

Anwendung der Padé-Approximation in der Kernphysik

K. ALDER, D. TRAUTMANN und R. D. VIOLLIER

Institut für Theoretische Physik der Universität Basel, Schweiz

(Z. Naturforsch. 28 a, 321–331 [1973]; eingegangen am 19. Oktober 1972)

KONRAD BLEULER zum 60. Geburtstag gewidmet

Application of the Padé Approximation in Nuclear Physics

It is shown that poorly converging series of Legendre polynomials or spherical harmonics can be well approximated by the method of the Padé approximation. The improvement of the convergence will be discussed with the help of three model series which can be calculated exactly.

I. Einleitung

In der Physik begegnet man häufig Reihen, die schlecht konvergieren. Da man aus verständlichen Gründen nicht immer beliebig viele Glieder der Reihe berechnen kann, ist man gezwungen, nach konvergenzverbessernden Methoden zu suchen. Mit wachsendem Erfolg verwendet man z. B. die in der Mathematik schon lange bekannte Padé-Approximation, die bei Potenzreihen zu einer entscheidenden Verbesserung der Konvergenz führt (siehe Refs. 1, 2 und alle dort weiter zitierten Originalarbeiten). Die Anwendung dieser Methode in der Physik beschränkte sich jedoch bisher auf die Hochenergiephysik^{1, 2} sowie auf die iterative Lösung von Integralgleichungen³. Das Padé-Verfahren ist jedoch nicht nur auf Potenzreihen beschränkt, sondern kann auf beliebige Orthogonalsysteme verallgemeinert werden⁴.

Auch in der Kernphysik trifft man Reihen an, die schlecht konvergieren. Beispiele hierfür sind die Elektronenstreuung^{5, 6}, die Coulomb-Anregung⁷ sowie Transferprozesse zwischen schweren Ionen unterhalb der Coulomb-Barriere⁸. Für diese Reihen, die im wesentlichen Entwicklungen nach Kugelfunktionen darstellen, hat man ebenfalls schon konvergenzverbessernde Verfahren vorgeschlagen^{5–8}, die auf der Anwendung der Rekursionsrelationen für Kugelfunktionen beruhen.

Im wesentlichen führen alle diese Methoden auf analytische Fortsetzungen über den Konvergenzbe- reich der ursprünglichen Reihe hinaus. Wir wollen nun zeigen, daß das frühere Rekursionsverfahren einer $[N, M]$ -Padé-Approximation ähnlich ist. Mit der $[N, M]$ -Padé-Approximation können jedoch, be-

sonders für kleine Streuwinkel, wesentlich bessere Resultate erreicht werden als mit dem Rekursionsverfahren.

Zu diesem Zweck geben wir in Kap. II das Padé-Approximationsverfahren für Kugelfunktionen an, zeigen Spezialfälle und vergleichen es mit dem Rekursionsverfahren. In Kap. III wenden wir dann das Verfahren auf 3 Modellreihen an:

- eine rein mathematische Reihe,
- die Streuamplitude für Rutherford-Streuung,
- die DWBA-Amplitude für die elastische Streuung eines geladenen Teilchens an einem Yukawa-Potential.

Schließlich werden die numerischen Resultate für diese drei Fälle diskutiert und verglichen.

II. Theorie

Wir leiten nun die Padé-Approximation für Reihen von Kugelfunktionen her. Es sei $f_m(\vartheta, \varphi)$ eine Amplitude, die nach Partialwellen entwickelt werden kann:

$$f_m(\vartheta, \varphi) = \sum_l c_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (1)$$

Wir können versuchen, $f_m(\vartheta, \varphi)$ auch durch den Quotienten

$$f_m(\vartheta, \varphi) = \frac{\sum_{l'm'} a_{l'm'} Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi)}{\sum_{\lambda\mu} b_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi)} \quad (2)$$

darzustellen. Wenn die Gln. (1) und (2) gleichzeitig erfüllt sind, muß

$$\sum_{l'm'} a_{l'm'} Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \sum_l c_{lm} Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \sum_{\lambda\mu} b_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi) \quad (3)$$

Sonderdruckanforderungen an Prof. Dr. K. ALDER, Institut für Theoret. Physik der Universität Basel, Basel/Schweiz.



