲。S は、入力による
 FKSMAX を考慮した運動量の範囲。次の行は、正確な定義を覚えていない。
 FKSMAX を考慮した場合の S に関する制限を与えるパラメータだったと思う。

次は、三重微分断面積の計算値 [mb/sr**2 MeV]

第 1、2 列は粒子 1 の運動エネルギーと運動量の c 倍。

第 3 列は、粒子 1 と 2 の内部（相対）運動の波数。FKSMAX=1.0/fm として S 行列を
 計算したが、0.72/fm までしか、実際には使用していないようだ。

第 4 列が、粒子 1 の運動エネルギーを独立変数とした時の三重微分断面積。

#E1 (MeV)	P1xc [MeV]	k12 [/fm]	tri-Xsec
0.536	3.17057E+01	7.19472E-01	1.03019E-01
1.608	5.49159E+01	6.52795E-01	1.07713E-01
2.680	7.08961E+01	6.04238E-01	2.38051E-01
3.752	8.38854E+01	5.63128E-01	5.82485E-01

25.191	2.17363E+02	3.55786E-02	3.75885E+02
26.263	2.21940E+02	1.28692E-02	7.61059E+01
27.335	2.26424E+02	9.82465E-03	4.68497E+01
28.407	2.30821E+02	3.25299E-02	3.34311E+02
29.479	2.35136E+02	5.52738E-02	5.91575E+02
30.551	2.39373E+02	7.80844E-02	6.70606E+02
31.623	2.43536E+02	1.00990E-01	5.90247E+02
32.695	2.47629E+02	1.24022E-01	4.38303E+02
33.767	2.51656E+02	1.47212E-01	2.95601E+02

50.918	3.09029E+02	5.99722E-01	2.67904E-01
51.990	3.12265E+02	6.48042E-01	1.14672E-01
53.062	3.15468E+02	7.14375E-01	1.10707E-01

ここでは、非常に簡単な場合について入力例を示した。幾らか、他の場合その他に関してコメントをしておこう。

- * 三体反応の運動学は二体の場合と比較すると、かなり複雑である。事前に運動学に関する計算をしておく事を勧めます。
- * KTRL(1)=1 とすると、hctak で粒子 1 (2) と定義した粒子を粒子 2 (1) として計算をする。
- * KTRL(9)=0 ならば、エネルギースペクトル、KTRL(9)=1 ならば運動量スペクトルを計算するはずだ。但し、運動量スペクトルの出力はプログラムを書いただけで、テストはしていない。エネルギースペクトルに速度を掛けるだけだから、正しくなければ、御自分。。
- * この入力例では粒子 1、2 の検出角度は 0 となっている。ANG(1,1), ANG(2,1) に度単位での数値を入力するだけで、粒子 1 の検出角度は設定出来る。
粒子 2 についても同様である。

- * 三重微分断面積の検出角度依存性を調べたい場合には、KTRL(4) に 1 から 4 の値を適宜入力し、6 枚目の 3 個の変数 NANG, ANGMIN, DANG を与える。この場合、指定された角度に対応する ANG の値は使用されない。
関係する粒子にスピンがあると、出力が多くなるから、KTRL(10)=1 としておく、偏極情報の出力が抑制される。
- * 実験値と比較したい場合には、スリット情報を定義して、KTRL(5) を使用する。二つのスリットパラメータが与えてあると (KTRL(2)> 0, KTRL(3)> 0)、両スリットでの平均を計算し、一方のスリットパラメータだけが与えられているならば、一方についてだけ平均をする。この場合の出力は、一方又は双方の立体角で割ってある。
- * KTRL(6) を使用すると、粒子 2 の全立体角に対して三重微分断面積を面積分する。粒子 2 を検出しない実験 (elastic break up) に対応する微分断面積が計算される。この場合には粒子 1 の検出器は無限小と仮定している。
- * 上の例で、粒子 1 の検出器が有限の大きさならば、この検出器の張る立体角に対して、二重微分断面積を積分しなければならない。KTRL(7)=1 とすると、この作業を実行してくれる。
即ち、特定の角度に粒子 1 の検出器を置いた時のエネルギー (運動量) スペクトルを出力してくれる。
- * 三重微分断面積を積分する時、以下のエラー文が大量に出力される場合がある。
TPINT: E1= 18.500[MeV] Theta2[0.000 0.296]give up integ.
この場合でも、積分は大体は信頼出来る範囲に収まっているはずである。

解説

複合粒子 (1+2) と粒子 3 が衝突する。複合粒子はこの過程で粒子 1 と 2 に壊れるが、粒子 3 は基底状態に留まる。粒子 1 と 2 の検出器を Ω_1, Ω_2 の方向に置き、検出器 1 では粒子 1 の粒子識別とエネルギー測定をするが、検出器 2 では粒子 2 を検出したという粒子識別のみを行う。但し、粒子 1 と 2 とは同時計数される。この測定手法で測定される断面積を三重微分断面積と呼ぶ。

この基本的な式として、Prog. Theor. Phys. Supp. 89 (1986) 第 IV 章の式 (2.8), (2.9), (2.10) pp 89 を以下に引用しておこう。

$$\frac{d^3 \sigma}{d\Omega_b^L d\Omega_x^L dE_b^L} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\mu_R}{P_0} |T_{fi}|^2 \rho(E_b^L) \quad (2.161)$$

放出粒子は b と x であり、 E_b^L が粒子 b の実験室系での運動エネルギーである。 μ_R は入射粒子 a と標的 A との換算質量。粒子 a は粒子 1 と 2 の束縛状態である。式 (2.161) は標準的な量子力学の教科書に記載されている。¹⁸³ 時間に依存する摂動がある時の遷移確率の

式を入射粒子の流束 P_0/μ_R で割って微分断面積に変換している。

終状態の状態密度は、Ohlsen の論文 (Nucl. Instr. Meth. **37**, (1965), pp240) に式 (40) として与えられている。

$$\rho_1(E_1)dE_1d\Omega_1d\Omega_2 = h^{-6} \frac{m_1 m_2 m_3 p_1 p_2}{(m_2 + m_3) + \frac{m_2(\mathbf{p}_1 - \mathbf{P}) \cdot \mathbf{p}_2}{p_2^2}} dE_1d\Omega_1d\Omega_2 \quad (2.162)$$

ここで、 \mathbf{P} は実験室系での全運動量、このマニュアルで利用する記号は \mathbf{p}_i である。二つの粒子の自由度に関係するから、プランク定数の 6 乗が分母に来る。逆運動学的な実験条件では、 $p_{2-3}/p_2 (dp_{2-3}/dp_2)$ に対応するこの式の分母は負にもなるようだから、絶対値をとる。

次の式 (2.163) は、CDCC プログラムで計算される T 行列である。

$$T_{fi} = i \frac{(2\pi\hbar)^3}{\mu_R \sqrt{2}} \frac{1}{k\sqrt{P}P_0} \sum_{lLM} \sqrt{2J+1} \left[Y_l(\hat{\mathbf{k}}) \otimes Y_L(\hat{\mathbf{K}}) \right]_{JM} e^{i(\delta_{ik} + \sigma_{lk})} S_{lL}^J(k) \quad (2.163)$$

この式で、 δ_{ik} と σ_{lk} は粒子 b と x の散乱に関する、核力とクーロン力による位相のずれである。この式では粒子 1 と 2 のスピンを無視している。更に、分母に登場する $\sqrt{\mu_\rho \mu_R}$ は μ_R の間違いだとは、井芹さんの弁である。河合・吉田著「原子核反応論」(朝倉書店、2002) pp58 (2.149) に依ると、 S と T の関係式は、以下の通りである。

$$\tilde{S}_{\beta\alpha} = \delta_{\beta\alpha} \delta(\mathbf{k}_\beta - \mathbf{k}_\alpha) - 2\pi i \frac{\sqrt{\mu_\alpha k_\alpha \mu_\beta k_\beta}}{\hbar^2} T_{\beta\alpha} \quad (2.164)$$

今の場合、入口チャネル α では (1-2) 系は束縛状態にあり、出口チャネル β では散乱状態にあるが、elastic break-up であるから、 $\mu_\alpha = \mu_\beta$ である。一方、 $k_\alpha \neq k_\beta$ である。従って、井芹さんの言われる事は妥当だと思う。式 (2.163) では、この因子は修正済である。

プログラム hctak では、粒子 1 と 2 のスピン自由度を許しているので、 T_{fi} は式 (2.163) を幾らか一般化しておかねばならない。更に、散乱状態波動関数の表現として δ 関数で規格化するか、平面波をそのまま利用するかで途中の因子が異なる。Prog. Theor. Phys. Supp. **89**(1986) の式 (2.6) を採用しているから、 δ 関数による規格化を採用する。

CDCC S 行列要素を T 行列要素に変換する過程は、井芹さんのメモ (private communication) を参照し、意味が判る程度に簡便なメモを以下に記録しておく。CDCC では、入射・散乱波は粒子 1 と 2 が結合した表現になっている。三重微分断面積の計算では、粒子 1 と 2 は独立した (ばらした) 表現にしておかねばならない。下の 1、2 の因子がこの作業に対応している。過去の歴史をひきずっているので、LS 結合を仮定している。

1 (1-2) 系に関する因子

$$F_{12} \equiv \frac{(2\pi)^{3/2}}{k} e^{i(\delta_l + \sigma_l)} \langle s_1 m_1, s_2 m_2 | s m_s \rangle \langle l m_l, s m_s | I M_I \rangle Y_{l m_l}(\hat{\mathbf{k}}) \quad (2.165)$$

2 ((1+2)-3) 系の因子

$$F_3 \equiv (2\pi)^{3/2} e^{i\sigma_L} \langle I M_I, L M_L | J M_0 \rangle Y_{L M_L}(\hat{\mathbf{K}}) \quad (2.166)$$

3 入射波条件

$$F_{in} \equiv (2\pi)^{3/2} \sqrt{\frac{2L_0+1}{4\pi}} e^{i\sigma_{L_0}} \langle I_0 M_0, L_0 0 | J M_0 \rangle \quad (2.167)$$

4 S→T 変換因子

$$F_{ST} \equiv \frac{i}{2\pi} \frac{\hbar^2}{\mu_R \sqrt{K_0 K}} \quad (2.168)$$

F_{12} では波数が分母に含まれるのに F_3 の分母には無い理由は、関係する波動関数の規格化に起因する。(1-2) 系波動関数は、規格直交条件 (Prog. Theor. Phys. 89 pp 40 (2.11) 式) を課しているが、CDCC 方程式 (同 pp 41 (2.16) 式) を解く場合にはこんな要請は置いていない。

更に、前者には核力による位相のずれが含まれるが、後者には含まれていない。後者の位相のずれは、式 (2.169) に登場する S 行列に取り込まれている。

この4個の式を纏めると、

$$\begin{aligned} T_{fi} = & i \sum \frac{(2\pi)^3 \hbar^2}{\sqrt{2K_0 K} k \mu_R} e^{i(\sigma_I + \delta_I + \sigma_{L_0} + \sigma_L)} \sqrt{2L_0+1} \langle I_0 M_0, L_0 0 | J M_0 \rangle \\ & \times \langle s_1 m_1, s_2 m_2 | s m_s \rangle \langle l m_l, s m_s | I M_I \rangle \langle I M_I, L M_L | J M_0 \rangle \\ & \times Y_{l m_l}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{L M_L}(\hat{\mathbf{K}}) S_{L L_0}^{J \pi} \end{aligned} \quad (2.169)$$

ここで (1-2), ((1+2)-3) 系の波数 k, K は、放出粒子の運動量 (p_1, p_2) から、後述する運動学を用いて変換されているとする。

この式でスピンを無視する ($s_1 = s_2 = s = 0$) と ($\delta_{lI} \delta_{m_l M_I}, \delta_{L_0 J}$) が登場するから、2個の CG が消え、残りの CG と二つの球面調和関数を角運動量の合成則を用いて (J, M_0) に統合する。更に入射粒子の内部軌道角運動量は0だと仮定すると、(2.163) と (2.169) は一致する。但、Prog. Theor. Phys. Supp. 89 III, pp 41 (2· 19b) に登場する平方根の因子は忘れないようにしなければならない。

参考の為に、全体の次元を確認しておこう。

$$[\text{式 (2.169)}] = [\hbar]^2 / [K^2 \mu] [k^{1/2}] = [M L^2 T^{-1}]^2 [L^2 / M] [L^{1/2}] = [M L^{6.5} T^{-2}]$$

$$[\text{式 (2.162)}] = [M L^2 T^{-1}]^{-6} [M^4 L^2 T^{-2}] = [M^{-2} L^{-10} T^4]$$

$$[\text{式 (2.161)}] = [M^{-1} L^{-2} T] [L^{-1} T] [M^2 L^{13} T^{-4}] [M^{-2} L^{-10} T^4] = [M^{-1} T^2]$$

一方 エネルギーの次元は $[E] = [M L^2 T^{-2}]$ だから、三重微分断面積の次元は、[式 (2.161)] = $[L^2/\text{Energy}] = [\text{fm}^2/\text{MeV}]$ である。

hctak が使用している長さエネルギーの単位は $[\text{fm}]$ と $[\text{MeV}]$ であるから、通常の $[\text{mb}/\text{sr}^2 \text{ MeV}]$ という単位を利用するには、計算値を 10 倍しておかねばならない。

LS 結合と j-j 結合の比較

三重微分断面積を評価するには、全系の波動関数の外向き部分が、球面波と 3 個の構成粒子のスピン波動関数の積で書かれる様に表現する必要がある。

次の平面波を Rayleigh 展開を利用する。

$$\exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = 4\pi \sum_{lm} i^l j_l(kr) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \quad (2.170)$$

$$\begin{aligned} \exp i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \exp i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) \phi_{s_1 m_1} \phi_{s_2 m_2} \\ = (4\pi)^2 \sum_{lm_l LM SI J} j_l(kr) j_L(KR) Y_{lm_l}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{K}}) \\ \times \langle s_1 m_1 s_2 m_2 | s m_s \rangle \langle l m_l s m_s | I M_I \rangle \langle I M_I L M_L | J M \rangle \\ \times [[i^l Y_l(\hat{\mathbf{r}}) \otimes [\phi_{s_1} \otimes \phi_{s_2}]_s]_I \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}})]_{JM} \end{aligned} \quad (2.171)$$

$$\begin{aligned} = (4\pi)^2 \sum_{lm_l LM SI J} j_l(kr) j_L(KR) Y_{lm_l}^*(\hat{\mathbf{k}}) Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{K}}) \\ \times \langle l m_l s_1 m_1 | j m_j \rangle \langle j m_j s_2 m_2 | I M_I \rangle \langle I M_I L M_L | J M \rangle \\ \times [[[i^l Y_l(\hat{\mathbf{r}}) \otimes \phi_{s_1}]_j \otimes \phi_{s_2}]_I \otimes i^L Y_L(\hat{\mathbf{R}})]_{JM} \end{aligned} \quad (2.172)$$

hctak では、これらの式の $[\dots]$ の部分を角運動量基底としている。

粒子 3 のスピンは実質的に無視している。式 (2.171) に登場する CG 係数が式 (2.165), (2.166) に登場している。式 (2.171) が LS、下の式 (2.172) が j-j 結合に対応しているから、LS 結合での以下の二つの CG 係数

$$\langle s_1 m_1 s_2 m_2 | s m_s \rangle \langle l m_l s m_s | I M_I \rangle \quad (2.173)$$

を次の二つの CG 係数で置き換えれば良い。

$$\langle l m_l s_1 m_1 | j m_j \rangle \langle j m_j s_2 m_2 | I M_I \rangle \quad (2.174)$$

これらの CG 係数は、結合した状態を結合しない状態へ変換するために、S 行列に掛けられた。LS 表現では、分解後の二つの粒子のスピンが明示的に出て来るので見やすいが、j-j 結合ではこの関係が見にくくなる。そこで廻りくどくはあるが、次の等式を用いて両

表現の統一化を図ろう。

$$\langle l m_l s_1 m_1 | j m_j \rangle \langle j m_j s_2 m_2 | I M_I \rangle \quad (2.175)$$

$$= \sum_s \hat{j} \hat{s} \langle s_1 m_1 s_2 m_2 | s m_s \rangle \langle l m_l s m_s | I M_I \rangle W(l s_1 I s_2; j s) \quad (2.176)$$

ここで、 $\hat{s} = \sqrt{2s+1}$ の略号である。

三重微分断面積は LS 結合を基本とし、 $j-j$ の場合には、(2.176) に登場するラカー係数の因子 $\sum_s \hat{j} \hat{s} W(l s_1 I s_2; j s)$ だけ余分に幾何学因子が掛かり、更に s に付いての和が必要となる。 s の分だけ配列が大きくなるが、これは統一的理解の必要経費と割り切ろう。

即ち、入射粒子は $(I_0 M_0)$ 、二つの検出される粒子は $(s_1 m_1)$, $(s_2 m_2)$ という偏極状態にある事を想定した三重微分断面積を計算する。

粒子 1 と 2 の入れ換え

hctak や trix では粒子 1 と 2 は厳密に設定されているが、実際上は入射粒子を構成する二つの粒子の内どちらを粒子 1 と命名するかは自由である。実験的に三重微分断面積を測定する場合に、この問題に行き当たる。即ち、hctak では粒子 2 と名前を付けていた粒子を粒子 1 として、粒子 1 の三重微分断面積を測定/計算したくなる。この事情を考える。粒子 1 と 2 のパラメータが関係するのは、次の 2 点である。

(1) 状態密度の式 (2.162) の分母の運動量に対応する部分。

この部分は、trix 計算の初期に粒子 1 と 2 の全てのパラメータを全て交換しておけばよい。

(2) T 行列要素の式 (2.169) の構成要素 F_{12} (2.165)。

ここに登場する因子の起源は、(2.172) を見ると分かる。この式の左辺は粒子 1、2 の入れ換えに対して、 $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$, $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ であるから不変である。

一方、右辺に登場する鍵括弧で囲まれた部分は、既に hctak でこの順番の角運動量結合として使用されているから、この順番を変えるには再度 hctak の計算をせねばならないが、それはしたくない。 LS 表現の場合、 $(2-1) Y_l(\hat{\mathbf{k}})$ のところを $(-)^l$ 倍する。(2-2) CG 係数 $\langle s_1 m_1 s_2 m_2 | s m_s \rangle$ の入れ換えから位相 $(-1)^{s_1+s_2-s}$ が登場する。

一方、 $j-j$ 結合においては、hctak で l と結合するのは s_1 と定義しているから、粒子 1 と 2 のスピンだけを入れ換えると力学そのものが変更されてしまう。式 (2.176) の Racah 係数の順序は入れ換えてはならない。その上で、 LS 表現の場合の位相の変更を導入すれば良い。

偏極実験

ここでは無偏極ビームを用い、放出粒子の偏極も測定しない場合に限定した。もしも、偏極実験に対応したいならば部分断面積を計算するところで、直接に T の絶対値の二乗和を計算するのではなく、この T 自身を保存し、現在の量子化軸である入射粒子の進行方向

から、実験者が使用している量子化軸方向へ座標系を回転してから、物理量を計算すれば良い。この点に関しては、以下の論文を参照するのが良いだろう。

G.R. Satchler 著 Nucl. Phys. 55 (1965) pp1 Appendix.

