

NOTIZEN

Zur Nukleon-Nukleon-S-Streuung**II. Der numerische Stabilitätstest**

H. DRUMM und E. TRÜBENBACHER

Institut für Physik der Universität Mainz

(Z. Naturforsch. 27 a, 860–861 [1972]; eingegangen am 28. März 1972)

*On Nucleon-Nucleon S-Scattering.**II. The Numerical Stability Test*

The numerical stability test is discussed which prevented the decision on the usefulness of a non-relativistic nucleon-nucleon potential of a previous paper, and this decision is finally accomplished by fulfilling the stability condition.

A. Einleitung

In dieser Arbeit wird abschließend über einen Versuch berichtet, die von BRYAN, DISMUKES und RAMSAY bzw. von BRYAN und SCOTT¹ für Drehimpulse $l \geq 1$ entwickelten OBEPs (One Boson Exchange Potentials) für die Nukleon-Nukleon-Wechselwirkung auf den Fall $l=0$ auszudehnen unter Zuhilfenahme eines einzigen fiktiven schweren Mesons zwecks möglichst einfacher Parametrisierung². Auf diese Weise sollte geprüft werden, inwieweit die Verwendung eines hard core umgangen werden kann.

Die vollständige Durchführung dieses Versuchs scheiterte ursprünglich an der Nichterfüllbarkeit eines Tests auf Stabilität der numerischen Integration der Triplett-S-Wellengleichungen, der die Unitarität der S-Matrix sichern sollte (bzw. bei Verwendung von Eigenphasen die Kompatibilität der entsprechenden Gleichungssysteme). Der Test verlangt, daß in jedem Augenblick der Integration für zwei linear unabhängige Lösungsvektoren $\begin{pmatrix} u_1 \\ w_1 \end{pmatrix}$ und $\begin{pmatrix} u_2 \\ w_2 \end{pmatrix}$ der radialen Wellengleichungen, die am Ursprung verschwinden,

$$\frac{u_1 u_2' - u_2 u_1'}{w_1 w_2' - w_2 w_1'} = -1$$

erfüllt ist.

Im folgenden soll kurz berichtet werden über die Ursache dieser Instabilität, deren Abhilfe und schließlich den Grad der Brauchbarkeit der so erreichten Parametrisierung der Nukleon-Nukleon-S-Streudaten.

B. Ursache der Stabilitätsschwierigkeiten

Als erstes ist festzustellen, daß die Wellenfunktion bei fortgesetzter Halbierung der Integrationsschrittweite am Ende des Integrationsintervalls stabilen Werten zustrebt, während Stabilitätstest und Phasen meist zufällige und daher bedeutungslose Werte annehmen. Bei Berechnung von Test und Phasen, die sich aus ähnlichen determinantenartigen Bildungen bestimmen wie

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. E. TRÜBENBACHER,
Institut für Physik der Universität Mainz, D-6500 Mainz,
Jakob-Welder-Weg 11.

der Test, treten Auslösungen von vielen Stellen auf. Ein von BÖRSCH-SUPAN³ vorgeschlagenes Verfahren deutet darauf hin, daß die Auslösungen auch bei Verwendung der exakten Wellenfunktionen an Stelle der numerisch bestimmten auftreten würden: Bei diesem Verfahren wird das realistische Potential durch ein vielstufiges l -abhängiges Treppenpotential approximiert. Jede Stufe stellt ein Kastenpotential dar, für das das System der radialen Wellengleichungen analytisch lösbar ist. Durch maschinell vorgenommenes Aneinanderfügen dieser exakten Lösungsstücke müßte sich, abgesehen von den Rundungsfehlern, prinzipiell eine exakte Lösung gewinnen lassen. Eine Abschätzung ergibt, daß diese nach 100 Stufen ($\approx 0,3$ fe) noch bis auf sieben oder acht Stellen exakt ist (bei 10-stelliger Arithmetik). Dennoch treten im Stabilitätstest meist Auslösungen von sieben und mehr Stellen auf. Die Auslösung scheint also eine problemeigene Erscheinung zu sein, die nicht durch das numerische Verfahren bedingt ist. Da die gebräuchlichen Computer (die Rechnungen wurden auf einer CD 3300 durchgeführt) mit zehn Dezimalstellen arbeiten, können die bei der Rechnung auftretenden Fehler auf Grund dieser Auslösung bis in die ersten Stellen der Zwischenergebnisse vorstoßen und produzieren dann zufällige Endergebnisse.