Dieses Werk wurde im Jahr 2013 vom Verlag Zeitschrift für Naturforschung in Zusammenarbeit mit der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. digitalisiert und unter folgender Lizenz veröffentlicht: Creative Commons Namensnennung-Keine Bearbeitung 3.0 Deutschland Lizenz.

Zum 01.01.2015 ist eine Anpassung der Lizenzbedingungen (Entfall der Creative Commons Lizenzbedingung „Keine Bearbeitung“) beabsichtigt, um eine Nachnutzung auch im Rahmen zukünftiger wissenschaftlicher Nutzungsformen zu ermöglichen.

This work has been digitalized and published in 2013 by Verlag Zeitschrift für Naturforschung in cooperation with the Max Planck Society for the Advancement of Science under a Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Germany License.

On 01.01.2015 it is planned to change the License Conditions (the removal of the Creative Commons License condition "no derivative works"). This is to allow reuse in the area of future scientific usage.

gelten. Mit den Beziehungen⁹

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) Y_{\lambda\mu}(\vartheta, \varphi) = \sum_{LM} \sqrt{\frac{(2l+1)(2\lambda+1)(2L+1)}{4\pi}} \cdot \begin{pmatrix} l & \lambda & L \\ m & \mu & M \end{pmatrix} Y_{LM}^*(\vartheta, \varphi) \begin{pmatrix} l & \lambda & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4)$$

und

$$Y_{LM}^*(\vartheta, \varphi) = (-)^M Y_{L, -M}(\vartheta, \varphi) \quad (5)$$

erhalten wir sofort

$$\sum_{l'm'} a_{l'm'} Y_{l'm'}(\vartheta, \varphi) = \sum_{\substack{\lambda\mu \\ LM \\ l}} c_{lm} b_{\lambda\mu} \sqrt{\frac{(2l+1)(2\lambda+1)(2L+1)}{4\pi}} \cdot \begin{pmatrix} l & \lambda & L \\ m & \mu & M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \lambda & L \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} (-)^M Y_{L, -M}(\vartheta, \varphi). \quad (6)$$

Durch Koeffizientenvergleich ergibt sich eine lineare Beziehung für die Koeffizienten $a_{l'm'}$

$$a_{l'm'} = \sum_{\lambda} A_{\lambda\mu}^{l'm'} b_{\lambda\mu}, \quad (7)$$

mit

$$A_{\lambda\mu}^{l'm'} = (-)^{m'} \sqrt{\frac{(2l'+1)(2\lambda+1)}{4\pi}} \cdot \sum_l c_{lm} \sqrt{2l+1} \begin{pmatrix} l & \lambda & l' \\ m & \mu & -m' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \lambda & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Die φ -Abhängigkeit der Amplitude $f_m(\vartheta, \varphi)$ ist trivial:

$$f_m(\vartheta, \varphi) = e^{im\varphi} f_m(\vartheta, 0). \quad (9)$$

mit

$$A_{\lambda 0}^{l'm} = (-)^m \sqrt{\frac{(2l'+1)(2\lambda+1)}{4\pi}} \cdot \sum_l c_{lm} \sqrt{2l+1} \begin{pmatrix} l & \lambda & l' \\ m & 0 & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & \lambda & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8')$$

Brechen wir nun die Summation über λ in Gl. (2') und (7') z. B. bei $\lambda=1$ ab, so erhalten wir

$$a_{lm} = \frac{b_{00}}{\sqrt{4\pi}} c_{lm} + \sqrt{\frac{3}{4\pi}} b_{10} \cdot \left\{ \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} c_{l+1, m} + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} c_{l-1, m} \right\}. \quad (10)$$