特に、 k_c と K_c が共に p_i に平行ならば、 $T_{m_1, m_2; M_0} = (-)^{I_0 + s_1 + s_2 - 2J} T_{-m_1, -m_2; -M_0}$ が成立するから、計算のテストになるかな？

有限な大きさの検出器

三重微分断面積の角度依存性が非常に大きく、更に検出器が張る立体角が大きい時には、対応する立体角にわたる平均値を計算せねばならない。即ち、実験値と計算値を比較するためには、以下の計算をしておく必要がある。

$$\left\langle \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} \right\rangle_{\Omega_1 \Omega_2} = \frac{1}{\Omega_1 \Omega_2} \int d\Omega_1 \int d\Omega_2 \left(\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} \right) \quad (2.177)$$

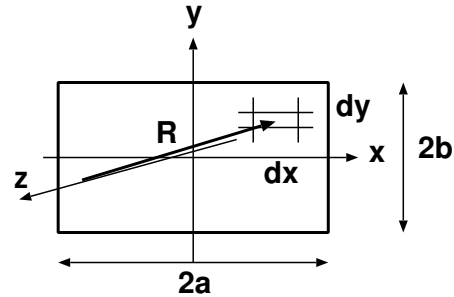
積分は、検出器 1、2 が張る立体角にわたる。ひょっとして、一方の粒子検出器は荷電粒子を高精度の位置検出型の検出器で検出しているかもしれない。この時は四重積分は二重積分になる。先ず、この式の右辺の分母に登場するスリットの立体角の計算を、(1) 丸いスリット及び (2) 長方形のスリットに対して計算しておこう。

1. 半頂角が θ_a の円錐に対応するスリットの立体角

$$\Omega_c(\theta_a) = 2\pi \int_0^{\theta_a} (R \sin \theta)(R d\theta)/R^2 = 4\pi \sin^2 \theta_a / 2 \quad (2.178)$$

2. スリット中心から距離 R の位置に置かれた、半幅が a, b の矩形スリットの立体角

図を見ながら、計算の詳細を決定する。スリットの全幅は $2a, 2b$ であり、スリットの中心は、散乱中心から R の位置に、散乱中心に正対して置かれている。図の様に、座標軸をとる。従って、以下の積分を計算すれば良い。



$$\Omega_r(R, a, b) = 4 \int_0^a dx \int_0^b dy \frac{R}{(R^2 + x^2 + y^2)^{3/2}} = 4 \tan^{-1} \left(\frac{ab}{R\sqrt{R^2 + a^2 + b^2}} \right) \quad (2.179)$$

この積分は幾らか面倒だから、簡単な計算過程をメモしておこう。

$$\begin{aligned}
I &= \int_0^a dx \int_0^b dy \frac{R}{(R^2 + x^2 + y^2)^{3/2}} = R \int_0^a dx \left[\frac{y}{(R^2 + x^2)\sqrt{R^2 + x^2 + y^2}} \right]_0^b \\
&= Rb \int_0^a dx \frac{1}{(R^2 + x^2)\sqrt{R^2 + b^2 + x^2}} = -4bR \int_{t(0)}^{t(a)} \frac{t dt}{t^4 + 2t^2(R^2 - b^2) + (R^2 + b^2)^2} \\
&= \text{Tan}^{-1} \left(\frac{R}{b} \right) - \text{Tan}^{-1} \left(\frac{R^2 + a^2 - a\sqrt{R^2 + a^2 + b^2}}{bR} \right) = \text{Tan}^{-1} \left(\frac{ab}{R\sqrt{R^2 + a^2 + b^2}} \right)
\end{aligned}$$

x から t への変数変換は、 $\sqrt{R^2 + b^2 + x^2} = x - t$ とした。最後の式変形には、正接に関する差公式を用いた。即ち、 $\phi = \text{Tan}^{-1}\alpha$, $\psi = \text{Tan}^{-1}\beta$ ならば、 $\tan(\phi - \psi) = (\tan \phi - \tan \psi)/(1 + \tan \phi \tan \psi) = (\alpha - \beta)/(1 + \alpha \beta)$ 。この式の逆正接をとると、 $\phi - \psi = \text{Tan}^{-1}\{(\alpha - \beta)/(1 + \alpha \beta)\}$ 。

数値計算手法

円形スリットでは、独立変数を動径と方位角にとる。

動径方向の積分には Legendre-Gauss 積分、方位角方向の積分には台形公式を用いる。

長方形スリットの場合

正方形の領域に変換して、デカルト座標と優良格子点法を用いる。仮想的にスリットを z 軸上に置いたとする。この状態でのスリット上の標本点のデカルト座標を x , y とし、Legendre-Gauss の積分公式を使用する。但し、長さの単位は標的中心とスリット中心間の距離を単位とする。

$$\int_{-a}^a dx \int_{-b}^b dy \{1 + x^2 + y^2\}^{-3/2} \sigma / \Omega \sim ab / \Omega \sum_{ij} w_i w_j \{1 + x_i^2 + y_j^2\}^{-3/2} \sigma(\theta_R, \phi_R)$$

ここで、 w_i, w_j は積分公式の荷重であり、 $x_i = a s_i$, $y_j = b t_j$ と書くと、 s_i, t_j は積分区間 $[-1, 1]$ を代表する積分変数の標本点である。

更に、 θ_R, ϕ_R は、仮想位置でのスリット上の座標 (x_i, y_j) を実験で使用しているスリット位置へ回転して得た後での極角と方位角である。

上の式で、積分公式の次数は x, y 方向で異ってもよいが、微分断面積に大きな方向依存性があるとは考え難いので、同じ次数としている。収束性を確認するために、次数を上げた時の計算結果と比較している。

円形スリット上の数値積分

半頂角が θ_c の円形スリット上での断面積の平均値は、以下の式で評価する。

$$\int_0^{\theta_c} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \sigma(\theta, \phi) / \Omega \sim \frac{\theta_c}{2\Omega} \frac{2\pi}{N} \sum_i w_i \sin t_i \sum_j \sigma(\theta_R, \phi_R)$$

極角方向は、半頂角の半分を中心として Gauss-Legendre の公式を使用し、方位角方向の積分には、次数が N の台形公式を使用する。ここでも、収束確認の為に相続く二つの次数での計算結果を比較している。

追加的情報

矩形スリットの積分は、 x,y 面内での積分次数を揃えた、Gauss-Legendre 法の方が優良格子点法よりも効率が良い様だ。

全立体角にわたり積分して二重微分断面積に変換する時の積分は、方位角方向は台形公式を用いる。極角方向には前方と後方とで断面積の値が大きく異なろうから、適応的に積分区間を分割しながら Gauss-Legendre 法を使用するのが良いだろう。

積分点の決定

スリットの中心が (θ_d, ϕ_d) にある時、このスリット上に、積分法と次数で決まる、標本点を取り、ここでの関数値を計算する必要がある。この標本点の座標を具体的に書き下すのに、以下の手法を採用する。長方形のスリットを想定し、矩形スリットの図を出発点とする。 z 軸上に先ずスリットを置き、このスリットを y 軸や z 軸を回転軸とする回転により実験時に設定する角度に移す。円形スリットの位置は二つの回転角で指定できるが、矩形のスリットの辺 (slit jaw) は散乱面に平行又は垂直である必要は無いので、3 個の角度を与える必要がある。

以下の 3 回の手続きに従う。

1) z 軸の回りの α の回転。

回転対称性が無い矩形スリットの場合には z 軸の回りに、角度 α だけ回転する。通常は、散乱面 $k_i \times k_1$ に直交する面、に slit jaw を平行にするだろうから $\alpha = 0$ とすると思う。

2) θ の回転 xz 面内で θ だけ回転する

3) z 軸を回転軸とする ϕ の回転

デカルト座標系では、以下の行列で実現できる。

$$\begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.180)$$

上記 3 組の回転をこの順番で行い、目的の位置にスリットを置く。

計算では、初期位置におけるスリット上での点を取り上げ、この点にこの 3 回の回転を施して、実際の標本点 (即ち、数値計算をする際に、三重微分断面積の数値を計算する散乱角度) とする。

現状では、 F_{12} に登場する δ_l は、hctak の出力する位相のずれを利用している。遠心力ポテンシャル障壁と相対運動エネルギーの大小関係が逆転するエネルギーや共鳴点付近では位相のずれが、 k と共に大きく変化する。この大きな k 依存性を 3 次スプラインで乗り切れているか？

逆運動学を用いた計算では、終状態の状態密度に問題があると思われる。二重微分断面積の計算では、粒子 2 の全立体角にわたって、三重微分断面積を積分する。この途中で、終状態の状態密度が発散する (このメモの (2.162) の分母が 0 になる) とお手上げである。この式を分母を $\mathbf{p}_2 \cdot (\mathbf{m}_3 \mathbf{p}_2 - \mathbf{m}_2 \mathbf{p}_3) / p_2^2$ と変形してみると、気が付きやすいだろう。

計算の流れ

trix.f は最初に GETS2T を呼び、ここでかなりの準備作業をする。hctak からの S 行列表ファイル、通常は hctksmat という名前、からの全情報を読み込み、以下の配列に整理格納する。

CF12 添字は、 $(k(lI))$ 即ち N_{12} 個の要素を持つ、1 次元の複素配列。内容は

$$CF12(k(lI)) = i \frac{(2\pi)^3 \hbar^2}{\sqrt{2} \mu_R k} e^{i(\delta_l + \sigma_l)} \quad (2.181)$$

ここで、添字は、(1-2) 系の全ての独立な状態 (波動関数) にわたる。

ここで導入された記号 $(k(lI))$ の意味。

無駄に配列を使用しないために、独立な要素を 1 次元的に並べて使用する。 (lI) は、1-2 系のスピンを l, I をひっくるめて指定する記号である。このスピン状態の下部構造として、散乱状態の波数 k がある。離散化されたこの波数の数は、スピン状態に依存しても良い。この波数とスピンという 2 種類のパラメータを一纏めにして、1 次元配列として利用している事を示すのに、 $(k(lI))$ という記号を導入した。先に書いた記号が先に変化する。後では、三個のパラメータを一次元化した記号も導入される。

一般的に言えば、1-2 系の内部運動の波数 k と 1+2 系の重心の運動に対する波数 K は区別しなければならない。しかし、エネルギー保存則を通じて両波数は 1 対 1 の関係があるので、数値計算の識別記号としては、一方のみを指定すれば充分である。そこで、 k を採用する。

FKS 1-2 系相対運動の波数表。上の CF12 の添字と同じ添字を持つ 1 次元実配列。

CT 添字は、 $(k(L(lI)), 2, M_0, J)$ の 4 次元複素配列。第 1 添字は、hctak の coupled channel base に対応する。ここでは、 $k = 0$ に対する拡張がなされている。第 2 添字は、3 次スプラインを用いた内挿に使用される。第 3 添字は入射粒子のスピンの z 成分 (入

射粒子の進行方向！)、第4添字は全系の角運動量 J に対応する。以下の量を保存している。

$$CT(k(L(lI)), M_0, J) = \sum_{L_0} e^{i(\sigma_{L_0} + \sigma_L)} \sqrt{2L_0 + 1} \langle I_0 M_0 L_0 0 | J M_0 \rangle \times S_{k(L(lI)), L_0}^{J\pi} CF12(k(lI)) \quad (2.182)$$

hctak 中では、波数による離散化を行っているので、この式の $k(L(lI))$ は離散化されている。任意の相対波数 k の CT を計算するには、内挿法による。

FKL 内挿に用いる波数表。上の CT の第1添字の内、 $(k(lI))$ という変数内容の1次元実配列。この配列の名前には大文字の L が使用されているが、中身は k 、即ち 1-2 系の相対運動波数である。

GS 添字 (m_1, m_s, s) を持つ3次元実配列。以下の Clebsch-Gordan 係数を保持する。

$$GS(m_1, m_s, s) = \langle s_1 m_1 s_2 m_2 | s m_s \rangle \quad (2.183)$$

G12 添字 $(M_I(lI), m_s, s)$ を持つ3次元実配列。以下の Clebsch-Gordan 係数を保持する。

$$G12(M_I(lI), m_s, s) = (-)^{l+s-I} \langle s m_s l m_l | I M_I \rangle \quad (2.184)$$

$$\times \hat{j} \hat{s} (-)^{l+I+s_1+s_2} \left\{ \begin{matrix} l & s_1 & j \\ s_2 & I & s \end{matrix} \right\} \quad (2.185)$$

但し LS 結合ならば、上の式の2行目 (\times 以降) は1とする。磁気量子数と配列内での CG 計数の並べ方の関係で、角運動量の順番を変えている。

G3 添字 $((M_L(L(lI)), M_0, J))$ を持つ3次元実配列。以下の Clebsch-Gordan 係数を保持する。

$$G3(M_L(L(lI)), M_0, J) = \langle I M_I L M_L | J M_0 \rangle \quad (2.186)$$

これで、最初の準備段階は終了。

次に個別の散乱角 Ω_1, Ω_2 及び粒子1の運動エネルギー E_1 を与えて、T 行列を m_1, m_2, M_0 に対して計算する。

準備 粒子の検出方向に依存しない幾らかのパラメータを計算する。

準備 実験室系での粒子1と2の運動量 p_1, p_2 を重心系での波数と方向 k_c, K_c に変換する。

内挿 hctak は離散化された波数に対してのみ S 行列を計算している。この離散化された波数に対する S 行列から、実際の実験に対応する波数での S 行列の値を内挿するのに、3次スプラインを利用する。

CT に対して内挿を行い、 $CT \rightarrow CL(\underset{192}{L}(lI), M_0, J)$ を作る。

球面調和関数の計算 $Y_{lm_l}(\theta_{k_c}, 0)$ 及び $Y_{LM_L}(\theta_{K_c}, 0)$ を計算する。磁気量子数に対応するために $e^{i\phi_{k_c}}, e^{i\phi_{K_c}}$ も計算しておく。

足し込 各 (lI) に対して以下の計算をしておく。

$$CLY((lI), M_0) = \sum_{LJ} CT(L(lI), J, M_0) \sum_{M_L} \langle I M_I L M_L | J M_0 \rangle Y_{LM_L} \quad (2.187)$$

$$CSY((lI), m_s, s) = CS(lI) \sum_{m_l} \langle l m_l s m_s | I M_I \rangle Y_{lm_l} \quad (2.188)$$

その後、 (lI) について加える。

$$T_{m_1, m_2; M_0}(\mathbf{k}_c, \mathbf{K}_c) = \sum_{(lI)} CLY((lI), M_0) \times \sum_s CSY((lI), m_s, s) \times GS(m_1, m_s, s)$$

$m_s = m_1 + m_2$ だから、 m_1, m_2 を与えると m_s の値は確定している。

部分断面積 式 (2.162) により終状態の状態密度を計算し、式 (2.161) により、偏極ビームを用い、検出粒子も偏極している場合の "部分断面積" を計算する。

$$\frac{d^3\sigma_{m_1, m_2; M_0}}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\mu_R}{P_0} |T_{m_1, m_2; M_0}(\mathbf{k}_c, \mathbf{K}_c)|^2 \rho(E_b^L)$$

運動学のところで述べた様に、実験室系での運動量 $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ を与える実験室系での波数 (\mathbf{k}, \mathbf{K}) の組合せは一つの場合と二つの場合がある。二つの場合には、(重心系で見て干渉しないのだから) 実験室系でも微分断面積を計算した後で加える。座標系に対する仮定があるから、 $|T_{m_1, m_2; M_0}|^2$ の内には独立でないものが含まれている。

平均 無偏極ビームを用い、偏極検出をしない場合への変換を行う。

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = \frac{1}{2I_0 + 1} \sum_{m_1 m_2 M_0} \frac{d^3\sigma_{m_1, m_2; M_0}}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1}$$

二重微分断面積 三重微分断面積は二つの検出器による同時計数を想定している。ある場合には、一方の検出器だけのエネルギースペクトルを計算したい。この場合粒子 2 を検出しないのだから、そのスピン方向に関して和を取っておく。従って、以下の様な計算をする必要が生ずる。

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_1 dE_1} = \int d\Omega_2 \sum_{m_2} \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1}$$

この断面積を二重微分断面積と呼ぶ。

角度平均 もしも三重微分断面積の角度依存性が大きく、粒子 1 や 2 を検出する検出器の開口角が大きければ、この検出器が張る立体角についての角度平均をせねばならない。粒子 1 の検出器だけに対して立体角平均をする場合は、次の様にする。

$$\langle \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} \rangle_{det1} = \int_{det1} d\Omega_1 \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} / \int_{det1} d\Omega_1 \quad (2.189)$$

当然、二つの検出器の張る立体角に対して積分 (4 重積分) を実行する必要に迫られる場合もある。

現実的な要求としては、ある程度の大きさの検出器 1 で二重微分断面積を測定し、エネルギースペクトルを調べる場合がある。

運動量依存性 三重微分断面積の独立変数として、粒子 1 の運動エネルギーでなく、運動量をとる場合がある。

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dp_1} = \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} \times \frac{dE_1}{dp_1} \quad (2.190)$$

であるから、三重微分断面積に粒子 1 の速度 v_1 を掛けておけばよい。

個別プログラム単位の機能

DEFFND 基本的な定数を定義する。

GETS2T ほとんどの入力パラメータを読み込み、後の計算に使う以下の数表を定義している。引数 SFILE は、hctak の出力する S 行列ファイルのファイル名である。

粒子 1、2、3 の基本定数と入射エネルギー 下請けプログラム NUCSPE を呼び、TITLE の内容を解読して、原子番号 (IZ)、質量数 (IA)、スピンの 2 倍 (IS)、パリティ (JP)、原子質量単位での原子核質量 (EM) と入射粒子のエネルギー (ELAB) を確定する。

必要に応じ、粒子 1 と 2 の入れ換えも行う。

(1-2) 系パラメータの確定 SFILE の中身を利用し、各スピン状態に対し以下の表を定義する。

波数 (FKS)、クーロンパラメータ (ETA)、位相のずれ (DELS)、 F_{12} (CF12)、各スピンに対するポインター (IDS, IDT)

粒子 3 のパラメータ 結合表 (KCTAB)、S 行列 (STAB)、S 行列に CG 係数と位相のずれを掛けた表 (CT) とその二階微分

各種幾何学係数 GS (GS)、 $G12$ (G12)、 $G3$ (G3)

これらの表を利用するための、各種定数も定義している。その多くは COM module に登録されている。

CPHAS クーロン散乱の位相のずれの表を返す。

$ESIG(l) = \exp i\sigma_l$ 。ここで、 l は 0 から、LMAX 迄変化し、 $ETA = \eta$ はクーロンパラメータである。

YLMTAB 方位角が 0 の場合の球面調和関数の表 YLM を返す。

$$Y_{lm}(\theta 0) = (-)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_{l|m|}(\cos \theta) \quad (2.191)$$

であり、 $P_{l|m|}(\cos \theta)$ は通常の Legendre 陪関数である。

この副プログラムでは、 $m \leq 0$ の場合だけを取り扱っている。この場合には、式 (2.191) の右辺の位相は 1 になる。 $m > 0$ の場合には m が奇数ならば符号を変えておかなければならない。

引数は、 $THETA = \theta$ 、LMAX は l の最大値、MMAX は $|m|$ の最大値 である。YLM は二次元の実配列であり、第 1 添字は $l = 0$ から LMAX、第 2 添字は $|m| = 0$ から $|m| = \text{MMAX}$ 迄の値をとる。

VCCM3 Clebsch-Gordan 係数の表 $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle$ を VCTAB に返す。引数 J1, J2, J3, M3 は CG 係数のパラメータを 2 倍にした整数である。引数 NV は、実の 1 次元配列 VCTAB に許される最大の大きさを与える。VCTAB(1) に $m_1 = -j_1$ 、(2) には $m_1 = -j_1 + 1$ という様に m_1 の小さな値から順番に $m_1 = j_1$ 迄である。物理的に許されない m_1 に対応する位置には 0 が書き込まれている。