C. Abhilfe

Man hat es bei der Integration der Wellengleichung mit Fehlern von zweierlei Art zu tun, den systematischen Fehlern, die von der Diskretisierung herrühren, also den endlichen Integrationsschritten im numerischen Verfahren, und den Fortpflanzungsfehlern, die durch die endliche Stellenzahl jeder Rechenmaschine verursacht werden. Beide sind in dem Sinn komplementär, daß eine Verfeinerung der Diskretisierung eine Vergrößerung des Fortpflanzungsfehlers bedingt.

Was den Test anbelangt, dürfte der Diskretisierungsfehler von geringerer Bedeutung sein; denn die endliche Schrittweise bedeutet eine Ersetzung des exakten Potentials durch ein Stufenpotential, an der Unitarität der S-Matrix darf sich dadurch nichts ändern (wohl aber am Wert der Phasen). Es gilt also zuerst, den Fortpflanzungsfehler zu reduzieren.

Um die Schrittzahl möglichst klein zu halten, wurde ein von SARAFYAN⁴ angegebenes Runge-Kutta-Verfahren 7. Ordnung verwendet. Die Formeln sind in Tab. 1 zusammengestellt. Eine gegenüber dem Test stabile Integration war innerhalb der zehnstelligen Arithmetik nicht zu erreichen: es gelang nicht, in den Wellenfunktionen hinreichend viele relevante Stellen zu erhalten, so daß bei den Determinantenbildungen des Tests und der Phasen die Auslösungen unwirksam geblieben wären. Es blieb schließlich nichts anderes übrig, als auf die doppeltgenaue, 25-stellige Arithmetik zurückzugreifen, wie sie auf der CD 3300 in der Programmiersprache USASI-FORTRAN aufrufbar ist.

Damit ließen sich alle Parametersätze der Potentiale stabil integrieren.

Tab. 1. 7-th order 10-stage Runge-Kutta formula
(by D. SARAFYAN, Dept. of Mathematics LSU in New Orleans).

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= f(x, y), \\ x &= x_0, \quad y = y_0. \\ y_7(x_0 + h) &= y_0 + \frac{1}{17280} (751 k_0 + 3577 k_3 + 1323 k_4 \\ &\quad + 2989 k_5 + 2989 k_6 + 1323 k_7 + 3577 k_8 + 751 k_9) \\ \text{where} \\ k_0 &= h f(x_0, y_0), \\ k_1 &= h f(x_0 + \frac{4}{5}h, y_0 + \frac{4}{5}k_0), \\ k_2 &= h f(x_0 + \frac{9}{25}h, y_0 + \frac{9}{25}(k_0 + 3k_1)), \\ k_3 &= h f(x_0 + \frac{1}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}k_0 + 3k_2), \\ k_4 &= h f(x_0 + \frac{3}{2}h, y_0 + \frac{1}{2}(k_0 - 3k_2 + 4k_3)), \\ k_5 &= h f(x_0 + \frac{9}{2}h, y_0 + \frac{3}{2}k_0 + 3k_4), \\ k_6 &= h f(x_0 + \frac{4}{5}h, y_0 + \frac{2}{1727}(-101k_0 + 651k_3 - 477k_4 \\ &\quad + 449k_5)), \\ k_7 &= h f(x_0 + \frac{5}{2}h, y_0 + \frac{5}{6577}(-1881k_0 - 783k_2 \\ &\quad + 10352k_3 - 3414k_4 + 5122k_6)), \\ k_8 &= h f(x_0 + \frac{9}{5}h, y_0 + \frac{9}{2321850}(683663k_0 + 430650k_2 \\ &\quad - 2032615k_3 + 2208930k_4 + 385270k_5 - 740735k_6 \\ &\quad + 970137k_7)), \\ k_9 &= h f(x_0 + h, y_0 + \frac{1}{12175421}(-12175421k_0 - 11236050k_2 \\ &\quad + 62891430k_3 - 43488585k_4 - 9947140k_5 + 51099720k_6 \\ &\quad - 30879954k_7 + 13337100k_9)). \end{aligned}$$

Die benützten Runge-Kutta-Formeln.

D. Anpassung

Die 3S -Streudaten werden parametrisiert mit Hilfe der bar-Phasen⁵. In der Bezeichnung S_{11}^{js} für das S -Matrixelement zu Gesamtdrehimpuls J , Kanalspin S , einlaufendem bzw. auslaufendem Bahndrehimpuls l , l' haben wir also

$$\begin{aligned} S_{00}^{11} &= \cos 2 \varepsilon_1 \cdot e^{2i\delta_{21}}, \\ S_{02}^{11} &= i \sin 2 \varepsilon_1 \cdot e^{i(\delta_{01} + \delta_{21})}. \end{aligned}$$

Der Wert von δ_{21} ist praktisch unabhängig von den Quantenzahlen des fiktiven schweren Mesons, ja überhaupt von seiner Mitnahme im Potential: Diese Phase ist verantwortlich für den Übergang von $l=0$ auf $l=2$, wird also vom Innenbereich der Kräfte kaum beeinflusst.