Dieses Verfahren läßt sich mehrmals anwenden. Dann ergeben sich folgende Rekursionsrelationen:

$$a_{lm}^{(k)} = \frac{b_{00}^{(k-1)}}{\sqrt{4\pi}} a_{lm}^{(k-1)} + \sqrt{\frac{3}{4\pi}} b_{10}^{(k-1)} \left\{ \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} a_{l-1, m}^{(k-1)} + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} a_{l-1, m}^{(k-1)} \right\} \quad (k=1, \dots, N) \quad (11)$$

mit

$$a_{lm}^{(0)} = c_{lm}. \quad (12)$$

Die Amplitude (2') hat nach N Rekursionen folgende Form

$$f_m(\vartheta, 0) = \frac{\sum_l a_{lm}^{(N)} Y_{lm}(\vartheta, 0)}{\prod_{k=1}^N \left(\frac{b_{00}^{(k-1)}}{\sqrt{4\pi}} + b_{10}^{(k-1)} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \right)}. \quad (13)$$

Für $b_{00}^{(k-1)} = \sqrt{4\pi}$ und $b_{10}^{(k-1)} = -\sqrt{\frac{4}{3}\pi}$ ($k=1, \dots, N$) erhalten wir

$$a_{lm}^{(k)} = a_{lm}^{(k-1)} - \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} a_{l-1, m}^{(k-1)} - \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} a_{l+1, m}^{(k-1)} \quad (k=1, \dots, N) \quad (14)$$

Wir können uns somit auf die Untersuchung der Amplitude $f_m(\vartheta, 0)$ beschränken. Weiterhin können wir z. B. auch zur Vereinfachung $\mu=0$ wählen. Natürlich wäre auch eine andere Wahl von μ möglich. Gleichungen (1) und (2) nehmen dann die Form

$$f_m(\vartheta, 0) = \sum_l c_{lm} Y_{lm}(\vartheta, 0) \quad (1')$$

und

$$f_m(\vartheta, 0) = \sum_l a_{lm} Y_{lm}(\vartheta, 0) / \sum_l b_{\lambda 0} Y_{\lambda 0}(\vartheta, 0) \quad (2')$$

an. Für Gln. (7) und (8) erhalten wir

$$a_{l'm} = \sum_{\lambda} A_{\lambda 0}^{l'm} b_{\lambda 0} \quad (7')$$

und

$$f_m(\vartheta, 0) = \sum_l a_{lm}^{(N)} Y_{lm}(\vartheta, 0) / (1 - \cos \vartheta)^N. \quad (15)$$

Das sind gerade die Formeln, wie sie in Refs. 6-8 verwendet werden, dort jedoch mit Hilfe der Rekursionsrelation für Kugelfunktionen hergeleitet werden.

Viel interessanter ist jedoch der Fall, wo die Summation über λ in Gl. (2') und (7') erst bei $\lambda=M$ abgebrochen wird und die $b_{\lambda 0}$ nicht einfach vorgegeben, sondern aus einem linearen Gleichungssystem bestimmt werden. Wir fordern nämlich

$$a_{l'm} = 0 \quad (l' = M+1, \dots, M+N), \quad (16)$$

oder

$$\sum_{\lambda=0}^M A_{\lambda 0}^{l'm} b_{\lambda 0} = 0 \quad (l' = M+1, \dots, M+N). \quad (17)$$

Wenn wir nun z. B. $b_{00} = 1$ vorgeben, dann liefert Gl. (17) ein inhomogenes lineares Gleichungssystem mit N Unbekannten $b_{\lambda 0}$ ($\lambda = 1, \dots, N$):

$$\sum_{\lambda=0}^M A_{\lambda 0}^{l'm} b_{\lambda 0} = -A_{00}^{l'm} \quad (l' = M+1, \dots, M+N). \quad (18)$$