SJTAB $6j$ 係数の表を 1 次元実配列に返す。ここで、

$$SJ(n) = \left\{ \begin{array}{ccc} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & \lambda \end{array} \right\} \quad (2.192)$$

とする。物理的な λ の最小値を λ_{min} とすると、 $n = 1$ には λ_{min} 、 $n = 2$ には $\lambda_{min} + 1$ という順に λ として物理的に許される最大値迄が、引数 SJ に書き込まれる。

引数の意味： J1, J2, J3, L1, L2 が夫々、式 (2.192) の対応する変数の 2 倍の整数であり、NS は 配列 SJ の大きさを与える。

CSPL0 実変数の複素関数に対する 3 次スプラインの準備をする。

引数の意味：N は (節点の数 - 1)、X は実の 1 次元配列であり (X(0:N))、独立変数の表である。CY(0:N), CZ(0:N) は複素変数の 1 次元配列である。(X,CY) の組で節点を与え、CZ は節点での (二階微分)/ 6 の表。

CSPL3 複素変数の配列 CT、独立変数の配列 FKL、実際は k 、を用いて $k = \text{FKSC}$ に対する内挿値を複素 3 次元配列 CL に返す。

TRIX0 三重微分断面積計算の全てに共通する各種変数の値を定義する。その多くは TRIX module に登場する。

特に粒子 1 の取り得るエネルギーと運動量の表 E1TAB, P1TAB を定義する。

TRIX1 最も単純な場合の三重微分断面積を計算する為の制御プログラム。引数の YLM は作業用配列。TRIX2 を下請けに使う。

三重微分断面積を 4 次元実配列 TX に返す。

TRIX2 実際に、粒子 1 の運動量 p_1 を与えて三重微分断面積を計算する為の制御プログラム。

引数の意味：XWGT 三重微分断面積に掛ける因子。1 ならば、普通の意味での三重微分断面積が TX に返される。CSPL3, CLYDEF, CSYDEF, TMZSQ を下請けに使う。

hctak が与えていない k の値に対しては、エラー文を出力する事も可能である。

CLYDEF このマニュアルの式 (2.187) の和を実際に計算して、複素二次元配列 CLY に返す。

引数の意味：PL, AL 極角と方位角。YLM は作業用の 2 次元実配列。球面調和関数の計算に使用される。

下請けとして、YLMTAB 副プログラムを使用する。

CSYDEF このマニュアルの式 (2.188) の和を実際に計算して、複素 3 次元配列 CSY に返す。

引数の意味：K1 = 1 ならば、粒子 1 と 2 の入れ換えに対する符号の処理をする。PS, AS 極角と方位角。YLM は作業用の 2 次元実配列。球面調和関数の計算に使用される。

下請けとして、YLMTAB 副プログラムを使用する。

TMZSQ このマニュアルの式 (2.9) の和を実際に計算して、実 3 次元配列 TSQ に返す。

PRNTX 三重微分断面積の計算結果を出力する。

SROT 与えられたスリットを、z 軸上から実際の位置へ移す回転行列を返す。

引数の意味：RANG は 1 次元の実配列であり、入力変数 ANG(?,i) の $i=1$ 又は 2 に対する角度をラジアン単位で保持する。これらの角度は式 (2.180) に登場する α, θ, ϕ である。

RR は 2 次元の実行列であり、回転行列を保持している。

SROT と ROTATE 副プログラムは対で動作し、スリット上で三重微分断面積を計算する場合や、二重微分断面積を計算する場合に使用される。

ROTATE スリット上の点を与える角度 $\theta_i, \phi_i, i = 1 \text{ or } 2$) に対して回転を施して、粒子 i の散乱角を得る必要がある。計算に必要なのは、角度ではなくその正弦や余弦である。

引数の意味：I により粒子を指定し、CT、ST、CP、SP は極角と方位角の余弦と正弦である。これらは、入力の際には回転前の値であり、出力されるのは回転後の値である。

TXAV2Q, TXAV2G Quasi Monte Carlo 法 又は Gauss-Legendr 法を用いて、三重微分断面積を一つのスリットが張る立体角にわたり平均する。

引数の意味：YLM は作業領域であり、実際の平均された三重微分断面積は 4 次元実配列 TX に返される。

TXAV4 Quasi Monte Carlo 法を用いて、三重微分断面積を二つのスリットが張る立体角にわたり平均する。

引数の意味：YLM は作業領域であり、実際の平均された三重微分断面積は 4 次元実配列 TX に返される。

DDXQMC, DDXGT 二重微分断面積 $\frac{d^2\sigma}{d\Omega_1 dE_1}$ を計算する副プログラム。

引数 YLM は作業領域である。

DDAQMC は Quasi Monte Carlo 法を使用し、下請けに FIBINT と SRFINT 副プログラムを使っている。FIBINT で粒子 2 の全立体角にわたり大雑把に面積分を行い、次に SRFINT を使いながら適応的に精度を上げた計算をする。

簡単な場合には、FIBINT だけでもそれなりの値を返す様だ。

一方、DDXGT は極角 θ_2 方向には Gauss-Legendre の公式、方位角 ϕ_2 方向には台形公式を使用して面積分を実行する。但し、三重微分断面面積は極角方向には変化が激しいと考えて、最初に 副プログラム T2RANG を用いて、取り得る θ_2 の範囲を複数の区間に細分する。その上で、副プログラム TPINT を用いて細分された区間毎に面積分を行う。

FIBINT Fibonacci 数を用いて、全立体角にわたり二次元面積分を行う。

引数の意味：NF0, NF1 ($\text{NF0} < \text{NF1}$) は相続く二つの Fibonacci 数であり、この数が優良格子点を定義する。NF0 は入力 NFBMX よりも大きく取られる。

Q は積分結果を判定する一つの数であり、ここでは、スピンの量子化軸成分毎の和を採用している。

DBLX には、二重微分断面面積が返される。但し、粒子 2 のスピンおよび量子化軸成分の和がとられている (縮約されている)。

YLM は作業用領域である。

SRFINT 単位球面上のある部分での面積分を行う。

引数の意味：IX, IY は、上記「ある部分」を指定する。例えば x 方向は全区間が $[0, \pi]$ だとし、この区間を $2^{L_{pow}+1}$ に等分し、左から $2IX + 1$ で今回の積分区間を指定する。

Q は積分結果を代表する指標の数字。この数字を比較しながら収束したか否かを判断する。

DBLX 二重微分断面面積の計算値が返される。

DDXING 二重微分断面面積を粒子 1 のスリット上で面積分する。これは、粒子 1 のみを有限の立体角を持つ検出器でエネルギー (運動量) スペクトルを測定する実験に相当する。

引数は YLM のみであり、これは作業用の配列。

DDXGT 副プログラムと同じ副プログラムを下請けとして、二重微分断面面積を計算する。

T2RANG 粒子 1 の検出方向を固定し、粒子 2 の極角を 0 から 迄変化させて、三重微分断面面積の θ_2 依存性を調べる。断面面積のピーク付近の角度を中心とし、両側へある

割合 (多分最初は $1/2$ 、後は $1/4$) ずつ減少する角度を大雑把に調べ、T2TAB に返す。

引数の意味: ID0, ID1 は、角度 θ_2 を与える配列 T2TAB の内、積分すべき範囲を指定する二つのポインター。

T2TAB は一次元実配列であり、 θ_2 の値が小さい方から順番に入っている。0 度から三重微分断面積を計算した順番に角度を書き込んでいるが、積分範囲と指定するためには、これを圧縮する必要がある。そこで、積分範囲のポインターが必要となる。

EPSI は収束判定に利用する小さな数。入力される値 EPS と三重微分断面積のピーク値、そのピーク値を持つ角度範囲から判断される。

TPINT 三重微分断面積をある範囲で面積分する。

引数の意味: T0, T1 は 粒子 2 の極角の範囲を指定する。

EPSI は収束判定し使用する小さな数。 T2RANG で決定される。

DDX には積分された二重微分断面積が返される。

GLCAL Gauss-Legendre 積分公式のための座標値と荷重の表が XL, WL に返される。

引数の意味: NMAX は最大の次数をあたえる。即ち 1 から NMAX 次迄の全ての座標値と荷重が返される。

XL, WL は 1 次元実配列であり、座標値と荷重が切れ目なく書き込まれている。

ここで、計算の流れで登場しなかった変数の意味を簡単に記録しておく。

YL0 実作業領域

LS, JS, II 1-2 系の相対運動軌道角運動量 l 、チャンネルスピン s 又は $j(l+s)$ 、1+2 系のスピン I

IPLK 配列 FKL の中で、異なる (II) に対する波数の先頭番地を保存する NLSJ 個のポインター。

AMU, COU, HBARC, PI 夫々、 $m_u c^2$, $e^2/(4\pi\epsilon_0)$, $\hbar c \pi$ を保持する。

EM,IA,IS,JP,IZ 粒子 1、2、3 の以下のパラメータを保持する。質量 (u)、質量数スピンの 2 倍、パリティ、原子番号。

FK0 重心系での (1+2)-3 相対運動の波数。

FKL 1-2 系の相対運動波数を保持する NKJK 個の実配列

IS1,IS2,II0,NS0 粒子 1、2 (1+2) のスピンの 2 倍 及び (II0+1)。

ISN,ISX チャンネルスピン s の最大値と最小値の 2 倍。ISJJ=0 ならば、JS の値である。

JTMIN,JTMAX,JMNX (1+2)-3 系の全角運動量の最小値、最大値の 2 倍。及びこの取り得る値の数。JMNX=(JTMAX-JTMIN)/2+1。

LMAX,MLMAX,LSMAX,MSMAX (1+2)-3 系の軌道角運動量 L とその量子化軸成分 M_L の最大値、(1-2) 系の相対運動軌道角運動量 l 及びその量子化軸成分 m_l 。

NIS,MIS チャンネルスピン s の個数と m_s の取り得る値の個数。

LNJI,NLSJ $L(lI), (lI)$ の数。

ANG1,ANG2 粒子 1 と 2 の放出角度。ANG1(1) は極角、ANG1(2) は方位角。単位は度。円形スリットならば、ANG?(3) は半頂角。矩形スリットならば、ANG?(3) と ANG?(4) はスリットの半角。ANG?(5) はスリットの捻り角。

E1MN,E1MX,E1TAB E_1 の最小値、最大値及び全ての値の表 [MeV]。

ELAB 粒子 (1+2) の入射時の運動エネルギー [MeV]。

A2,C20 式 (2.22) に登場する A_2 及び C_2 の先頭の 2 項。

EMC1W,EMC2W,EMC3W $m_1 c^2, m_2 c^2, m_3 c^2$ の 2 倍。

EMC3WI,EMC12I,EMCSWI $1/\text{EMC3WI}, 1/(2 \times m_{12}), 1/(2 \times (m_1 + m_2 + m_3) c^2)$

PIC 入射粒子の運動量 [MeV]

PLRZ0 P_R の値 (2.7) の右辺の第 3 項 [MeV]

QVAL 1-2 系束縛エネルギー [MeV]

RAD $\pi/180$

TX 三重微分断面積 (偏極ビームに対するもの) を保持する配列

XFAC0 三重微分断面積への変換に必要な角度非依存因子

KTRL(10) 計算の制御変数を保持する。

2.10 pickff, picks プログラム

pickff プログラムは、hctak.out から、 $V_{13} + V_{23}$ の 1-2 系波動関数を用いての行列要素 $\langle \hat{u}_f | (V_{13} + V_{23})_\lambda | \hat{u}_i \rangle$ の内、特定のものを抜き出す目的で書かれた。

入出力ファイル名は pickff.in, pickff.out であり、論理機番は 5 と 6 である。更に、hctak.out に対応するファイルを FNAMFF、²⁰⁰ 論理機番 7 で利用する。

入力仕様

カード 0 桁表示の為の文字列

他のプログラムでも多用したように、 1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 と第 1 桁から詰めて書いておく。後半は自由使用。

カード 1 (KTRL(i),I=1,10),TITLE. FORMAT(10I2,A50)

KTRL は出力の制御に使用する変数。

KTRL(1) 行列要素のケット状態 $|\hat{u}_i\rangle$ を指定する自然数。

KTRL(1)=0 ならば、全ての状態を指定する。

KTRL(1)=-1 ならば、後で個別に状態を指定する。

KTRL(2) 行列要素のブラ状態 $\langle \hat{u}_f|$ を指定する自然数。

KTRL(2)=0 ならば、全ての状態を指定する。

KTRL(2)=-1 ならば、後で個別に状態を指定する。

これらの、自然数は hctak.out に於いて、 quantum numbers of system 1-2 という表示の次に与えられた ID 番号である。KTRL(1) 又は KTRL(2)=0 ならば、全ての状態を指定する。

KTRL(3) 多重極展開の次数 λ の最小値を与える。

KTRL(4) 多重極展開の次数 λ の最大値を与える。

KTRL(5) 実部か虚部かを選択する。KTRL(5)=1(2) ならば実(虚)部、=3 ならば双方を出力する。

KTRL(6) = 1 ならば対角要素のみ、= 2 ならば非対角要素のみを出力する。0 ならば、対角・非対角要素の区別はしない。

KTRL(7-8) 当面、使用していない。

KTRL(9) 0 以外ならば、FFID 表を出力しない。

KTRL(10) 0 以外ならば、1-2 系の量子数 表を出力しない。

カード 2 FNANFF, FORMAT(A20)

hctak の標準出力ファイル名。このファイルから行列要素等に関する情報を読み取る。hctak の出力をそのまま保存していなければならない。

カード 3 NCH, (IDI(i),i=1,NCH)

KTRL(1) 又は KTRL(2)=-1 の時に読み込まれる。

カード 4 NCH, (IDI(i),i=1,NCH)

KTRL(1)= KTRL(2)=-1 の時に読み込まれる.

この 2 枚のカードはもしも、KTRL(1), KTRL(2) の一方のみが -1 ならば、カード 2 のみ、双方が -1 ならば 2 枚のカードの前 (後) 半が $|\hat{u}_i\rangle$, ($\langle \hat{u}_f|$) を指定する。

IDI の中身は必ず、値が小さい識別番号が、大きな値の識別番号よりも先に来るべきである。

入力例

```
1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 test stage
0 0 0 3 3 0 0 0 0 0 you can write title here
hctak.out          / file nams(A20) of hctak output file
```

KTRL(1): particle 1 ID

KTRL(2): particle 2 ID

KTRL(3): lambda min.

KTRL(4): lambda max.

KTRL(5): real/imag

この例では、KTRL(1)=KTRL(2)=0 だから、全ての組合せに対する行列要素を出力している。

KTRL(3)=0, KTRL(4)=3 だから、 $\lambda = 0 \rightarrow 3$ に対する行列要素が出力対象である。この時、ブラとケットの入れ換えに対して、同じ行列要素を 2 度出力しないようにするために、ISPF という旗を導入する必要があった。

KTRL(5)=3 だから、実部も虚部も出力する。

解説

このプログラムは、行列要素に関する 1-2 系の量子数の表 ID E[MeV] k[/fm] Eta N を全て、記憶域に E12, FK12, ETA12, NOD, LS12, IS12, J12, DELTA という配列名で読み込んでいる。但し、散乱状態の節の数は 0 としている。このデータ数は N12 である。

更に、この ID の組み合わせに対する行列要素の対応表、hctak.out では HCTK20:matrix reference という見出しで出力されている、N1 N2 ID Lammin max FFID の表を以下の配列に読み込んでいる。最初の 3 項は NTAB(?,1), NTAB(?,2), NTAB(?,3) 次の 次数の最小・最大値は LAMTAB(?,1), LAMTAB(?,2) に、最後の 個別の波動関数の組合せに対応する行列要素の先頭番地は IDFF(?) に読み込んでいる。

ここで ? は 1 から、 $N12 \times (N12+1)/2$ 迄の識別番号である。

最後に、RTAB(?), FFTAB(?,*) に全ての R と 行列要素の表が読み込まれている。ここで、? は 0 から NRFF 迄、* は 1 から NFF 迄の値をとる。

その他のモジュール変数

PUTF 実際に印刷すべき、行列要素を一次的に保持しておく、2次元実配列。一回に最大5個の行列要素が出力される。

IDCC 出力されるべき行列要素のブラ及びケットに対応する、個別の波動関数の識別番号を保持する2次元整数配列

ISPF 既に出たかどうかを記す旗。

副プログラムの機能

GET12 hctak の出力ファイル、FNAMFF、 から必要な情報を読み出す。

SETCC KTRL データ を基にして、出力すべき行列要素のパラメータを設定する。

SETFF 実際に出力すべき、行列要素を FFTAB から抜きだし、PUTF へ移す

PUTFF PUTF 配列に書き込まれた行列要素を、ファイルへ出力する。

解説

このプログラムは、行列要素に関する 1-2 系の量子数の表 ID E[MeV] k[/fm] Eta N を全て、記憶域に E12, FK12, ETA12, NOD, LS12, IS12, J12, DELTA という配列名で読み込んでいる。但し、散乱状態の節の数は 0 としている。このデータ数は N12 である。

更に、この ID の組み合わせに対する行列要素の対応表、hctak.out では HCTK20:matrix reference という見出しで出力されている、 N1 N2 ID Lammin max FFID の表を以下の配列に読み込んでいる。最初の 3 項は NTAB(? ,1), NTAB(? ,2), NTAB(? ,3) 次の 次数の最小・最大値は LAMTAB(? ,1), LAMTAB(? ,2) に、最後の 個別の波動関数の組合せに対応する行列要素の先頭番地は IDFF(?) に読み込んでいる。

ここで ? は 1 から、 $N12 \times (N12 + 1) / 2$ 迄の識別番号である。

最後に、RTAB(?), FFTAB(?,*) に全ての R と 行列要素の表が読み込まれている。ここで、? は 0 から NRFF 迄、* は 1 から NFF 迄の値をとる。

その他のモジュール変数

PUTF 実際に印刷すべき、行列要素を一次的に保持しておく、2次元実配列。一回に最大5個の行列要素が出力される。

IDCC 出力されるべき行列要素のブラ及びケットに対応する、個別の波動関数の識別番号を保持する 2 次元整数配列

ISPF 既に出力されたかどうかを記す旗。

副プログラムの機能

GET12 hctak の出力ファイル、FNAMFF、 から必要な情報を読み出す。

SETCC KTRL データ を基にして、出力すべき行列要素のパラメータを設定する。

SETFF 実際に出力すべき、行列要素を FFTAB から抜きだし、PUTF へ移す

PUTFF PUTF 配列に書き込まれた行列要素を、ファイルへ出力する。

2.11 picks

picks プログラムは、hctak が出力する S 行列ファイル (hctksmat) から、特定の成分だけを取り出す事を目的とする。

入出力ファイル名は picks.in, picks.out であり、論理機番は 5 と 6 である。更に、hctksmat に対応するファイル を FNAMS、論理機番 7 で利用する。

入力仕様

第 0 組 桁表示の為の文字列

他のプログラムでも多用したように、 1 2 3 4 5 6 7 8 9 0 と第 1 桁から詰めて書いておく。後半は自由使用。

第 1 組 取り出すべき S 行列要素の量子数をしていする。

1-1: (KTRL(i),I=1,10),TITLE FORMAT(10I2,A50)