Für δ_{01} und Mischungsparameter ε_1 war im besten Fall eine grobe qualitative Anpassung möglich, von einer Reproduktion der gemessenen Werte kann nicht die Rede sein. Die Ergebnisse sind in Abb. 1 bzw. 2 dargestellt, im Vergleich zu den experimentellen Werten⁶. Diese optimal noch erzielbare Anpassung ergab

sich mit einem fiktiven Vektormeson der Masse 10 fm^{-1} , Isospin 1, und den Kopplungen $g^2=80$, $g/f=-0.25$ (f = „magnetische“ Kopplungskonstante). Die übrigen gemäß I noch möglichen Parametersätze für das fiktive Meson erweisen sich als völlig unbrauchbar.

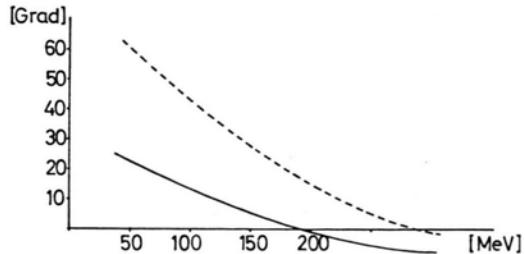


Abb. 1. Verlauf von δ_{01} ; ausgezogene Kurve = gerechnete Werte; gestrichelte Kurve = experimentelle Werte.

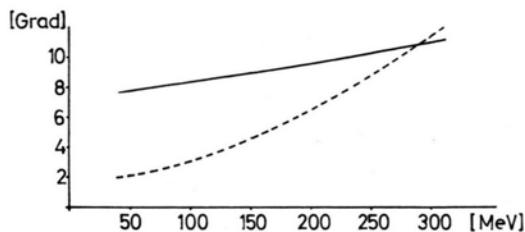


Abb. 2. Verlauf von ε_1 ; ausgezogene Kurve = gerechnete Werte; gestrichelte Kurve = experimentelle Werte.

E. Schlußbemerkungen

1. Das in I gesteckte Ziel, die von Bryan et al. an die Streudaten mit $l \geq 1$ angepaßten besonders einfachen, weil geschwindigkeitsunabhängigen OBEPs durch Hinzunahme eines schweren fiktiven Mesons zur Parametrisierung auch der S -Streuung brauchbar zu machen, hat sich als nicht erreichbar erwiesen. Es ist kaum vorstellbar, daß man sich in einem praktischen Fall mit einer so groben Annäherung, wie die Abbildung sie zeigt, begnügen kann. Der Vorteil der Einfachheit des Potentials scheint etwas zu teuer erkauft.

2. Was die numerische Bestimmung von Triplet-Streuphasen anbelangt, so möchten wir die Nachprüfung der Unität als unumgänglich betrachten. Auf Grund unserer Erfahrung scheint es durchaus möglich, daß sich trotz der gegenüber weiterer Halbierung der Integrationsschrittweite stabilen Wellenfunktionen Phasen ohne jegliche Signifikanz ergeben.

Herrn Prof. Dr. W. BÖRSCH-SUPAN und den Mitgliedern des Rechenzentrums der Universität Mainz möchten wir danken für ihre Unterstützung in numerischen Fragen und die Erfüllung zahlreicher Sonderwünsche.

¹ R. A. BRYAN, C. R. DISMUKES u. W. RAMSAY, Nucl. Phys. **45**, 353 [1963]. — R. A. BRYAN u. B. L. SCOTT, Phys. Rev. **135**, B 434 [1964].

² Dieser Versuch ist geschildert in: E. TRÜBENBACHER, Z. Naturforsch. **25a**, 1375 [1970] und soll im folgenden als I zitiert werden.

³ W. BÖRSCH-SUPAN, Institut für Angewandte Mathematik Mainz (mündliche Mitteilung).

⁴ D. SARAFYAN, Dept. of Mathematics, LSU in New Orleans (mündliche Mitteilung).

⁵ H. P. STAPP, T. J. YPSILANTIS u. M. METROPOLIS, Phys. Rev. **105**, 302 [1957].

⁶ M. H. MAC GREGOR, R. A. ARNDT u. R. M. WRIGHT, Phys. Rev. **182**, 1714 [1969].