Dieses Gleichungssystem hat eine eindeutige Lösung, wenn die Determinante verschwindet:

$$\det A_{\lambda 0}^{l'm} = 0. \quad (19)$$

Mit Gl. (7') und (8') können wir dann aus den c_{lm} die a_{lm} bestimmen. Der Quotient *

$$[N, M] f_m(\vartheta, 0) = \sum_{l=0}^M a_{lm} Y_{lm}(\vartheta, 0) / \sum_{\lambda=0}^N b_{\lambda 0} Y_{\lambda 0}(\vartheta, 0) \quad (20)$$

heiße der verallgemeinerte $[N, M]$ -Padé-Approximant der Funktion $f_m(\vartheta, 0)$. Für $m=0$ erhalten wir speziell

$$[N, M] f_0(\vartheta, 0) = \sum_{l=0}^M a_l P_l(\cos \vartheta) / \sum_{\lambda=0}^N b_\lambda P_\lambda(\cos \vartheta), \quad (21)$$

$$f_0(\vartheta, 0) = \sum_{l=0}^{\infty} c_l P_l(\cos \vartheta), \quad (22)$$

$$a_l = \sum_{\lambda} A_{l\lambda} b_\lambda, \quad (23)$$

$$A_{l\lambda} = \sum_{i=|\lambda-\lambda|}^{l+\lambda} c_i (2l+1) \begin{pmatrix} l & \lambda & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2. \quad (24)$$

Die Koeffizienten des $[1, M]$ -Padé-Approximanten für Legendre-Reihen ergeben sich explizit zu

$$a_l = c_{l-1} b_1 \frac{l}{2l-1} + c_{l+1} b_1 \frac{l+1}{2l+3} + c_l b_0. \quad (25)$$

Auch hier läßt sich das Verfahren mehrmals anwenden. Wir erhalten folgende Rekursionsrelationen

$$a_l^{(k)} = a_{l-1}^{(k-1)} b_1^{(k-1)} \frac{l}{2l-1} + a_{l+1}^{(k-1)} b_1^{(k-1)} \frac{l+1}{2l+3} + a_l^{(k-1)} b_0^{(k-1)} \quad (k = 1, \dots, N), \quad (26)$$

mit $a_l^{(0)} = c_l. \quad (27)$

Die Amplitude hat nach N Rekursionen folgende Form:

$$f_0(\vartheta, 0) = \sum_{l=0}^M a_l^{(N)} P_l(\cos \vartheta) / \prod_{k=1}^N (b_0^{(k-1)} + b_1^{(k-1)} \cos \vartheta). \quad (28)$$

Für $b_0^{(k-1)} = 1$ und $b_1^{(k-1)} = -1$ ($k = 1, \dots, N$) erhalten wir:

$$a_l^{(k)} = -a_{l-1}^{(k-1)} \frac{l}{2l-1} - a_{l+1}^{(k-1)} \frac{l+1}{2l+3} + a_l^{(k-1)} \quad (29)$$

$(k = 1, \dots, N)$

und

$$f_0(\vartheta, 0) = \sum_{l=0}^M a_l^{(N)} P_l(\cos \vartheta) / (1 - \cos \vartheta)^N. \quad (30)$$

Gleichungen (29) und (30) sind gerade die Ausdrücke, die in ⁵ angegeben werden.

Wir werden uns im folgenden der Einfachheit halber mit der Anwendung der Padé-Approximation auf Legendre-Reihen beschränken, da $m \neq 0$ keine wesentlichen neuen Aspekte liefert.

III. Numerische Resultate und Diskussion

Als erstes numerisches Beispiel betrachten wir die Modellreihe [siehe Ref. ¹⁰, Band 2, Seite 182]

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^{n+1}}{n+1} P_n(\cos \vartheta) = \log \frac{t - \cos \vartheta + \sqrt{t^2 - 2t \cos \vartheta + 1}}{1 - \cos \vartheta} \quad (31)$$

mit $|t| \leq 1$.