KTRL は出力の制御に使用する変数。

KTRL(1) 弾性散乱 S 行列要素を出力する。

KTRL(1)=1 ならば、 $J = L_{in} = L_{out}$ という対角成分を出力する。

KTRL(1)=2 ならば、 $L_{in} \pm 2 = L_{out}$ という非対角成分を出力する。

KTRL(1)=4 ならば、 $L_{in} \pm 4 = L_{out}$ という非対角成分を出力する。

KTRL(2)–KTRL(5) では、S 行列要素を ファイルから取り出して出力すべき状態に対する識別情報を指定する。

従って、KTRL(1) が指定されているならば、以下の (1-2) から 1-6 で指定された入力は不要。

KTRL(2) 1-2 系のスピン状態の数。

KTRL(3) 入射チャンネルの軌道角運動量の数

この入力方に関しては、この後の注を参照の事。

KTRL(6-8) 当面、使用していない。

KTRL(9) 0 以外ならば、((1+2)-3) 系の量子数表を出力しない。

KTRL(10) 0 以外ならば、1-2 系の量子数 表を出力しない。

第 2 組 hctak の標準出力ファイル名。このファイルから行列要素等に関する

2 FNANS, FORMAT(A20)

情報を読み取る。hctak の出力をそのまま保存していなければならない。

第 3 組 出力すべき J の 2 倍の最小値、最大値と増分をしめす。

3 JT2N, JT2X, JT2I

KTRL(1) が 0 でないならば、分解チャンネルを想定して、S 行列要素を取り出すべき 1-2 系の量子数を指定するパラメータを指定すべき追加入力が来る。

4-1 (NSTB(i), i=1,KTRL(2))

スピンの $2I_{12}$ の値が KTRL(2) 個を、1 列の中に書いたものが来る。

個別の $2I_{12}$ には独立に 波数ビン (数と幅) が指定されている。従って、取り出すべき S 行列の波数は、個別の スピン毎に指定しなければならない。

4-2 (NKT(i), i=1, KTRL(2))

$2I_{12}$ 毎に、何個の波数ビンを指定するかという項数を並べる。

この後に、一行に NKB(i) 個の特定のスピン状態に於ける、波数ビンに波数の小さい方から順に識別番号を書く。識別番号は、各スピン状態に対して、最小のものを 1 とし昇順に番号付ける。

4-3 (NKTB(j,i), J=1,NKT(i))

この KID は、KTRL(2) 行にわたる。

4-4 (LITB(i), i=1,KTRL(3))

入口チャンネルの軌道角運動量の相対値を指定する。指定方法は、後の注を参照の事。

出口チャネルの軌道角運動量は、波数と同じように $2I_{12}$ 毎に指定する必要がある。

4-5 (NLF(i), i=1,KTRL(2))

1-2 行で指定したスピン状態に対応する順に、指定項数を 1 行に書く。

4-6(LFTB(j,i),j=1,NLF(i))

上で指定した項数分だけ、軌道角運動量の相対値を書く。このデータは、KTRL(2) 行にわたる。

注 軌道角運動量の相対値の定義： 1-2 系のスピン $_{12}$ は半整数の場合もあるので、角運動量は 2 倍して、整数値に変換して取り扱っている。

軌道角運動量 \vec{L} は、 $\vec{J} = \vec{L} + \vec{I}$ で定義される。この軌道角運動量の相対値は、やはり 2 倍するから、 $-2I, -2I + 2, \dots, 2I$ と定義する。これらの値の内から 小さい方から順に KTRL(3) 又は NLF(i) 個の値を指定する。従って、 $NLF(i) \leq 2I+1$ でなければならない。

ある場合には、角運動量とパリティの保存則の制限があるから、S 行列が 0 となる。

入・出力例

```
1 2 3 4 5 6 7 8 9 0! column identifier
0 1 1 0 0 0 0 1 1 place title here
alsmatd /hctksmat file name
0, 50,10 /JT2N, JT2X, JT2I
1 2 3 4 5 /ID table for ktrl(2)
1 2 1 3 1 /NKT table
4 /NKTB(*,1)
-4 -2 0 2 4 /Li table
1 2 0 3 4 /LFT table
0 /LFTB(*,1)
```

ここで、NKT、LFT への入力は消し忘れがある。今の場合 KTRL(2)=KTRL(3)=1 と書き直したから、NKTB, LFTB 行の先頭の数値 4 と 0 のみが読み込まれる。

次は出力例

picks program 2009/12/05

```
Title= place title here
1 2 3 4 5 6 7 8 9 0
```

```
KTRL= 0 1 1 0 0 0 0 0 1 1  Smat file=alsmatd
```

```
JTmin  JT2N JTinc  JT2I JTmax  JT2X  JT2I  NCC  KCC
      0    0    2   10 10000   50   10  505  303
```

この上の出力は、S 行列ファイルの頭の部分を読み込んだあとで書いている。
入力値と実際のファイル内容を比較して、\$2J\$ の範囲を JT2N, JT2X, JT2I
と再定義している。NCC, KCC は結合する全チャンネル数と (J, パリティー) を
与えた時に結合するチャンネル数の最大値。

次の行は、出力チャンネル情報。

```
K2= 1, K3= 1, Li= -4
```

```
N= 1  2*I= 4  Nk= 1  NLf= 1
```

```
K= 1  k=  0.2517 /fm
```

```
Lf=  0
```

次は、出力すべき CC チャンネルの表。今の場合は一つだけ。

```
Smat. pointer table
```

```
I K=  1  1  KCP(M,K,I)=  46
```

指定されたチャンネルの S 行列の実際の出力。

```
#SpinID= 1  k_ID= 1  Lin_ID= 1  Lf_ID= 1  IDS=  1
```

#	J	Re(Smat)	Im(Smat)	S	Arg(S)
0	0	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00	0.00000E+00
10	1	1.79410E-05	-5.91480E-05	6.18091E-05	-1.27629E+00
20	2	-4.93530E-05	7.74070E-06	4.99564E-05	2.98602E+00
30	3	-1.73120E-05	4.47100E-05	4.79446E-05	1.94023E+00
40	4	2.44600E-05	5.18260E-05	5.73082E-05	1.12983E+00
50	5	7.33700E-05	1.94070E-05	7.58933E-05	2.58587E-01

上の例は、分解チャンネルの S 行列を出力した場合。次の例は、弾性散乱 S 行列を出力
した場合。

picks program 2009/12/05

```
Title=  place title here
```

```
  1 2 3 4 5 6 7 8 9 0
```

```
KTRL= 2 1 1 0 0 0 0 0 1 1  Smat file=alsmatd
```

ここで、KTRL(1)=2 であるから、KTRL(2), KTRL(3) は0としておかなばならない。

```

      JTmin  JT2N JTinc  JT2I JTmax  JT2X  JT2I  NCC  KCC
        0    0    2    10 10000    50    10   505   303
#      el. S mat.for 2*Li=2*Lf=2*J-4
# 2*J      Re(S)      Im(S)      |S|      Arg(S)
    0  0.00000E+00  0.00000E+00  0.00000E+00  0.00000E+00
   10  1.10910E-02  5.33980E-03  1.23095E-02  4.48701E-01
   20 -6.71740E-03 -1.07010E-02  1.26347E-02 -2.13136E+00
   30 -1.13770E-02  6.70200E-03  1.32043E-02  2.60924E+00
   40  2.68060E-03  1.37630E-02  1.40216E-02  1.37844E+00
   50  1.46320E-02  3.84520E-03  1.51288E-02  2.56983E-01

#      el. S mat.for 2*Li=2*Lf=2*J-2
# 2*J      Re(S)      Im(S)      |S|      Arg(S)
    0  0.00000E+00  0.00000E+00  0.00000E+00  0.00000E+00
   10  1.15710E-02 -5.69490E-03  1.28965E-02 -4.57364E-01
   * * * * *
KTRL(1)=2  だから、この形式の出力が続く。
   * * * * *
   40  1.32870E-03 -9.67990E-04  1.32870E-03 -9.67990E-04
   50 -8.36340E-05 -1.30250E-03 -8.36340E-05 -1.30250E-03

```

最後に、KTRL(1)=2 なのに、KTRL(2)=KTRL(3)=1 だから、エラーとなる。

K2= 1, K3= 1, Li= 0

```

      Smat. pointer table
BUSMT: JT and JT2=      0    52  JP and Jpar=  1  1 ???

```

弾性散乱 S 行列を出力したあとで、alsmatd ファイルを REWIND しもう一度、GETS0 を呼ぶ様に改造すれば、弾性散乱と分解チャンネルの S 行列を同時に出力する事ができる。

picks プログラムのメモ

GETS0 副プログラムは、hctksmat の内の先頭部分、量子数に関する部分を読み込んでいる。

GSSMT 副プログラムは、S 行列要素を順次読み込み、弾性散乱に係する部分を、ELS 配列に書き込む。ELS 配列の第 1 添字は実部と虚部であり、第 2 添字は入射・散乱波の軌道角運動量を表し、第 3 添字は J を表す。第 2 添字の動き方は以下の様になっている。入射粒子のスピン I が 2 の場合を例示する。

$L_f \backslash L_i$	$J - 2$	$J - 1$	J	$J + 1$	$J + 2$
$J - 2$	1	-	6	-	11
$J - 1$	-	4	-	9	-
J	2	-	7	-	12
$J + 1$	-	5	-	10	-
$J + 2$	3	-	8	-	13

従って、対角要素 $L_i = L_f$ を出力したいならば、1, 4, 7, 10, 13 番目の要素を書き出す。

S 行列には reciprocity があるから、弾性散乱に付いて言うと $S_{L_f L_i}^{J \pi} = S_{L_i L_f}^{J \pi}$ が成立していなければならない。この性質は、数値計算の精度確認手法を与える。

BUSMT 副プログラム

まず、GETTAB 副プログラムを呼出、出力すべきチャンネル指定パラメータを読み込む。

次に、このパラメータを coupled channels の意味でのチャンネル識別番号に変換して 3 次元配列 KCP に書き込む。KCP の第 1 添字は出口チャンネルの軌道角運動量、第 2 添字は分解チャンネルの波数、第 3 添字は 1-2 系スピン識別番号を保持している。入口チャンネルの軌道角運動量情報は KTRL(3) と LITB 配列の値を使用する。

その後、順次 S 行列を SRI 配列に読み込み、SETBUS 副プログラムで出力すべき成分のみを SMT 配列に保存する。

読み込みが終了すると、PUTBUS 副プログラムにて、スピン、波数、入口チャンネル軌道角運動量順に、出口チャンネル毎に、S 行列要素の J 依存性表を出力する。

S 行列の reciprocity に関するメモ

S 行列の reciprocity に関する記述はあまり見掛けないと思うので、このメモを作った。辞書をひくと、reciprocity は相互関係という意味が最初に出て来た。相反性と訳されている場合もあるが、この言葉にはなじめない。どちらかという、対称性と訳す方が良いと思う。

複数のチャンネルが影響しあう、coupled channels、次の散乱に関する方程式を認める。

$$\frac{d^2 u_i}{dr^2} = \sum_j V_{ij} u_j \quad (2.193)$$

ここで、 V_{ij} は、波数の2乗、遠心力ポテンシャル等も含み、 $V_{ij} = V_{ji}$ という対称性をもつ。この方程式の、チャンネル n のみに入射波を持つ解の第 i 成分を u_{in} と書く。この u_{in} の境界条件は、以下の通りである。

$$u_{in}(r=0) = 0, \quad u_{in} \rightarrow I_n \delta_{in} - \sqrt{\frac{k_n}{k_i}} S_{in} O_i \quad (2.194)$$

ここで、 k_n, k_i はチャンネル n, i での漸近領域での波数、 I_n, O_n はチャンネル n での内向き・外向きクーロン波動関数である。

以下の作業の目的は、 $S_{mn} = S_{nm}$ という対称性を導く事である。この目的の為に、境界条件が異なる u_{im}, u_{in} という波動関数を取り上げ、以下の量を作り、区間 $[0, \infty)$ で積分する。

$$u_{in} u''_{im} - u_{im} u''_{in} = \frac{d}{dr} (u_{in} u'_{im} - u_{im} u'_{in}) \quad (2.195)$$

先ず右辺の積分を実行し、境界条件を代入する。

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\infty \frac{d}{dr} (u_{in} u'_{im} - u_{im} u'_{in}) \\ &= \left(I_n \delta_{in} - \sqrt{\frac{k_n}{k_i}} S_{in} O_i \right) \left(I'_m \delta_{im} - \sqrt{\frac{k_m}{k_i}} S_{im} O'_i \right) \\ &\quad - \left(I_m \delta_{im} - \sqrt{\frac{k_m}{k_i}} S_{im} O_i \right) \left(I'_n \delta_{in} - \sqrt{\frac{k_n}{k_i}} S_{in} O'_i \right) \\ &= -2i \sqrt{k_i} \left(-\sqrt{k_n} S_{mn} \delta_{im} + \sqrt{k_m} S_{nm} \delta_{in} \right) \end{aligned} \quad (2.196)$$

この式を導くのに、以下の関係式を用いた。

$$I'_i = -i k_i I_i, \quad O'_i = +i k_i O_i, \quad I_i O_i = 1 \quad (2.197)$$

一方、左辺には (2.193) を直接代入すると、

$$I = \int_0^\infty \sum_j (u_{in} V_{ij} u_{jm} - u_{im} V_{ij} u_{jn}) \quad (2.198)$$

従って、 m, n, i の関係により、以下の3個の場合に分ける。

$$\int_0^\infty \sum_j (u_{mn} V_{mj} u_{jm} - u_{mm} V_{mj} u_{jn}) = +2i\sqrt{k_m k_n} S_{mn}, \quad \text{if}(i = m \neq n) \quad (2.199)$$

$$\int_0^\infty \sum_j (u_{nn} V_{nj} u_{jm} - u_{nm} V_{nj} u_{jn}) = -2i\sqrt{k_m k_n} S_{nm}, \quad \text{if}(i = n \neq m) \quad (2.200)$$

$$\int_0^\infty \sum_j (u_{in} V_{ij} u_{jm} - u_{im} V_{ij} u_{jn}) = 0, \quad \text{otherwise} \quad (2.201)$$

式 (2.199) と (2.200) を加えると右辺は $S_{mn} - S_{nm}$ が登場する。この和の左辺の被積分関数を次に処理する。 j に関する和を $j = n, m$ とそれ以外の部分に分ける。

$$\begin{aligned} \text{integrand} &= u_{mn}(V_{mm}u_{mm} + V_{mn}u_{nm} + \sum_j^* V_{mj}u_{jm}) \\ &\quad - u_{mm}(V_{mm}u_{mn} + V_{mn}u_{nn} + \sum_j^* V_{mj}u_{jn}) \\ &\quad + u_{nn}(V_{nm}u_{mm} + V_{nn}u_{nm} + \sum_j^* V_{nj}u_{jm}) \\ &\quad - u_{nm}(V_{nm}u_{mn} + V_{nn}u_{nn} + \sum_j^* V_{nj}u_{jn}) \\ &= u_{mn} \sum_j^* V_{mj}u_{jm} - u_{mm} \sum_j^* V_{mj}u_{jn} + u_{nn} \sum_j^* V_{nj}u_{jm} - u_{nm} \sum_j^* V_{nj}u_{jn} \end{aligned} \quad (2.202)$$

即ち、あらわに書き下した部分は、 $V_{ij} = V_{ji}$ を用いて入れ換えると、相殺する。残りの \sum^* 部分を処理するために、式 (2.201) を利用する。この式は、 $i \neq n, i \neq m$ という条件下で、任意の i に対して成立する。ここでも、 j の和を $j = m, n$ とそれ以外の部分に分けて書き下す。

$$\begin{aligned} (2.201)\text{integrand} &= u_{in}(V_{im}u_{mm} + V_{in}u_{nm} + \sum_j^* V_{ij}u_{jm}) \\ &\quad - u_{im}(V_{im}u_{mn} + V_{in}u_{nn} + \sum_j^* V_{ij}u_{jn}) \end{aligned} \quad (2.203)$$

この (2.203) の \sum^* に関係しない項は、(2.202) で $j = i$ という項と較べると、符号を除いて一致する。この部分は積分を実行すると0となる。同様に、(2.203) で i を動かすと、(2.202) の全ての項を尽くす事は明らかだろう。従って、 $S_{nm}\delta_{in} - S_{mn}\delta_{im} = 0$ が言えた。

この導き方から判るように、相反性は時間反転不変性を仮定していない。使用したのは $V_{Ij} = V_{ji}$ という対称性と S 行列要素の定義式、それから出発点となっている Schrödinger eq. のみである。

hctak では、登場する全てのチャンネルの S 行列要素を計算すべく、連立微分方程式を解いている。この相反性は、従って数値計算の精度確認の為に使用できる。この picks プログラムを用いて弾性散乱の S 行列要素の相反性を調べる事が可能である。

相反性の式には、 δ_{in} , δ_{im} が含まれている。 i は共通だから、hctak に即して言うと、1-2 系のスピンと波数ビンを固定した状態で、入口の軌道角運動量 L_{cin} と出口の角運動量 L_{cout} を入れ換えた時、この二つの S 行列要素は等しいと言っている。

相反性の式の導き方から考えると、分解過程の逆反応を考えたい。即ち、触媒型核融合反応である。標的の近くを二つの粒子が通過し、標的との個別の相互作用を経由して融合する反応である。CDCC を利用すれば計算可能となる！次の研究課題としてかなり有望な分野となりそうだ。

2.12 qval

qval.f プログラムは、原子核反応の Q 値を返すプログラムであり、対話的な使用を想定している。

下請けとして、umtab ファイルを利用しているので、動作させる directory にこのファイルも存在しなければならない。

使用法

プログラムを立ち上げて、常識的な原子核反応を記述する記号をキーボードから入力すると、ビデオ端末に Q 値を出力し、次の入力を待つ。プログラムを停止するには文字 Q または q を入力する。

操作例

```
> qval (return)
> 40Ca(p,d) (return)
> q (return)
```

例えば中性子の束縛エネルギーを調べる為には、 (γ, n) 反応の Q 値を調べれば良いから、次の操作を受け入れる。

```
> 40Ca(g,n) (return)
```

一つの入射粒子に対して複数の放出粒子も指定できる。

```
> 40Ca(a,2*n) (return)
```

2.13 数値積分メモ

以下の一次元数値積分を先ず取り上げる。

$$\int_a^b f(x) dx \quad (2.204)$$

積分区間を N 個の微小区間に分割する。その一つの微小区間を $[x_{i-1}, x_i]$ とし、この区間内のある点 x^i での関数値 $f(x^i)$ を f_i とおく時、和

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} (x_i - x_{i-1}) f_i \quad (2.205)$$

が収束するならば、この値を関数の定積分と呼んだ。ここで、区間幅 $(x_i - x_{i-1})$ の最大値が 0 となるように極限操作をする必要があったと思う。

一定幅 h で、積分区間を分割して定積分を近似する手法がよく知られていて、台形公式やシンプソンの公式が良く使用される。台形公式の誤差に関して Euler-Maclaurin の和公式を以下に引用しておこう。被積分関数 $f(x)$ は閉区間 $[1, n]$ で無限回微分可能だとする。

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n f(k) &= \int_1^n f(x) dx + \frac{1}{2} \{f(1) + f(n)\} \\ &\quad + \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} \{f^{(2k-1)}(n) - f^{(2k-1)}(1)\} + R_m \\ R_m &\leq \frac{2}{(2\pi)^{2m}} \int_1^n |f^{(2m+1)}(x)| dx \end{aligned} \quad (2.206)$$

ここで、 B_{2k} は Bernoulli 数であり、 R_m は誤差である。この式や B_{2k} については、岩波の「数学公式集 II」 pp 34 や Abramowitz and Stegun 著「Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables」(Dover Pub. Co) pp 16 3.6.28 項を参照。この式の判りやすい解説が、森口繁一 著「計算数学夜話」(日本評論社) pp 42 にある。

上の式は、台形公式の誤差は積分域の両端での奇数階微分の差で与えられると述べている。従って、両端での微分の値が同じならば、誤差は非常に小さくなる。特に、円周上を一周する積分では、積分の両端で全ての階数の微分が必ず一致するから、台形公式の誤差は非常に小さくなる。定積分の上下限を無限大に飛ばして、両端での微分が 0 となるように変数変換を行うというアイデアは、高橋・森の二重指数関数積分公式として定式化されている。

hctak では、真空偏極の最初の近似ポテンシャル Uehling potential の数値計算で、このアイデアを使用している。

三重微分断面積を立体角積分する時、方位角積分がいつも一周期 $[0, 2\pi]$ にわたる積分だから、台形公式を使いたくなる。

シンプソンの公式は、荷重が両端で $h/3$ その他の点では $4h/3$ と $2h/3$ とが交互に現れる様な、等間隔公式である。この公式の使用にあたり、両端を除いて、荷重 W の初期値を 4 とし、 $W=6-W$ という漸化式により次々と荷重を計算し、3 で割るのは最後にする。hctak では、随所でこの手法を利用している。

積分公式には、積分区間の分割幅は可変であるが荷重は一定というアイデアもありうるが、このアイデアは hctak では採用していない。

定積分に対し分割点と荷重を最適化し、被積分関数の計算回数のわりに誤差が小さくなる積分公式を、ガウスは提案した。この積分公式の解説は、一松 信 著「電子計算機のための数値計算法 I」(培風館) pp 81 を参照。この公式に登場する数値は、山下真一郎 著「電子計算機のための数値計算法 III」(培風館) pp 279 に計算法及び数表が与えられている。Gauss 積分の詳細な解説は、Theory of Orthogonal Polynomials の内の Gaussian quadrature を読んで貰うとし、簡単な解説を以下に与えておこう。積分区間とこの区間で正の値をとる荷重関数 $w(x)$ 、及び直交多項式 $P_k(x)$, $(k = 0, 1, \dots)$ を仮定する。

$$\int P_k(x) P_l(x) w(x) dx = \delta_{kl} \quad (2.207)$$

被積分関数 $f(x)$ は高々 $2n - 1$ 次の多項式 (で近似出来る) と仮定し、 $P_n(x)$ で割る。

$$f(x) = P_n(x) q_{n-1}(x) + r_{n-1}(x) \quad (2.208)$$

ここで、 $q_{n-1}(x)$, $r_{n-1}(x)$ は商と剰余であり、どちらも高々 $(n - 1)$ 次多項式である。

ところで、定積分の公式は、以下の構造をしている。

$$\int f(x) w(x) dx \sim \sum_i g_i f(x_i) \quad (2.209)$$

ここで、 g_i と x_i は、この積分公式固有の定数であり、 x_i は積分区間内の点である。式 (2.208) を (2.209) に代入する。この時、 x_i は、 $P_n(x_i) = 0$ となるように選ぶ。 i の自由度は、 n 個あり、その全てにわたり、(2.209) の和はとる。この結果、積分公式は、以下の $n - 1$ 次多項式の積分に還元された。

$$\int f(x) w(x) dx \sim \sum_{i=1}^n g_i r_{n-1}(x_i) = \sum_{i=1}^n g_i f(x_i) \quad (2.210)$$

この次の仕事は、 n 個の点 $(x_i, f(x_i))$, $(i = 1, 2, \dots, n)$ を通る、 $(n - 1)$ 次多項式の定積分を行う事である。この多項式を書き下すのに、以下の Lagrange の多項式を利用する。

$$L_i(x) = \Pi_{j \neq i}(x - x_j) / \Pi_{j \neq i}(x_i - x_j) \quad (2.211)$$

$L_i(x)$ は $(n - 1)$ 次多項式であり、実際に値を代入してみれば $L_i(x_k) = \delta_{ik}$ も確認出来る。故に、 $f(x_i) \times L_i(x)$ は、点 $(x_i, f(x_i))$ を通り、他の x_j , $(j \neq i)$ では $L_i(x_j) = 0$ である。

つまり、求める多項式は

$$F(x) = \sum_i f(x_i) L_i(x), \quad (2.212)$$

であり、 g_i は次式により原理的に計算可能である。

$$g_i = \int L_i(x) w(x) dx. \quad (2.213)$$

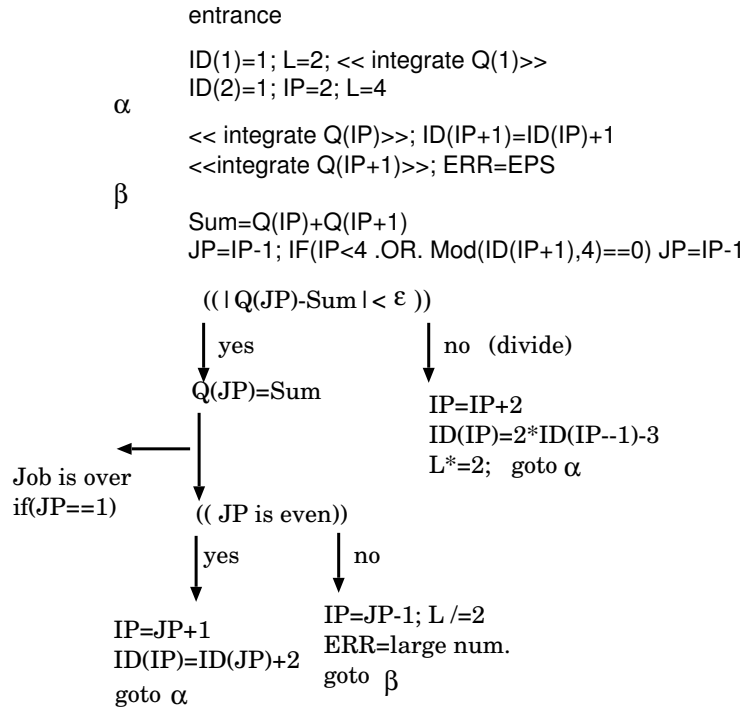
これで、論理が完成した。纏めると、定積分 (2.204) を $(2n - 1)$ 次近似という意味で実行したいならば、先ず直交多項式 $P_n(x)$ の n 個のゼロ点 x_i , ($i = 1, 2, \dots, n$) を計算する。次に荷重を (2.213) を用いて計算する。座標と荷重の組 (x_i, g_i) が揃うと、(2.209) を用いて定積分は近似出来た事になる。この公式の特徴は n 点での情報を用いて $(2n - 1)$ 次近似しているところにある。勿論、 $2n$ 個のパラメータで、 $(2n - 1)$ 次近似をしているという意味では、数学の論理通りであるが、手軽に高精度の積分結果を得る事が出来る。被積分関数の評価コストがかかる場合や、積分回数が多い場合には有難い手法である。

hctak でも、核力ポテンシャルの多重極展開その他で、この積分手法を利用している。直交多項式として Legendre の多項式をとった時の、関数値を計算すべき座標点 x_i とその点での荷重を計算する副プログラムが、LGCAL である。副プログラムに直接座標値と荷重値を埋め込んでいる場合もある。

積分区間内で、被積分関数の値が大きい部分と非常に小さい部分がある事が事前に判っていたり、微分が不連続である事が判っているならば、積分区間を分割してから数値積分をするのが賢明である。hctak では、核力ポテンシャルの多重極展開や Uehling potential の数値積分でこのアイデアを利用している。

更に、このアイデアを積極的に利用する事もあり、適応的 (adaptive) 積分 と呼ばれている。この手法では、積分公式の精度はむやみに上げず、関数値の変化が激しい部分の区間分割幅を細かくする事により、積分精度の向上を期待する。例えば、森 正武著「FORTRAN77 数値計算プログラミング」(岩波書店) pp187 を参照。ある区間で数値積分を行い、次にその区間を 2 等分して夫々の区間での積分結果の和を計算する。この和を分割前の区間での数値積分の結果と比較する。両者の差が許容誤差以内ならば積分終了であり、許容誤差以上ならば、二分割したそれぞれの区間を基の区間だと考えて、二分割の操作を繰り返す。ある程度細かく分割しても収束しなければ、被積分関数又はその微分が不連続である可能性が考えられる。

一次元でのこの積分区間分割手法は hatak では、電荷分布を与えた時の Uehling potential 計算制御に INTHP 副プログラムとして登場している。以下に流れ図を記す。



この副プログラムの brush up した二次元版を trix で二重微分断面面積計算時の極角積分に使用している。

過去の遺産を使う

積分精度を上げる為に、粗い精度の計算と精度を上げた計算を行い、両者の結果を比較して、収束性・精度保証を行う場合がある。後者の精度を上げた計算に際して、前者の粗い精度での計算の途中経過や結果を利用出来る場合がある。

等間隔 (h) な標本点での関数値を計算し、後者の計算では間隔を半分 ($h/2$) とすると、古い標本点での関数値 (の和) が再利用出来る場合がある。台形公式ならば、そのまま再利用できるし、シンプソンの公式ならば、荷重が $2/3$ と $4/3$ の項を別々に和をとっておけばよい。

Newton Cotes の公式では、中間値の定理を用いて誤差が評価される場合がある。この誤差は刻み幅の冪乗に比例する。この比例定数が二つの繰り返し計算で共通と推定できるならば、粗い精度での計算結果と精度が高い計算結果から推定して、この誤差項を消去してしまう事も可能である。

真空偏極に関する Uehling potential が何回か登場したが、こんないきさつがある。こ

の potential は、点電荷に対して積分表示で与えられている。

$$\delta V(r) = -\frac{2\alpha Z}{3\pi r} \int_1^\infty dt \sqrt{t^2 - 1} \left(\frac{1}{t^2} + \frac{1}{t^4} \right) e^{-2ctr} \quad (2.214)$$

$t = 1$ で被積分関数の値は 0 だが微分が発散するから、このままでは取扱い難い。更に、大きな t では指数関数的に小さくなるというが、電子のコンプトン波長程度である (約 386 fm だったかな?) から、かなり広い範囲で積分すべきである。歴史的には、この積分を実行するのにかなり難儀をした時代が続いた様だ。Uehling の論文は、1935 年だが、1976 年になっても複雑な計算式の論文が書かれている。どちらも Physical Review ですよ。Nucl. Phys. の Appendix でもこの積分の解説を読んだ経験もある。

hctak では、 $s = \log t$ の様な変数に変換する。両端では微分は 0 になり、被積分関数が有意な値をとるのは s のかなり狭い範囲に限定される。そこで、台形公式の採用の条件が整う。実際には、有限の電荷分布に対して積分しなければならないから、二重積分となる。一様帯電球では、半径のところでポテンシャルの二階微分が不連続になるから、ここで、積分範囲を二つに分割する。

多重積分は、一次元積分の積の形で実行する場合がある。例えば、二次元積分を以下の様な形式で行う。この手法は次元の冪乗で計算時間が増える。

$$\int dx \int dy f(x, y) \sim \sum_i g_i \sum_j g_j f(x_i, y_j) \quad (2.215)$$

別の手法として、乱数を利用する方法が考えられた。乱数を使用する方法は、その博打的性格から、モンテカルロ法と呼ばれ、被積分関数を N 回計算して加えると、相対精度が $1/\sqrt{N}$ 程度で減少する。即ち収束性が非常に悪い。

しかし 1980 年代以来、乱数を使用するよりも準乱数利用の有用性が知られている。例えば、高橋・室谷共著「現代応用数学講座 5 数値計算とその応用」(コロナ社) を参照。但し、具体的な準乱数の計算には連分数を使用せずに、具体的な数値を提案するものもある。

この場合の準乱数を優良格子点 (good lattice points) と呼んでいる。例えば、森正武著、「FORTRAN77 数値計算プログラミング」(岩波)pp 205. I.H. Sloan and S. Joe 著, Lattice Methods for Multiple Integration (Clarendon, Oxford, 1994) を参照。Sloan and Joe の参考書では、二次元積分に対して格子点がどのように分布するかを例示している。

更に、新しいところでは、P.L'ecuyer, Mathematics of Computation, vol 68, Num. 225(1999) 249-260

森の教科書の段階では、具体的数値は試行錯誤の末に与えられるた様だが、その後は、被積分関数の値を評価する座標点を出来るだけ均等に分布させる事を指導原理とし、従って、関数値評価点の座標はある種の規則に従ってつくられる。

積分の次元を d とし、積分域を一辺が 1 の超立方体に規格化する。即ち、独立変数を x_k , ($k = 1, 2, \dots, d$)、積分域を $0 < x_k < 1$ とし、以下の積分公式を使用する。

$$\int f(x_1, x_2, \dots, x_d) dx_1 dx_2 \dots dx_d \sim \frac{1}{N} \sum_m f(x_{1,m}, x_{2,m}, \dots, x_{d,m}) \quad (2.216)$$

和は、 $m = 0$ から $M (= N - 1)$ 、又は $m = 1$ から $m = N$ 迄とる。ここで、1 より小さい積分座標 $x_{k,m}$ は、以下の様にとられる。関数評価回数 N を与えて自然数 M を一つ取り上げ、 d 個の自然数 $L_k = M^{k-1}$, ($k = 1, 2, \dots, d$) を作る。これらの自然数から、積分域内に絶対値が 1 以下の数 $x_{k,m} = m L_k / N - [m L_k / N]$ を作る。ここで、 $[x]$ は実数 x の整数部分というガウス記号である。これで、超立方体内に N 個の点を定義出来た。自然数 M を確定するために、任意の積分点を二つ取り上げその距離 $D_{k,m,l,n} = \sqrt{\sum_k (x_{k,m} - x_{l,n})^2}$, ($n \neq m$) を定義する。この距離の最小値が最大になるように M をきめる。

ある N に対して数値積分が収束しないと判断した時に、積分点数を 2 倍程度に増やして再試行する事を想定し、 N は $2^n \pm$ (小さな自然数) とされる場合がある。

二次元 ($d=2$) の場合には、 M, N ($N > M$) は相隣るフィボナッチ数とするのが良いらしい。trix で、単一スリット上での面積分にこの手法を試用している (TXAV2Q, FIBINT)。二次元の Gauss-Legendre 積分 (TXAV2G) と比較すると、ある例では TXAV2G の方が効率的であった。当面、どちらを採用するかは、利用者の判断に委ねている。

この定積分手法は、キーワード的に言うと、1) 準乱数、2) 優良格子点法、3) Quasi Monte Carlo (QMC) 法 と、呼び名が変わってきている。

P.L'ecuyer の論文の先頭部分を訳してみたので、ここに記録しておこう。Multiplicative linear congruential generator (MLCG) の定義

$$x_n = a x_{n-1} \mod m \quad (2.217)$$

ここで、 m と a は整数であり、module, multiplier と呼ばれる。更に $x_n \in \mathbf{Z}_m = \{0, \dots, m-1\}$ は n 番目の state 状態である。

区間 $[0, 1)$ 内における一連の乱数を得る為に、次の関係を導入する。

$$u_n = x_n / m. \quad (2.218)$$

式 (2.217), (2.218) を満たす数を MLGC(m, a) と呼ぶ。 m が素数で、 a が primitive element modulo m であり、 $x_0 \neq 0$ ならば、 $\{x_n\}, \{u_n\}$ は周期が $\rho = m - 1$ の周期数列であり、full period MLGC と呼ばれる。

$t \geq 1$ の整数、即ち自然数に対して、次式を定義する。

$$T_t = \{\mathbf{u}_n = (u_n, \dots, u_{n+t-1}) \mid n \geq 0, x_0 \in \mathbf{Z}_m\} \quad (2.219)$$

T_t は、 t 次元空間の単位立方体 $[0, 1)^t$ の格子点と考えられる。ある意味で、 T_t は小数の等間隔に並んだ超平面上の位置すると考えられる。この超平面の組の中で、相隣る超平面の間隔が最大のものを考え、この距離を d_t とおく。この d_t が小さい方が、 T_t は一様に分布していると考えられる。 t 次元空間 \mathbf{R}^t での格子に対して、極小値 $d_t^*(m)$ は $t \leq 8$ に対しては知られている。更に大きな t には、近似式しか知られていない。この環境の中で、この論文の著者は m が $2^l \pm$ 小さな整数という条件の範囲で、($l = 8, 9, \dots, 64$) という条件付きで、 d_t が小さな a を探した。

これらの点は、 t 次元の超立体での多重積分に対して、優良格子点 Good Lattice Points として、利用できる。

a のかわりに、 $a \times a^* \equiv 1, \pmod{m}$ を満足する a^* を用いても、逆順で実質的に同一の x_n を得る事ができる。

$t = 8$ に対する、最良の例を $l = 8$ から、 $l = 20$ に対して引用しておこう。

l	m	m	a	a^*
8	$2^8 - 5$	251	33	213
9	$2^9 - 3$	509	35	160
10	$2^{10} - 3$	1021	65	377
11	$2^{11} - 9$	2039	995	1498
12	$2^{12} - 3$	4093	209	3858
13	$2^{13} - 1$	8191	884	7459
14	$2^{14} - 3$	16381	572	13374
15	$2^{15} - 19$	32749	219	30805
16	$2^{16} - 15$	65521	17364	32236
17	$2^{17} - 1$	131071	43165	66284
18	$2^{18} - 5$	262139	92717	166972
19	$2^{19} - 1$	524287	283741	358899
20	$2^{20} - 3$	1048573	380985	444362

この関数評価点の分布と荷重を見ると、一次元の台形公式を多次元へ拡張したものが優良格子点 (QMC) 法であると了解出来る。従って、優良格子点を利用する場合、Euler-Maclaurin の和公式のアイデアを併用して、積分の端点付近での高階の微分係数が 0 となるように変数変換をする事が推奨される。積分変数を x から $y(x)$ に変数変換すると、被積分関数は $f(x)$ から $f(x(y)) dx/dy$ に変換されるから、 dy/dx が積分端点で高次の奇数階微分迄が 0 となるように選ぶ。このアイデアは、Sloan and Joe の教科書に単純な場合が提案されていて、森の教科書に 5 階微分迄を 0 とする場合が具体的に書き下されている。trix での QMC 積分では、この森提案が採用されている。

module/ allocate 文

trix.f は FORTRAN 90 を利用し、module, allocate 文及び複文を用いている。module

文は、主に allocate 可能な共通領域という利用を想定した。複文の利用は、VDT で多くのソースプログラムを表示するのに有利である。DO loop の中で、CYCLE 文も利用した。

module 文

以下の宣言を trix.f プログラムの先頭で行っている。

```
MODULE COM
  ALLOCATABLE
+   CT(:,:,:), CL(:,:,:),
+   FKL(:),G12(:,:,:),G3(:,:,:),GS(:,:,:),YLO(:),
+   II(:), IPLK(:), JS(:), NKB(:), LS(:)
  COMPLEX*16 CT, CL
  REAL*8 AMU, COU, HBARC, PI,
+   EM, FK0, FKL, G12, G3, GS,YLO
  INTEGER IIO, IS1, IS2, ISN, ISX, JMN, JTMAX, JTMIN,
+   LMAX, LSMAX, MIS, MLMAX, MSMAX, NIS, NLJI, NLSJ, NSO
  DIMENSION EM(3), IA(3), IS(3), JP(3), IZ(3), KTRL(10)
END MODULE
MODULE TRIXS
  ALLOCATABLE CSY(:,:,:),CLY(:,:), E1TAB(:), TX(:,:,:),:)
  COMPLEX*16 CSY, CLY
  REAL*8 ANG1(5),ANG2(5), A2, C20, E1MN, E1MX, E1TAB, ELAB,
+   EMC1W, EMC2W, EMC3W, EMC3WI, EMCSWI, EMC12I, EMCSM,
+   P1PM, PIC, PLRZO, QM2, QVAL, RAD, TX, XFACO
  INTEGER NE1
END MODULE
```

module 文は、module 文で宣言された変数 (や副プログラム) はを利用するプログラム単位よりも先に置かねばならない。そうしなければ、コンパイラーが記憶域をとれないから、プログラム単位でのコンパイルを優先させると仕方がないだろう。module 文で宣言された変数等は、これを利用したいプログラム単位の先頭で、use 文を書けば良い。変数や配列の利用に際して、これまでの COMMON 文との機能的な相違は、実行時に大きさが確定する配列を利用できる事である。これは長所であるが、欠点は番地で管理されずに名前と属性が固定されている点であろう。一つの実数型配列を他のプログラム単位で整数型配列として使用する事は禁じられている様だ。又、module 文に登場する名前は、この module 文を利用するプログラム単位中で別の意味で登場させられない様だ。