Für den ungünstigsten Fall $t = 1$ erhalten wir daraus sofort:

$$f(\vartheta) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{n+1} \right) P_n(\cos \vartheta) = \log \left(1 + \sqrt{\frac{2}{1 - \cos \vartheta}} \right). \quad (32)$$

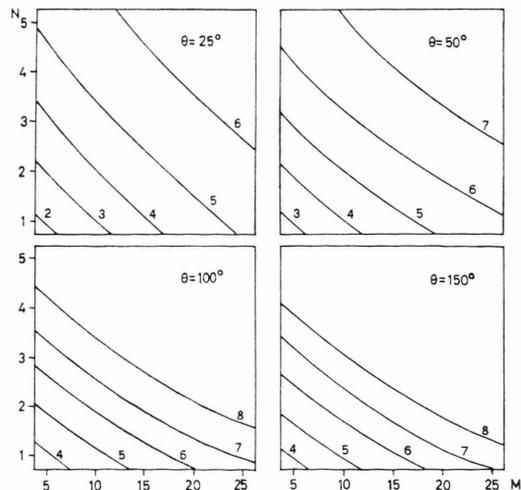


Abb. 1. Die Genauigkeit $a(N, M)$ der $[N, M]$ -Padé-Approximation für die erste Modellreihe für 4 verschiedene Winkel.

* Unsere Definition unterscheidet sich von der üblichen ^{1, 2} darin, daß N und M vertauscht sind.

In Abb. 1 haben wir die Genauigkeit der Padé-Approximation

$$a(N, M) = -^{10}\log \left| \frac{[N, M] f(\vartheta) - f(\vartheta)}{f(\vartheta)} \right| \quad (33)$$

als Funktion von N und M aufgezeichnet. Die Darstellung erfolgt in Form von Genauigkeitshöhenkurven für vier verschiedene Winkel, wobei die Kurven Mittelwerte von benachbarten Genauigkeitswerten darstellen. Dieser sehr einfache Fall zeigt die Konvergenzverbesserung, die durch die Anwendung der $[N, M]$ -Padé-Approximation erreicht werden kann. Weiter sieht man, wie die Genauigkeit der Padé-Approximation mit abnehmendem Winkel schlechter wird. Die Abszisse $N=0$ stellt gerade die Aufsummierte der ursprünglichen Reihe dar. Ferner sollte noch berücksichtigt werden, daß für die $[N, M]$ -Padé-Approximation $M+2N$ Glieder benötigt werden.

Als nächstes Beispiel wählen wir den Fall der elastischen Streuung von geladenen Teilchen im Coulomb-Feld (Rutherford-Streuung). Die Streuamplitude für diesen Prozeß ist proportional zu folgender Amplitude:

$$g(\eta, \vartheta) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{2i\omega_l(\eta)\} P_l(\cos \vartheta), \quad (34)$$

wo η der Coulomb-Parameter

$$\eta = e^2 Z_1 Z_2 m / \hbar^2 k \quad (35)$$

mit

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m, \quad (36)$$

und $\omega_l(\eta)$ die gewöhnliche Coulomb-Streuphase ist:

$$\omega_l(\eta) = \sum_{\lambda=1}^l \arctan(\eta/\lambda). \quad (37)$$

Der exakte Wert der Reihe ist gegeben durch:

$$g(\eta, \vartheta) = \frac{8\pi\eta \exp\{-i\eta \log[(1-\cos \vartheta)/2]\}}{1-\cos \vartheta}. \quad (38)$$

In Abb. 2 haben wir wiederum die Genauigkeit des Realteils nach $[N, M]$ -Padé-Approximation

$$a(N, M) = -^{10}\log \left| \frac{[N, M] \operatorname{Re} g(\eta, \vartheta) - \operatorname{Re} g(\eta, \vartheta)}{\operatorname{Re} g(\eta, \vartheta)} \right| \quad (39)$$

für $\eta=10$ aufgetragen. Wie man aus der Darstellung sieht, müssen N und M wesentlich größer als im ersten Fall gewählt werden, um dieselbe Genauigkeit zu erreichen, aber auch hier erhalten wir eine

wesentliche Verbesserung der Konvergenz gegenüber der ursprünglichen Reihe.

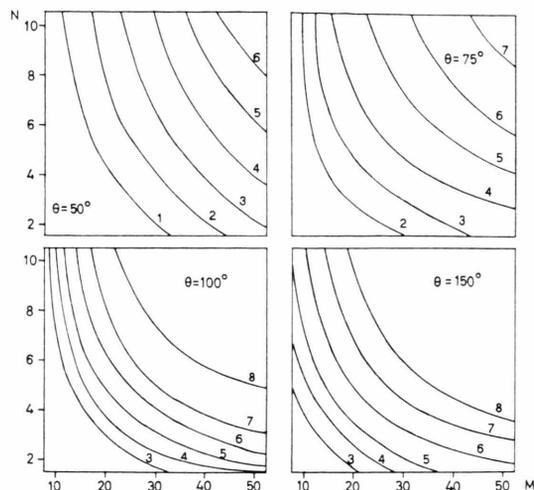


Abb. 2. Die Genauigkeit $a(N, M)$ der $[N, M]$ -Padé-Approximation für den Realteil der zweiten Modellreihe mit $\eta=10$ für 4 verschiedene Winkel.

Als drittes Beispiel schließlich wählen wir die DWBA-Amplitude für die Streuung eines geladenen Teilchens in einem Yukawa-Potential

$$T_{\alpha\beta} = k_\alpha k_\beta \langle \chi^{(-)}(\eta_\alpha, \mathbf{k}_\alpha \mathbf{r}) | \frac{e^{-\mu r}}{r} | \chi^{(+)}(\eta_\beta, \mathbf{k}_\beta \mathbf{r}) \rangle, \quad (40)$$

wobei $\chi^{(\pm)}(\eta, \mathbf{k} \mathbf{r})$ eine Coulomb-Welle ist:

$$\chi^{(\pm)}(\eta, \mathbf{k} \mathbf{r}) = \exp\{-\frac{1}{2}\pi\eta\} | \Gamma(1+i\eta) | \cdot \exp\{i\mathbf{k} \mathbf{r}\} {}_1F_1(\mp i\eta; 1; \pm i(kr \mp \mathbf{k} \mathbf{r})). \quad (41a)$$

Der Grund für die Wahl dieses Matrixelementes liegt einerseits darin, daß sowohl das Integral (40) als auch die bei der Partialwellenentwicklung entstehenden Integrale^{8, 11} geschlossen gelöst werden können. Das macht natürlich die numerische Untersuchung dieses Falles besonders übersichtlich und einfach. Andererseits kann bei allen Streuproblemen der Kernphysik im allgemeinen der schnell konvergierende Einfluß der Kernwechselwirkung absepariert werden, so daß in allen anderen Fällen Ausdrücke entstehen, die dem obigen (40) sehr ähnlich und in ihrer mathematischen Struktur äquivalent sind⁵⁻⁸.

Obwohl der Fall der inelastischen Streuung (40) keine weiteren Schwierigkeiten bereitet, wollen wir uns der Einfachheit halber auf den Fall der elastischen Streuung mit $k_\alpha = k_\beta = k$ und $\eta_\alpha = \eta_\beta = \eta$ beschränken, da die Behandlung der inelastischen Prozesse keinerlei neue Erkenntnisse bringt.

Wir erhalten somit

$$T(\eta, p, \vartheta) = \frac{8 \pi^2 \eta}{e^{2\pi\eta} - 1} \frac{1}{p^2} \left(\frac{1 - i/p}{1 + \sin^2(\vartheta/2)/p^2} \right)^{2i\eta} \cdot \frac{1}{1 + \sin^2(\vartheta/2)/p^2} \cdot {}_2F_1(-i\eta, -i\eta; 1; -\sin^2(\vartheta/2)/p^2), \quad (41 \text{ b})$$

mit $p = \mu/2k$.