記憶域の動的割り付けとモジュールに関する簡単な記録をしておこう。

記憶域の動的割り付け 旧規格では、記憶域の大きさはコンパイル時に確定していなければならなかった。しかし、黒板を消しながら使用するよう、プログラムの実行中に記憶域を多重使用するというアイデアがあり、multiphase や overlay と呼ばれた。その後この考え方は一般的な OS に取り込まれ、multitask/TSS 実行へと拡張され、異なるプログラムの仮想的な並列実行が実現した。即ち、OS が記憶域を動的に管理する機能を持った。この機能を FORTRAN にも公開したと思えば良い。

例えば、FORTRAN77 で以下のプログラムを実行できる。

```
*****  
N=10  
CALL SUB(N)  
***  
  
SUBROUTINE SUB(N)  
  DIMENSION A(N,N+2)  
  ***  
  A(1,3)=???
```

この例では、呼び出し元では N を定義しているだけで、配列情報は副プログラム SUB には伝えられていない。しかし SUB 副プログラムをコンパイルする時には A は 2 次元の配列であり、その大きさは実行時に決められるという事が事前に判っているので、配列の利用準備は可能である。添字の値の計算は実行時にしか出来ないのだから、添字の値を計算する準備さえコンパイラーがしておけば、OS が自前の記憶域を捻り出せるならば、上で示した例を実行するのに問題は無い。SUB 副プログラムが呼び出された時に、実行準備作業として配列 A の先頭番地とそれに連なる $(N \times (N + 2))$ ワードの記憶域を主記憶の何処かにとればよい。副プログラム SUB を呼ぶ前に、配列 A の大きさを確定していなければならない点は、実用上問題となる場合がある。例えば、作業を始めないと詳細な作業量が確定出来ない場合があるだろう。

記憶域の実行時確保をもう少し一般化すると、副プログラムの実行準備としてだけでなく、プログラムの実行の如何なる段階に於いても、記憶域を取ってきたり、使用していた記憶域を OS に返したりする事が可能となる。そこで、この機能を FORTRAN から利用出来る様にしたのが、ALLOCATABLE, ALLOCATE, DEALLOCATE という宣言文や組み込み関数と考えれば良い。

ALLOCATBLE 宣言 対象となる変数や配列の属性を宣言する。

```
ALLOCATABLE A(:, :), B(:)  
REAL*8 A; COMPLEX*16 B221
```

この例では、倍精度 2 次元配列 A 及び倍精度複素数の 1 次元配列 B は、プログラムの実行時に、その大きさを確定し、記憶域が要求される事を示す。記憶域を予約していると思えばよい。

ALLOCATE 関数 上で宣言した配列を実際に OS に対して要求する例をしめす。

```
N=5; M=10; L=200  
ALLOCATE (A(N,M), B(L), STAT=ISERR)
```

‘STAT=ISERR’ は無くともよい。ISERR は利用者が用意した整数型変数であり、ALLOCATE 文を実行した時のエラーコードが返される。この ALLOCATE 文を実行した後で、利用者は配列 A、B を利用する事が出来る。この配列は、下請けプログラムへも渡す事が出来るが、COMMON 文に書く事は出来ない。当然の事であるが、COMMON 文で宣言された記憶域はプログラムが実行を開始した時から、プログラムが終了するまで、固定した大きさの記憶域として存在しなければならないという規則があるからである。別に言い方では、COMMON 域はコンパイル時にその大きさが確定していて、実行中には変更してはいけない。名前付き COMMON 領域がどのようにして、主記憶に割り付けられるかを考えればすぐに了解出来るだろう。

DEALLOCATE 文 上の例に対する DEALLOCATE 文の使用例は以下の通りである。

```
DEALLOCATE (A,B,STAT=ISERR)
```

‘STAT=ISERR’ は無くとも良い。記憶域の開放時にエラーになっても、エラーメッセージを標準エラー出力に出す以外に利用者に打つ手は無いと思う。

副プログラムで ALLOCATE された記憶域は、その副プログラムの終了時に DEALLOCATE 文を実行しなくとも、OS に開放されると思う。SAVE 宣言がしてあれば、開放されないだろう。開放せずに副プログラムから抜け出し、もう一度同じ副プログラムが呼ばれ、同じ様に記憶域を allocate しようとするとうまくいかない。allocate された記憶域かどうかを調べる必要がある。

OS の頭が良ければ (そして条件が揃えば)、開放された記憶域を再利用してくれるかもしれないので、DEALLOCATE 出来るならばしておく方が良いでしょう。

module 上に述べた共通記憶域の固定的な大きさに関する制限を緩和する手法として MODULE 文を利用する事が考えられる。ALLOCATE 文の実行により確保された記憶域を主記憶域の何処にとるかは OS が (更に、OS が許すならば コンパイラが) 勝手に決めれば良い。従って、複数のブロックに分割して取っても良い。このブロックの一部はデータの swap 時に swap 対象にしなくても良い。従って、実質的な

共通記憶域を実現出来る。(もっと一般的に考えれば、データ域だけでなくプログラム域を対象としても同様のアイデアはあり得る。) 一つのプログラムで大きさが可変の共通記憶域を利用するならば、個別のプログラム単位の前に宣言文を置かねばならないから、これまでの FORTRAN 宣言文とは別格の位置を占める、ある意味で拡張された宣言文という位置付けが必要となる。

共通記憶域の拡張と言う利用法に限定した MODULE 文の利用例

```
module array; allocatable A(:);integer:: N;   end module
module comex; allocatable X(:,:); integer:: IAX, IAY; end module
```

この例では array と comex という名前の二つのモジュールを宣言している。このモジュール宣言文は、(多分このモジュール文を利用する) 全てのプログラム単位の前に置かねばならない。use 文だけでは何が利用されているか不明だからこのルールは仕方がないだろう。

次に、このモジュール宣言を利用する例を示す。

```
C      test of module array
      use array; use comex;  N=15; IAX=20; IAY=30
      allocate (A(N), X(IAX,IAY))
      DO I=1,N; A(I)=I; ENDDO
      CALL SUB;  deallocate (A)
      CALL SUBX
      DO IY=1,IAY,5
      WRITE(6,6) IY, (X(IX,IY), IX=1, IAX, 5)
6  FORMAT(' IY=', I4/(1P5E13.3))
      ENDDO
      STOP;  END
```

最初の行では、二つのモジュールを利用する事を宣言し、配列の大きさを定義している。次の行では、配列を allocate している。これで、配列が利用出来る様になった。そこで、次の行では配列 A に値を代入し、副プログラム SUB を呼び、A の値を出力する事で、利用法を確認している。

次の行は、副プログラムで配列 X に値を代入して、主プログラムで確認の為に、その値の一部を出力している。

この例では、特に DEALLOCATE していない。後に続く作業がないためである。

```
SUBROUTINE SUB;  use array
                223
```

```

WRITE(6,1)(I,A(I),I=1,N)
1 FORMAT(5('A(',I3,')=' ,F6.1,2X))
RETURN; END

```

上の副プログラム SUB では、既に主プログラムで定義された A、N を用いて定義値を確認している。

ここで、N を再定義すると ?? N は通常の変数としての意味を持っている。

```

SUBROUTINE SUBX
  use comex
  DO IY=1,IAY; DO IX=1,IAX; X(IX,IY)=100*IY+IX;ENDDO; ENDDO
  RETURN; END

```

この副プログラムでは、主プログラムで allocate された配列に値を代入している。

更なる注意：FORTRAN77 以前ならば、宣言した配列を副プログラムに渡した時、呼び出し元で宣言された属性と異なる属性で使用する事は許されたが、これが許されなくなっている。記憶域の有効利用という意味では‘?’が付く運用だ！

上の例では、大文字と小文字を混用している。FORTRAN では、大文字を使用する習慣があった。旧い計算機では文字種を制限する必要があったからである。僕が書くプログラムでは、プログラム本体は大文字、コメントは小文字を含む事にしている。文頭の C # % だけよりも読みやすい様に思う。! や /* があるとその後はコメントという規則は、計算機には良くても人間には不向きだと思う。

module/ allocate 文

trix.f は FORTRAN 90 を利用し、module, allocate 文及び複文を用いている。module 文は、主に allocate 可能な共通領域という利用を想定した。複文の利用は、VDT で多くのソースプログラムを表示するのに有利である。DO loop の中で、CYCLE 文も利用した。

module 文

以下の宣言を trix.f プログラムの先頭で行っている。

```

MODULE COM
  ALLOCATABLE
+   CT(:,:,:), CL(:,:,:),
+   FKL(:),G12(:,:,:),G3(:,:,:),GS(:,:,:),YLO(:),
+   II(:), IPLK(:), JS(:), NKB(:), LS(:)
  COMPLEX*16 CT, CL

```



```

      REAL*8 AMU, COU, HBARC, PI,
+      EM, FK0, FKL, G12, G3, GS,YLO
      INTEGER IIO, IS1, IS2, ISN, ISX, JMN, JTMAX, JTMIN,
+      LMAX, LSMAX, MIS, MLMAX, MSMAX, NIS, NLJI, NLSJ, NSO
      DIMENSION EM(3), IA(3), IS(3), JP(3), IZ(3), KTRL(10)
END MODULE
MODULE TRIXS
      ALLOCATABLE CSY(:,:,:),CLY(:,:), E1TAB(:), TX(:,:,:,)
      COMPLEX*16 CSY, CLY
      REAL*8 ANG1(5),ANG2(5), A2, C20, E1MN, E1MX, E1TAB, ELAB,
+      EMC1W, EMC2W, EMC3W, EMC3WI, EMCSWI, EMC12I, EMCSM,
+      P1PM, PIC, PLRZO, QM2, QVAL, RAD, TX, XFACO
      INTEGER NE1
END MODULE

```

module 文は、module 文で宣言された変数 (や副プログラム) はを利用するプログラム単位よりも先に置かねばならない。そうしなければ、コンパイラーが記憶域をとれないから、プログラム単位でのコンパイルを優先させると仕方がないだろう。module 文で宣言された変数等は、これを利用したいプログラム単位の先頭で、use 文を書けば良い。変数や配列の利用に際して、これまでの COMMON 文との機能的な相違は、実行時に大きさが確定する配列を利用できる事である。これは長所であるが、欠点は番地で管理されずに名前と属性が固定されている点であろう。一つの実数型配列を他のプログラム単位で整数型配列として使用する事は禁じられている様だ。又、module 文に登場する名前は、この module 文を利用するプログラム単位中で別の意味で登場させられない様だ。

記憶域の動的割り付けとモジュールに関する簡単な記録をしておこう。

記憶域の動的割り付け 旧規格では、記憶域の大きさはコンパイル時に確定していなければならなかった。しかし、黒板を消しながら使用する様に、プログラムの実行中に記憶域を多重使用するというアイデアがあり、multiphase や overlay と呼ばれた。その後この考え方は一般的な OS に取り込まれ、multitask/TSS 実行へと拡張され、異なるプログラムの仮想的な並列実行が実現した。即ち、OS が記憶域を動的に管理する機能を持った。この機能を FORTRAN にも公開したと思えば良い。

例えば、FORTRAN77 で以下のプログラムを実行できる。

```

*****
N=10
CALL SUB(N)

```

```
SUBROUTINE SUB(N)
  DIMENSION A(N,N+2)
```

```
A(1,3)=???
```

この例では、呼び出し元では N を定義しているだけで、配列情報は副プログラム SUB には伝えられていない。しかし SUB 副プログラムをコンパイルする時には A は 2 次元の配列であり、その大きさは実行時に決められるという事が事前に判っているのだから、配列の利用準備は可能である。添字の値の計算は実行時にしか出来ないのだから、添字の値を計算する準備さえコンパイラーがしておけば、OS が自前の記憶域を捻り出せるならば、上で示した例を実行するのに問題は無い。SUB 副プログラムが呼び出された時に、実行準備作業として配列 A の先頭番地とそれに連なる $(N \times (N + 2))$ ワードの記憶域を主記憶の何処かにとればよい。副プログラム SUB を呼ぶ前に、配列 A の大きさを確定していなければならない点は、実用上問題となる場合がある。例えば、作業を始めないと詳細な作業量が確定出来ない場合があるだろう。

記憶域の実行時確保をもう少し一般化すると、副プログラムの実行準備としてだけでなく、プログラムの実行の如何なる段階に於いても、記憶域を取ってきたり、使用していた記憶域を OS に返したりする事が可能となる。そこで、この機能を FORTRAN から利用出来る様にしたのが、ALLOCATABLE, ALLOCATE, DEALLOCATE という宣言文や組み込み関数と考えれば良い。

ALLOCATBLE 宣言 対象となる変数や配列の属性を宣言する。

```
ALLOCATABLE A(:, :), B(:)
REAL*8 A; COMPLEX*16 B
```

この例では、倍精度 2 次元配列 A 及び倍精度複素数の 1 次元配列 B は、プログラムの実行時に、その大きさを確定し、記憶域が要求される事を示す。記憶域を予約していると思えばよい。

ALLOCATE 関数 上で宣言した配列を実際に OS に対して要求する例をしめす。

```
N=5; M=10; L=200
ALLOCATE (A(N,M), B(L), STAT=ISERR)
```

‘STAT=ISERR’ は無くともよい。ISERR は利用者が用意した整数型変数であり、ALLOCATE 文を実行した時のエラーコードが返される。この ALLOCATE 文を実行した後で、利用者は配列 A 、 B を利用する事が出来る。この配列は、下

請けプログラムへも渡す事が出来るが、COMMON 文に書く事は出来ない。当然の事であるが、COMMON 文で宣言された記憶域はプログラムが実行を開始した時から、プログラムが終了するまで、固定した大きさの記憶域として存在しなければならないという規則があるからである。別に言い方では、COMMON 域はコンパイル時にその大きさが確定していて、実行中には変更してはいけない。名前付き COMMON 領域がどのようにして、主記憶に割り付けられるかを考えればすぐに了解出来るだろう。

DEALLOCATE 文 上の例に対する DEALLOCATE 文の使用例は以下の通りである。

```
DEALLOCATE (A,B,STAT=ISERR)
```

‘,STAT=ISERR’ は無くとも良い。記憶域の開放時にエラーになっても、エラーメッセージを標準エラー出力に出す以外に利用者に打つ手は無いと思う。

副プログラムで ALLOCATE された記憶域は、その副プログラムの終了時に DEALLOCATE 文を実行しなくとも、OS に開放されると思う。SAVE 宣言がしてあれば、開放されないだろう。開放せずに副プログラムから抜け出し、もう一度同じ副プログラムが呼ばれ、同じ様に記憶域を allocate しようとするとうまく困ってしまう。allocate された記憶域かどうかを調べる必要がある。

OS の頭が良ければ(そして条件が揃えば)、開放された記憶域を再利用してくれるかもしれないので、DEALLOCATE 出来るならばしておく方が良いだろう。

module 上に述べた共通記憶域の固定的な大きさに関する制限を緩和する手法として MODULE 文を利用する事が考えられる。ALLOCATE 文の実行により確保された記憶域を主記憶域の何処にとるかは OS が(更に、OS が許すならば コンパイラが)勝手に決めれば良い。従って、複数のブロックに分割して取っても良い。このブロックの一部はデータの swap 時に swap 対象にしなくても良い。従って、実質的な共通記憶域を実現出来る。(もっと一般的に考えれば、データ域だけでなくプログラム域を対象としても同様のアイデアはあり得る。) 一つのプログラムで大きさが可変の共通記憶域を利用するならば、個別のプログラム単位の前に宣言文を置かねばならないから、これまでの FORTRAN 宣言文とは別格の位置を占める、ある意味で拡張された宣言文という位置付けが必要となる。

共通記憶域の拡張と言う利用法に限定した MODULE 文の利用例

```
module array; allocatable A(:);integer:: N;    end module
module comex; allocatable X(:,,:); integer:: IAX, IAY; end module
```

この例では array と comex という名前の二つのモジュールを宣言している。このモジュール宣言文は、(多分このモジュール文を利用する) 全てのプログラム単位の前

に置かねばならない。use 文だけでは何が利用されているか不明だからこのルールは仕方がないだろう。

次に、このモジュール宣言を利用する例を示す。

```
C      test of module array
      use array; use comex;  N=15; IAX=20; IAY=30
      allocate (A(N), X(IAX,IAY))
      DO I=1,N; A(I)=I; ENDDO
      CALL SUB;  deallocate (A)
      CALL SUBX
      DO IY=1,IAY,5
      WRITE(6,6) IY, (X(IX,IY), IX=1, IAX, 5)
6  FORMAT(' IY=', I4/(1P5E13.3))
      ENDDO
      STOP;  END
```

最初の行では、二つのモジュールを利用する事を宣言し、配列の大きさを定義している。次の行では、配列を allocate している。これで、配列が利用出来る様になった。そこで、次の行では配列 A に値を代入し、副プログラム SUB を呼び、A の値を出力する事で、利用法を確認している。

次の行は、副プログラムで配列 X に値を代入して、主プログラムで確認の為に、その値の一部を出力している。

この例では、特に DEALLOCATE していない。後に続く作業がないためである。

```
      SUBROUTINE SUB;  use array
      WRITE(6,1) (I,A(I), I=1,N)
1  FORMAT(5(' A(', I3, ')=' , F6.1, 2X))
      RETURN;  END
```

上の副プログラム SUB では、既に主プログラムで定義された A、N を用いて定義値を確認している。

ここで、N を再定義すると ?? N は通常の変数としての意味を持っている。

```
      SUBROUTINE SUBX
      use comex
      DO IY=1,IAY; DO IX=1,IAX; X(IX,IY)=100*IY+IX; ENDDO; ENDDO
      RETURN;  END
```

この副プログラムでは、主プログラムで allocate された配列に値を代入している。

更なる注意：FORTRAN77 以前ならば、宣言した配列を副プログラムに渡した時、呼び出し元で宣言された属性と異なる属性で使用する事は許されたが、これが許されなくなっている。記憶域の有効利用という意味では‘?’が付く運用だ！

上の例では、大文字と小文字を混用している。FORTRAN では、大文字を使用する習慣があった。旧い計算機では文字種を制限する必要があったからである。僕が書くプログラムでは、プログラム本体は大文字、コメントは小文字を含む事にしている。文頭の C # % だけよりも読みやすい様に思う。! や /* があるとその後はコメントという規則は、計算機には良くても人間には不向きだと思う。

2.14 openmp メモ

ここには、OpenMP の使用に関するメモを置く。OpenMP は記憶域を共有する密結合 CPU を複数用いて、一つのプログラムを並列動作させる。並列動作の代表的な例は、FORTRAN の DO ループを分担処理する事であろう。対象プログラムは FORTRAN 又は C/C++ であるが、ここでは、FORTRAN を想定する。並列に動作するプログラムの個別の実行実体をスレッド (threads) と呼ぶ。

OpenMP の書式は、FORTRAN では自由形式と固定形式があるが、ここでは固定形式で例示する。FORTRAN のコメント文と解釈さるべき文 (OMP 文) を OMP を処理できるコンパイラーが OMP 文だと解釈して、目的プログラムを作る。

OMP を支援しているコンパイラーならば、自動並列化機能も支援しているので、自動並列化しにくい粗粒度の並列化を考えるのが重要だろう。複数の CPU が キャッシュメモリ を共有するタイプの計算機がある。この場合、粒度の粗い並列化をするとキャッシュメモリ の内容を頻繁に書き換えねばならない。他方、粒度が細かい計算を並列化すると、キャッシュメモリ の内容を複数の CPU で共有出来る確率が増える。更に、コンパイラーの自動並列化機能の有効利用が可能となる。従って、粒度が粗い事を狙うのがいつも得策とは限らないという事を経験した。

OMP の実行には3種のパラメータ群、1) 環境変数、2) OMP 実行時ルーチン、3) OMP 文がある。

環境変数 以下の4個の環境変数があり、実行時又はコンパイル時に利用される。

環境変数	機能等
OMP_NUM_THREADS	スレッド数の動的調整が有効になっている場合、環境変数は、使用するスレッド数の上限を与える。 setenv OMP_NUM_THREADS 4
OMP_SCHEDULE	環境変数のデフォルト値は、処理系に依存する。type[,chunk] 形式で指定する。type は static/dynamic/guided のどれか。chunk はオプション。static でなければ 1 がデフォルト。static ならば、(ループカウント数)/(スレッド数) setenv OMP_SCHEDULE "DYNAMIC"
OMP_DYNAMIC	設定値が TRUE ならば、スレッド数はシステムが実行時に調整する。FALSE ならば、動的調整は無効 setenv OMP_DYNAMIC TRUE
OMP_NESTED	設定値が TRUE ならば、ネストされた並列実行が有効、FALSE ならば無効。デフォルトは FALSE。 setenv OMP_NESTED TRUE

_OPENMP は環境変数ではないが、コンパイラーが OMP を認識する。次の例 (自由書式) を引用しておく。

```
#ifdef _OPENMP
IAM=OMP_GET_THREADS_NUM()+index
#endif
```

この文の意味は、_OPENMP が定義されていれば、現在実行中の自分自身のスレッド番号を認識し、それに補助的変数 index を加えた量を変数 iam に代入する。OMP 実行時ルーチンを呼んでいる。関数型に関する後出の注意も参照の事。以下の文は上の例と同じ意味である。

```
!23456789
!$    iam=OMP_GET_THREAD_NUM()+index
```

この 2 行目の文は、固定形式であり OMP 文の例になっている。FORTRAN では、大文字と小文字は通常は区別しない。

OMP 実行時ルーチン 上の OMP_GET_THREAD_NUM() の様な、OMP 特有の関数が 2 2 個あり、以下の表に引用しておく。整数を返す関数でも omp で始まる名前になっているので、関数の型を正しく定義しておかないといけない。この対策として、以下の OMP 文 を宣言部の先頭に書いておくと良い。

```
C23456789
!$    USE OMP_LIB  ! default では大文字/小文字の区別をしない
```

実行環境の問い合わせ

call omp_set_num_threads(integer)	パラレルリージョンが使用するスレッド数を設定する
integer omp_get_num_threads()	パラレルリージョンのスレッド数を返す
integer omp_get_max_threads()	最大スレッド数を返す
integer omp_get_thread_num()	チーム内のスレッド数を 0 からの値で返す
integer omp_get_num_procs()	プログラムで使用可能なプロセッサ数を返す
logical omp_in_parallel()	並列実行中であれば真を返す
call omp_set_dynamic(logical)	スレッド数の動的調整機能の有効、無効を制御する
logical omp_get_dynamic()	動的なスレッド数調整機能が有効場合に真を返す
call omp_set_nested(logical)	パラレルリージョンのネスト機能の有効、無効を制御する
logical omp_get_nested()	ネスト機能が有効ならば真を返す

ロックルーチン

call omp_init_local(svar)	ロック変数を確保し、初期化する
call omp_init_net_local(nvar)	
call omp_destroy_lock(svar)	ロック変数を破棄し、開放する
call omp_destroy_nest_lock(svar)	
call omp_set_lock(svar)	スレッドは使用可能になるまで待ち、ロックを獲得する
call omp_set_nest_lock(nvar)	
call omp_unset_lock(svar)	ロックを開放する。待っていたスレッドがあれば再開する
call omp_unset_nest_lock(nvar)	
logical omp_test_lock(svar)	ロックの獲得を試みる。成功すると真が返される
integer omp_test_nest_lock(nvar)	

タイミングルーチン

real(8) omp_get_wtime()	任意時刻からの経過時間を秒単位で返す
real(8) omp_get_wtick()	1 秒間に時計が刻む回数を返す

OMP 文 OMP 文をプログラム中に書き加える事で、並列実行を制御する。

固定形式では先頭の 5 文字は `+$OMP+` で始まる。但し `'!'` は `'C'` 又は `'*'` でも良い。通常のコメント文とは区別した方が良いでしょうから、`'!'` を使用する。

継続行は、第 6 桁目を `'+'` としておこう。多分、通常の継続行指示子で良いと思う。

上で引用したように、条件付き構文として、最初の 2 文字が `'!$'` で始まるものもある。

複数の CPU で一つのプログラムを並列動作させる時、主プログラムの先頭部分や最後の部分は一つの CPU で実行する。従って、プログラム中には逐次実行する部分と並列実行する部分があり、逐次実行域 (serial region)、並列実行域 (parallel region) と呼ばれる。プログラムを実行中のある時点で並列実行に移行し、別の時点で逐次実行に戻る。この切替えを fork, join と呼ぶ。全体のプログラム実行は、fork-join を複数回繰り返す。並列実行を行う CPU(thread) 全体を チームと呼ぶ。

並列実行時には、チームのメンバー数、即ち スレッド数を指定する必要がある。このスレッド数指定には、上に記した環境変数や実行時ルーチンが利用できる。

ある種の DO ループはスレッドで分担処理するが、漸化式の DO ループは個別のスレッドがこのループ全体を実行せねばならない。この事情は、副プログラムにもあるだろう。副プログラムの並列実行は、異なるプログラムを並列に実行する場合と、同一の副プログラムを異なるパラメータで実行する場合があり得る。ある一つの副プログラムは、計算過程のある時点では並列実行され、別の時点では逐次実行される。並列実行時に、チームメンバーでの作業分担を割り付ける命令が必要だろう。

並列実行作業の所要時間は、スレッド毎に異なるだろう。従って、ある種の時間合わせ、同期をとる必要がある。即ち、この処理は終われば先に進んでも良いが、ここの処理では必ず全てのスレッドが終るまで先へ進まずに待てという場合である。

並列実行中にも、この部分は一回だけ逐次実行、別の部分は個別のスレッドで一回ずつ別々の時刻にして欲しいという様な要求もあるだろう。

各スレッドが勝手にファイルヘータを書き出すと、ゴタゴタと混じってしまい判読出来なくなるに違いない。

記憶域 (変数の値) には、全てのスレッドで共有利用 (share) するものと、DO 変数の様に各スレッドが個別に (private) 利用するものを用意する必要がある。OMP に記憶域の share/private の区別を知らせる必要があるという意味である。別の言い方をすると、ある種の変数は全てのスレッドで名前と値とを共用するが、別の変数はスレッド間で名前は同じでもその保持する値は、スレッド毎に異なる事を認めねばならない。

個別のスレッドで私的に使用する変数に値を代入する必要がある。例えば、計算に必要なパラメータは一つのスレッド、多分 main thread、で読み込み、全てのスレッドに共通の値をばらまきたい (broadcast したい) だろう。

複数のスレッドで名前は共通だが、値が異なる場合でも、最終結果が異っては困る。どこかで、統一的な値にする必要もあるだろう。

これらの事を制御するのが、OMP 文の仕事になる。

構造化ブロック

OMP 文は以下の構造を定義し、その作用範囲をきめる。

```
!$OMP directive
    DO something
!$OMP END directive
```

この様に、directive の作用する範囲を構造化ブロックと呼ぶ。構造化ブロックは、この範囲の外へ飛び出す GOTO 文を含んではならない。例外は、行った先が STOP 文の場合である。

変数のスコープ

変数は、その値を定義したり利用したりするが、プログラム中で個別の変数が意味を有する範囲がある。この有効範囲を変数のスコープと呼ぶ。FORTRAN では、大域 (global) 変数と 局所 (local) 変数とに分けられる。大域変数は、複数のプログラム単位で共通に利用される変数であり、COMMON 文や MODULE 文で定義される場合がある。副プログラムの引数も、ここでは大域変数に分類しておこう。一方、局所変数は単一のプログラム単位内だけで有効な変数である。

OMP での変数利用という観点では、複数のスレッドで共有する変数 (shared) と単一の スレッドのみで有効な変数 (private) の区別をせねばならない。即ち、global/local 及び shared/private の識別が必要となる。そこで、以下の表を引用しておく。

	shared 全スレッドで利用可	private 個別スレッド毎に独立な値を持つ
大域変数	1) COMMON BLOCK 2) MODULE 変数 3) SAVE 属性の変数 4) 初期化データ	OpenMP 宣言子での THREADPRIVATE 指定 (COMMON BLOCK 及び MODULE 変数)
局所変数	1) OpenMP での default 2) OpenMP での shared 指定	1) OpenMP での private 指定 2) ループの反復変数

この表に従った暗黙の指定 (default) 以外に、明示的にも指定出来る。部分的に明示指定したり、この暗黙の指定を破棄する事も可能である。更に、parallel region 毎に share/private を指定する clause も利用出来る。

OMP 文の書式

```
!$OMP directive [clause[[,] clause],,]
```

即ち、directive の後ろに clause を複数個書いたものである。clause は directive の動作の詳細を規定する。directive と clause の許される組合せは、後ろの方に引用する。

THREADPRIVATE directive

変数の share/private 属性を明示的に指定する。従って、プログラム単位の宣言文の位置に書かねばならない。

```
!$OMP THREADPRIVATE (name-list)
```

name-list には、default では share されるが、thread 毎に private としたい変数名を列挙する。但し名前付き共通領域全体を private list に書く場合には、名前を列挙せずにスラッシュと共に、共通領域の名前を書く。

name-list に列挙された変数は thread 毎に用意されるが、その値は特に指定しなければ、未定である。但し、共通領域の変数が DATA 文で初期化されているならば、最初の一回だけは全ての thread 毎のコピーは、この DATA 文で定義された値で初期化される。

個別 thread 用に用意された変数に明示的に "現在の値" を代入するには、PARALLEL directive の clause として、COPYIN(name-list) を利用する。この COPYIN の name-list には、THREADPRIVATE で宣言した name-list の一部が書かれる。

個別の thread で name-list に記された変数への代入は、他の thread の同名の変数とは全く無関係である。この事は、一つの副プログラムが並列実行される時、スタック領域にはこの並列度に応じた量の記憶域が取られる。これはある意味で、記憶域の資源を圧迫する要因となりうる。

逐次実行域 (serial region) へ戻った時や、並列実行域で MASTER directive を実行する時は、master thread における変数の値を "現在の値" として利用する。

ある段階での parallel region に於いてだけ share/private 宣言をしたい単数又は複数の変数があるならば、次の例の clause が利用可能である。

```
!$OMP PARALLEL DO SHARED(X)
```

このような clause として、以下のものがある。

PRIVATE(name-list) ある parallel region では name-list に列挙された変数は PRIVATE 属性を与えられる。fork される度に、値が未定義の変数が作られる。ここで宣言された変数は thread 内だけで利用可能。DO 変数は自動的に PRIVATE 属性を持つ。

SHARED(name-list) 同上、PRIVATE ==> SHARED

DEFAULT(SHARED) parallel region にある全ての変数は全 thread で共有される。明示的に default が指定していないと、DEFAULT(SHARED) と指定したと看做される。

DEFAULT(PRIVATE) THREADPRIVATE で指定された変数と COMMON BLOCK を除き、parallel region 内にある全ての COMMON BLOCK と変数を thread に private なコピーを作る。即ち、個別の変数を指定した PRIVATE(..) と等価。

DEFAULT(NONE) parallel region 内の全ての変数に対して、PRIVATE, SHARED, FIRSTPRIVATE, LASTPRIVATE, REDUCTION のどれかの属性を与える必要がある。

上の様な宣言をして、暗黙指定の属性を変更する事は違法ではない。従って、次の例は合法である。

```
!$OMP PARALLEL DO DEFAULT(PRIVATE),  
!$OMP+ FIRSTPRIVATE(I), SHARED(X),  
!$OMP+ SHARED(R), LASTPRIVATE(I)
```

上に登場した、変数の属性を指定と同時に値を規定する以下の 5 種の clause がある。

FIRSTPRIVATE(name-list) PRIVATE 属性を変数にあたえるが、並列実行の開始時に、逐次実行部分の変数の値を各 thread の PRIVATE 変数にコピーする。

LASTPRIVATE(name-list) PRIVATE 属性の変数であるが、並列実行の最後の段階での値を保持している。この宣言がなされていないと、PRIVATE 属性の変数の値は、並列実行領域を出ると、不定となる。

COPYIN(name-list) THREADPRIVATE で列挙された変数の内、ここで列挙された変数には、master thread (逐次実行部分) の値がコピーされる。

COPYPRIVATE END SINGLE directive にのみ追加できる clause であり、指定された private 変数の値をチーム内の他の threads に broadcast する。

```
!$OMP SINGLE
    READ(1)X,Y,Z
!$OMP END SINGLE COPYPRIVATE(X,Y,Z)
```

REDUCTION DO directive と共に使用され、loop unrolling の後処理を担当する。次の例を見ると良いだろう。

```
S=0.0D0; P=1.0D0
!$OMP PARALLEL DO REDUCTION (+:S) REDUCTION (*:P)
    DO I=1,N; S=S+A(I); P=P*B(I); END DO
!$OMP END PARALLEL DO
```

REDUCTION clause が無いと、loop unrolling をして、和や積を実行すると、parallel region 内の変数 S と P は部分的な和や積が入っているが、DO 変数の全域に関する和や積は未だ計算されていない。REDUCTION clause を書き加える事で、serial region の変数 S や P に、DO 変数全域に渉る和や積が代入される。この例で、REDUCTION という clause が 2 回現れている事に注意。

REDUCTION clause の書式

REDUCTION (演算子又は組み込み関数: 変数又は配列)

利用可能な演算子: +、-、*、/、.AND.、.OR.、.EQV.、.NEQV.

利用可能な組み込み関数: MAX、MIN、IAND、IOR、IEOR

‘変数’の属性は必ず private でなければならないし、組み込み関数を利用するならば、組み込み関数で利用可能な形でなければならない。

括弧の中の区切り記号は コロン以外にコンマも OK らしい。

PARALLEL directive

逐次計算から並列計算への移行と、並列計算から逐次計算への復帰を指示する文が対になって使用される。

```
!$OMP PARALLEL
    ここに、DO 文等の並列実行文が挟まれる。
    WRITE 文だけがあり、thread 数が 4 だと同じ文が 4 回出力される。
!$OMP END PARALLEL
```

上の二つの OMP 文で囲まれた部分、parallel region、は並列実行される。逆にこれらの文で囲まれていない部分は逐次実行される。逐次実行される部分、serial region、は master が実行し (master thread)、parallel region は team で実行する。

呼び出す側のプログラム単位で PARALLEL 宣言がなされている時、呼び出されるプログラム単位には、PARALLEL directive は無くとも、この PARALLEL 情報は引き継がれる。この様にして並列実行域が動的に拡張定義される。この場合、呼び出されるプログラム単位は、並列・逐次実行の双方からの呼び出しを受け付け、並列実行される場合にのみ、このプログラム単位で宣言された OMP 文が有効となる。この PARALLEL directive で挟まれていない OMP 文を親無し構文と呼ぶ。

WORK SHARING

PARALLEL directive で指定された 並列実行域 (parallel region) 内部に書かれた全ての実行文は、全ての thread で実行する。しかし、プログラムを分割実行しないと並列実行の意味が無い場合もある。この作業分担の仕方を指示するのが、DO, SECTIONS, SINGLE, WORKSHARING の4種 OMP directive である。以下は、4種の directive の説明。

DO directive

DO ループを thread で分担して実行する。

```
!$OMP PARALLEL
!$OMP DO
      DO I=1,1000; A(I)=B(I)+2.0; END DO
!$OMP END DO [NOWAIT]
```

配列代入の様な場合にはこれで良いが、級数の和をとる様な場合には、各 thread の結果をもう一度加えなければならない。 = = > REDUCTION を参照。

END PARALLEL 文返くると、全ての thread の実行が終るまで、次の実行文の実行は行われない、即ちここで同期がとられる。NOWAIT clause が追加されていると、DO 文の実行を終えた thread はすぐに次の実行文の実行に移る。

SECTIONS derivative

複数の section を指定する。個別の section は、個別の thread で実行される。即ち、各 section は1回しか実行されない。

与えられた section 数が、thread 数よりも少なければ、仕事にあぶれる thread もある。逆に section 数が thread 数よりも多ければ、複数の section を逐次実行する thread もある。OS が遊んでいる thread に未実行の section を割り当てる。section 部の実行を終えた (及び 仕事にあぶれた) thread は、全部の thread が仕事を終えるまで待つ。即ち、ここで同期がとられる。

例

```
!$OMP PARALLEL
!$OMP SECTIONS
      実行文 A      ! ある thread はこの 実行文 A を実行し
!$OMP SECTION
      実行文 B      ! 別の thread はこちらの 実行文 B を実行する。
      {...} {...} ! 以下同様。
!$OMP END SECTIONS [NOWAIT]
!$OMP END PARALLEL
```

SINGLE directive

一つの thread だけで、一回だけ実行される。並列実行域中にこの文があり、この single 指定された範囲の文が実行開始されると、他の全ての thread は、既に実行中の並列 job が終ると、single job が終るまで待機する。

例

```
!$OMP PARALLEL
    実行文 A      ! 複数の thread が実行文 A の実行を開始する
!$OMP SINGLE
    実行文 B      ! 最初に 実行文 A を終えた thread が、実行文 B を実行する
!$OMP END SINGLE ! 実行文 A を終えた thread は、実行文 B の終了を待つ。
    実行文 C      ! 実行文 C は全ての thread で同時に実行開始
!$OMP END PARALLEL
    実行文 D      ! 実行文 D は master thread が実行する。
```

WORKSHARE directive

この文は、FORTRAN90 以降の、複合要素に対する作業の共通作業の分担専用。例えば、行列の和を取る場合に使用する。

例

```
    DIMENSION A(100,200), B(100,200), C(100,200)
    何かの作業がここに来る
!$OMP PARALLEL
!$OMP WORKSHARE ! 行列の和を、内部的に分割して実行。
    A=B+C      ! 従って、外部から指定するパラメータ (clause) は無い。
!$OMP END WORKSHARE
!$OMP END PARALLEL
```

DO, SECTIONS, WORKSHARE は PARALLEL 文とくっついて一つの OMP 文として運用可能であり、結合構文と呼ばれる。

```
!$OMP PARALLEL DO
!$OMP PARALLEL SECTIONS
!$OMP PARALLEL WORKSHARE
```

これらの使用法は明らかだと思う。

worksharing に於いて、分担の仕方をあらかじめ指定するやりかたとして、SCHEDULE と呼ぶ clause がある。回転数が 1000 回の DO ループを 4 個の thread で loop unroll する場合を例にとる。thread i を $T(i)$ と書く。

SCHEDULE(STATIC,chunk)

!\$OMP DO SCHEDULE(STATIC,10) と宣言された時。

まず各 thread は、1~10, 11~20, 21~30, 31~40 のループ番号の仕事をする。次は、 $T(i)$ は、 $n=40*m+(1から10)*(i-1)$ を実行する。但し、最初は $m=1$ であり、次は 2 ...。

この部分の割り当て順番は round robbin 方式。10 (chunk) という指定が無いと、250 が割り当てられる。割り切れない場合には、あまりの部分は、thread 0 が実行するのだろう。

SCHEDULE(DYNAMIC, chunk)

!\$OMP PARALLEL DO SCHEDULE(DYNAMIC,10) と宣言された時。

先ず各 thread は、1~10, 11~20, 21~30, 31~40 のループ番号の仕事をする。次は、 $n=40*m+(1 \text{ から } 10)*(i-1)$ を手のすいた thread が実行する。m に関する注は、上の SCHEDULE(STATIC) の場合と同様。chunk 指定の default は 1 である。

ループ内部での計算作業が複雑で、個別のループ回転毎に計算時間がばらつく時には、SCHEDULE(DYNAMIC) 指定が有効だろう。

SCHEDULE (GUIDED, chunk)

!\$OMP PARALLEL DO SCHEDULE(GUIDED,10) と宣言された時。

先ず各 thread は、1~10, 11~20, 21~30, 31~40 のループ番号の仕事をする。次からは、chunk 数が指数関数的に減少していく。多分最後のループで chunk が 1 になるような減衰率なのだろう。

2 回目以降のループは、chunk が異なるだけで、STATIC と同じ。ループの overhead と CPU の効率利用の妥協点を探すやりかただろう。

SCHEDULE (RUNTIME)

環境変数 OMP_SCHEDULE の指定による。この環境変数が無い場合には SCHEDULE(STATIC) とされる。

同期構文

並列実行から逐次実行への移行、並列実行内での同期等を制御する、6 種の directive MASTER, CRITICAL, BARRIER, ATOMIC, FLUSH, ORDERED がある。

MASTER directive

MASTER/END MASTER で囲まれた code block を master thread のみが実行する。他の thread はこの部分を飛ばして、master thread の終了を待たずに次の処理を開始する。master と他の threads との同期がとれない事に注意！

```
!$OMP MASTER
    DO something
!$OMP END MASTER
```

CRITICAL directive

時間的には、一つの thread だけが、指定された code block を実行する。CRITICAL 宣言された部分に来た他の thread は、その間は待機状態となる。

```
!$OMP PARALLEL
```

```

!$OMP DO
    作業 A    ! 全ての threads がこの作業を開始する。
!$OMP END DO
!$OMP CRITICAL ! 作業 A を終えた thread は、他の thread が 作業 B に従事
    作業 B    ! していなければ、作業 B を開始。
                ! 作業 B を実行中の thread があれば、
                ! 自分のところでの作業 B を開始出来るまで待つ。
    WRITE(1) output-record
!$OMP END CRITICAL
!$OMP DO      ! 作業 B を終えた thread は、parallel region 内だから、
    作業 C    ! 作業 C を開始する。
!$OMP END DO
!$OMP END PARALLEL ! ここで、全ての threads の作業終了を待つ。

```

作業 B の例として、論理機番 1 への書き込みをした。これにより、論理機番 1 の内容が、個別の thread からてんでに書き込まれるのを防止する事が出来る。

BARRIER directive

全ての threads がここに来るまで待つ。この文で、全ての threads の同期がとれる。

```
!$OMP BARRIER
```

ATOMIC directive

ATOMIC directive 直後の 1 行は、共通記憶域の変数を書き換える可能性があるから、一つずつの thread で排他的に実行する。実行できる文は、以下の書式の内の 1 つである事。

```
x=x op expr, x=expr op x, x=intr(x, expr), x=intr(expr, x)
```

ここで、x は組み込み関数で利用可能なデータ形式を持つスカラー変数、expr は x を参照しない演算子、intr は MAX、MIN、IAND、IOR、IEOR のいずれかの組み込み関数、op は +、-、*、/、.AND.、.OR.、.EQV.、.NEQV. のいずれかの演算子。

変数 x の load/store が ATOMIC 処理の対象である。ある意味で、CRITICAL と同じ機能であるので、無理して 'ATOMIC' を覚える必要は無い。

次の二つの ATOMIC、CRITICAL の使用例を引用しておく。

```

!$OMP PARALLEL PRIVATE(B)
    B=DOIT(I)
!$OMP ATOMIC
    X=X+FOO(B)
!$OMP END PARALLEL

```

CRITICAL を使用した例

```

!$OMP PARALLEL PRIVATE(B, tmp)
    B=DOIT(I)
    TMP=FOO(B)

```

```
!$OMP CRITICAL
    X=X+TMP
!$OMP END CRITICAL
!$OMP END PARALLEL
```

両者共に、X の update を行っている。FOO の取扱方が異なる。実質的にどのように異なるのだろう。後で、具体的にテストしよう。

FLUSH directive

共有変数に関する同期処理の実施

```
!$OMP FLUSH (name-list)
```

name-list には、コンマ ”、” で区切って変数名を列挙する。name-list を省略すると、全ての共有変数について同期がとられる。もう一度、共有変数の説明を以下に記録しておく。

- * グローバル変数 (COMMON block, MODULE 変数など)
- * SAVE 属性の無いローカル変数で、そのアドレスが他のサブプログラムへ引き渡されるなど、アドレス参照がなされるもの。
- * SAVE 属性が無いローカル変数で、サブプログラムにあるパラレル領域で SHARED 宣言されるもの
- * 仮 (ダミー) 引数
- * 全てのポインター参照

ORDERED directive

ORDERED/END ORDERED で囲まれた code block は、逐次実行時と同じ順番で実行する。

ORDERED directive を含む block を囲む DO、PARALLEL DO directive には、ORDERED clause を指定する必要がある。

directive と clause の許される組合せ表

	parallel	do	sections	workshare	single	P do*	P sections*	P workshare*
if	Y					Y	Y	Y
private	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y
share	Y					Y	Y	Y
default	Y					Y	Y	Y
1stprivate**	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y
lastprivate		Y	Y			Y	Y	
reduction	Y	Y	Y			Y	Y	Y
copyin	Y					Y	Y	Y
copyprivate					Y			
ordered		Y				Y		
schedule		Y				Y		
nowait		Y	Y	Y				
num_threads	Y					Y	Y	Y

P は parallel の略、** 1stprivate は firstprivate の略であり、この表のみで意味をもつ。

一番上の行が、directive であり、3 個の directive, (do, sections, workshare) は、複合的利用が可能である。

最も左の列が clause であり、directive の動作を修飾する。PARALLEL 文で囲まれた、文の中に入れ子的な directive の記述がなされる。

表中の Y の欄が、許される組合せ。

単純な使用例

以下は、Hyper threading 付き Pentium4 と intel FORTRAN compiler(V.10) と gfortran でのテスト例を残しておく。

タイミングループ使用例

```
C ifort -parallel -openmp -par-report3 ex1.f
C gfortran -fopenmp ex1.f
!$  USE OMP_LIB      ! use 文は、IMPLICIT 文よりも前に位置する事に注意！
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      TO=OMP_GET_WTIME()
      DO I=1,100000000; X=1.0D-3*I; Y=SIN(X); Z=COS(X); END DO
      WRITE(*,*) 'y and z=',Y,Z
      T1=OMP_GET_WTIME(); TD=T1-TO
      WRITE(*,*) 't=',TD,T1,TO
      TICK=OMP_GET_WTICK(); WRITE(*,*) 'tick=',TICK
      STOP;  END
```

ifort では、tick=1 μ sec, gfortran では、 tick=1 m sec. であった。-O3 付きでコンパイルすると、実行時間は ifort では 2 秒、gfortran では 17.9 秒であった。

最も単純な OMP プログラム

```
C ifort -openmp ex2.f
      use omp_lib
      write(*,*) 'before'
!$OMP PARALLEL !fork
      write(*,*) 'Hello OMP !'
!$OMP END PARALLEL ! join
      write(*,*) 'after'
      stop; end
```

次の出力を得た。

```
before
Hello OMP !
Hello OMP !
after
```

自分のスレッド番号と、下請け副プログラムの利用

```
C ifort -openmp ex3.f ! compiler 起動コマンド
      use omp_lib
!$OMP PARALLEL
      ID=omp_get_thread_num()
      CALL SUB(ID)
!$OMP END PARALLEL
      ID=10; CALL SUB(ID); STOP; END
      SUBROUTINE SUB(K)
      S=0.0D0; IMAX=10+2*K
      DO I=1,IMAX; S=S+REAL(I); END DO
      WRITE(*,*) 'at Sub. K IMAX S=',K,IMAX,S
      RETURN; END
```

この場合の出力は、次の通り。

at Sub. K IMAX S=	0	10	55.00000
at Sub. K IMAX S=	1	12	78.00000
at Sub. K IMAX S=	10	30	465.0000

CRITICAL 文を使ってみる

```
C ifort -openmp
!$ USE OMP_LIB
!$OMP PARALLEL DO
      DO I=1,5; ID=OMP_GET_THREAD_NUM(); CALL SUBX(I,ID); END DO
!$OMP END PARALLEL DO
      STOP; END
      SUBROUTINE SUBX(I, ID)
      DO J=1,ID; X=0;DO K=1,10000; DO L=1,10000;DO M=1, 10
          X=X+1;END DO; END DO; END DO; END DO
!$OMP CRITICAL
      WRITE(6,1)I, ID, X
      1 FORMAT('I ID and X=',2I3,1PE12.3)
!$OMP END CRITICAL
      RETURN; END
```

このプログラムの出力

I ID and X=	1	0	0.000E+00
I ID and X=	2	0	0.000E+00
I ID and X=	3	0	0.000E+00
I ID and X=	4	1	2.684E+08
I ID and X=	5	1	2.684E+08

この場合には、1 cpu だから並列動作はしていないので、幾ら待っても出力が入り混じる事はない。本当の並列計算機に掛けないと、動作は不明だ！

private 変数の利用

```
!$      USE OMP_LIB
      DIMENSION A(5), B(5)
      DO I=1,5; A(I)=I*I; END DO
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(B)
      DO I=1,5 ; ID=omp_get_thread_num() ; B(I)=A(I)-ID*2
      WRITE(6,6)I,ID,A,B
      6  FORMAT(' I ID ',2I3,' A ',1P5E12.3/9X,' B',1P5E12.3)
      END DO
!$OMP END PARALLEL DO
      STOP ; END
```

このプログラムの出力。配列 A の内容は変化しないが、配列 B は private だから、ID が異なると、名前は同じでも、ID が異ると中身は異なる。

特に内容は初期化されていない。出力は並べ変えた。

I	ID					
1	0	A	1.000E+00	4.000E+00	9.000E+00	2.500E+01
2	0	A	1.000E+00	4.000E+00	9.000E+00	2.500E+01
3	0	A	1.000E+00	4.000E+00	9.000E+00	2.500E+01
4	1	A	1.000E+00	4.000E+00	9.000E+00	2.500E+01
5	1	A	1.000E+00	4.000E+00	9.000E+00	2.500E+01
1	0	B	1.000E+00	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
2	0	B	1.000E+00	4.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
3	0	B	1.000E+00	4.000E+00	9.000E+00	0.000E+00
4	1	B	3.009E+00	0.000E+00	0.000E+00	4.484E-44
5	1	B	3.009E+00	0.000E+00	0.000E+00	2.300E+01

共通領域に EQUIVALENCE 宣言した配列の取扱。

```
COMMON /A/B(100)
DIMENSION C(100)
EQUIVALENCE (B,C)
DO I=1,100; B(I)=I; END DO
!$OMP PARALLEL DO FIRSTPRIVATE(C)
      DO I=1,5; CALL SUBB(I,C); END DO
!$OMP END PARALLEL DO
      STOP; END
      SUBROUTINE SUBB(I,C)
      DIMENSION C(100)
```

```

WRITE(6,1)I,C(100)
1 FORMAT('I and C(100)=',I3,1PE12.3)
RETURN; END

```

FIRSTPRIVATE(C) とすると、I に拘らず、1 0 0 が出力されるが、FIRSTPRIVATE を、単純な PRIVATE にすると、0 が出力された。

ALLOCATE 利用 ==; 失敗 !?

```

source program of ex6a.f
!$  USE OMP_LIB
    ALLOCATABLE A(:); N=100; ALLOCATE (A(N))
    DO I=1,N; A(I)=I; END DO
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(A)
    DO I=1,5; ID=OMP_GET_THREAD_NUM();
        WRITE(6,1)ID,I,A(1),A(100)
    END DO
!$OMP END PARALLEL DO
    1 FORMAT('ID I A(1) A(100)=',2I3,1P2E12.1)
    DEALLOCATE (A)
    STOP; END
forrtl: severe (174): SIGSEGV, segmentation fault occurred
Image                PC                Routine                Line                Source
libpthread.so.0      00002AAAAB090CCD  Unknown                Unknown              Unknown
libguide.so          00002AAAAAF676B5  Unknown                Unknown              Unknown
forrtl: severe (174): SIGSEGV, segmentation fault occurred

```

副プログラムで配列を宣言 allocate による配列は、private 変数と矛盾するようなので、下請けプログラムに配列を確保させ、その配列を private とした。これは正常に動作した。

```

N=10; CALL JOB(N); STOP; END
SUBROUTINE JOB(N)
!$  USE OMP_LIB;
    DIMENSION X(N)
    DO I=1,N; X(I)=500-I; END DO
!$OMP PARALLEL DO FIRSTPRIVATE(X)
    DO I=1,5;ID=OMP_GET_THREAD_NUM()
        CALL SUBX(ID,N,X); WRITE(*,*)'I ID N X(N)',I,ID,N,X(N)
    END DO
!$OMP END PARALLEL DO
    RETURN; END
SUBROUTINE SUBX(ID,N,X)
    DIMENSION X(N)

```

```

      IF(ID.LE.0)RETURN
      DO I=1,N; X(I)=-X(I); END DO;  RETURN; END

```

この計算結果では、正しく並列化されている

I	ID	N	X(N)	1	0	10	490.0000
I	ID	N	X(N)	2	0	10	490.0000
I	ID	N	X(N)	3	0	10	490.0000
I	ID	N	X(N)	4	1	10	-490.0000
I	ID	N	X(N)	5	1	10	490.0000

これが正しく動作するならば、allocate 文の使用は止める方が良いのだろうか？

allocate 文と shared 変数 allocate された配列が parallel region に、private 変数として宣言されなければ OK の様だ。

```

!$  USE OMP_LIB
      DIMENSION A(5)
      ALLOCATABLE X(:)
      N=10
      ALLOCATE (X(N))
      DO I=1,5; A(I)=I; X(I)=2*I; X(I+5)=3*I; END DO
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(A)
      DO I=1,10; ID=OMP_GET_THREAD_NUM()
      CALL SUBX(ID,I,A,N,X)
      WRITE(6,1)ID,I,N,A(1),X(N)
1  FORMAT('ID I N A(1) X(N)=',3I4,1P2E12.3)
      END DO
!$OMP END PARALLEL DO
      STOP; END
      SUBROUTINE SUBX(ID, I, A, N, X)
      DIMENSION A(5),X(N)
      DO J=1,5; A(J)=20-J; X(J)=100-J; X(J+5)=90-J; END DO
      IF(ID.LE.0)RETURN
      DO J=6,10;X(J)=-J; END DO
      RETURN; END

```

ID	I	N	A(1)	X(N)=	0	1	10	1.900E+01	8.500E+01
ID	I	N	A(1)	X(N)=	0	2	10	1.900E+01	8.500E+01
ID	I	N	A(1)	X(N)=	0	3	10	1.900E+01	8.500E+01
ID	I	N	A(1)	X(N)=	0	4	10	1.900E+01	8.500E+01
ID	I	N	A(1)	X(N)=	0	5	10	1.900E+01	8.500E+01
ID	I	N	A(1)	X(N)=	1	6	10	1.900E+01	-1.000E+01
ID	I	N	A(1)	X(N)=	1	7	10	1.900E+01	-1.000E+01
ID	I	N	A(1)	X(N)=	1	8	10	1.900E+01	-1.000E+01

```
ID I N A(1) X(N)= 1 9 10 1.900E+01 -1.000E+01
ID I N A(1) X(N)= 1 10 10 1.900E+01 -1.000E+01
```

呼び出し元では配列の大きさのみを指定し、下請け副プログラムで配列を宣言するのは便利であるが、利用可能な場合とそうでない場合がある。即ち、途中で記憶が壊れる経験をした。

ATOMIC と CRITICAL の動作比較

```
COMMON X; X=0; WRITE(6,5)
5 FORMAT('1st stage')
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(B)
DO I=1,1000; B=DOIT(I)
!$OMP ATOMIC; X=X+FOO(B); END DO
!$OMP END PARALLEL DO
X=0; WRITE(6,10)
10 FORMAT('2nd stage entered')
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(B,tmp)
DO I=1,1000; B=DOIT(I); tmp=FOO(B)
!$OMP CRITICAL; X=X+TMP
!$OMP END CRITICAL
END DO
!$OMP END PARALLEL DO
STOP; END
FUNCTION DOIT(I); COMMON X; IF((I/100)*100.EQ.I)WRITE(6,1)X,I
1 FORMAT('DOIT X=',1PE9.2,2X,'at I=',I5)
DOIT=X+I; RETURN; END
FUNCTION FOO(B); IF(B.GT.100)FOO=100; IF(B.LT.0)FOO=0;RETURN;END
```

後半の出力を右半分へ移した。

1st stage	2nd stage entered
DOIT X= 0.00E+00 at I= 100	DOIT X= 1.28E+04 at I= 100
DOIT X= 9.90E+03 at I= 200	DOIT X= 2.63E+04 at I= 200
DOIT X= 1.99E+04 at I= 300	DOIT X= 3.63E+04 at I= 300
DOIT X= 2.99E+04 at I= 400	DOIT X= 4.63E+04 at I= 400
DOIT X= 3.99E+04 at I= 500	DOIT X= 5.63E+04 at I= 500
DOIT X= 4.99E+04 at I= 600	DOIT X= 1.63E+04 at I= 600
DOIT X= 5.99E+04 at I= 700	DOIT X= 6.64E+04 at I= 700
DOIT X= 6.99E+04 at I= 800	DOIT X= 7.64E+04 at I= 800
DOIT X= 7.99E+04 at I= 900	DOIT X= 8.64E+04 at I= 900
DOIT X= 8.99E+04 at I= 1000	DOIT X= 9.64E+04 at I= 1000

共有記憶域での X の値が異なる事に注意！X の値により DOIT の値が異なり、その DOIT の値により X が値を変える。従って、I の値がどのように変化してするかという履歴により X の値が変化している。