Entwickeln wir, wie üblich, die Coulomb-Welle (41) nach Kugelfunktionen und integrieren über den Raumwinkel, so erhalten wir für (41)

$$T(\eta, p, \vartheta) = 4 \pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\{2i\omega_l(\eta)\} \cdot R_l(\eta, p) P_l(\cos \vartheta), \quad (42)$$

mit dem radialen Integral

$$R_l(\eta, p) = \int_0^{\infty} F_l^2(\eta, kr) e^{-\mu r/r} dr, \quad (43)$$

wobei $F_l(\eta, kr)$ die reguläre Coulomb-Funktion ist. Dieses radiale Integral kann ebenfalls geschlossen angegeben werden. Durch geeignete analytische Fortsetzungen können dann sowohl (41) als auch (43) einfach berechnet werden (s. Appendix 1–3).

In Abb. 3 zeigen wir die ϑ -Abhängigkeit der Größe

$$a(N, M) = -{}^{10}\log \left| \frac{[N, M] \operatorname{Im} T(\eta, p, \vartheta) - \operatorname{Im} T(\eta, p, \vartheta)}{\operatorname{Im} T(\eta, p, \vartheta)} \right| \quad (44)$$

als Funktion von N und M für $\eta = 20$ und $p = 0,005$. In Abb. 4 ist die η -Abhängigkeit der Größe

$$a(N, M) = -{}^{10}\log \left| \frac{[N, M] \operatorname{Re} T(\eta, p, \vartheta) - \operatorname{Re} T(\eta, p, \vartheta)}{\operatorname{Re} T(\eta, p, \vartheta)} \right| \quad (45)$$

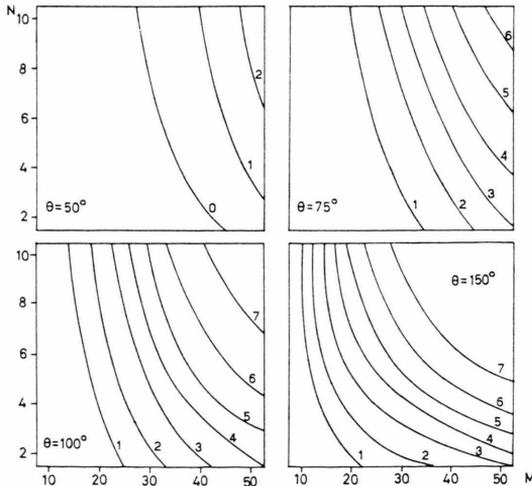


Abb. 3. Die Genauigkeit $a(N, M)$ der $[N, M]$ -Padé-Approximation für den Imaginärteil der dritten Modellreihe mit $\eta = 20$ und $p = 0,005$ für 4 verschiedene Winkel.

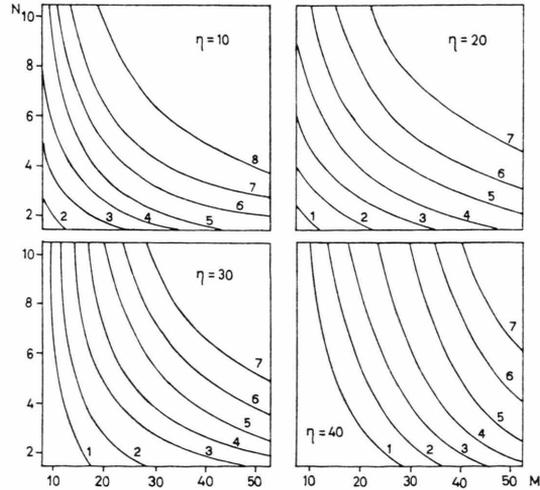


Abb. 4. Die Genauigkeit $a(N, M)$ der $[N, M]$ -Padé-Approximation für den Realteil der dritten Modellreihe mit $\vartheta = 150^\circ$ und $p = 0,005$ für 4 verschiedene Winkel.

für $\vartheta = 150^\circ$ und $p = 0,005$ aufgezeichnet. Wie man sieht, wird auch hier die Genauigkeit für kleine ϑ und große η schlechter, obwohl wir wiederum eine wesentliche Konvergenzverbesserung erreichen.

In Abb. 5 haben wir schließlich die Teilsummen für die $[N, M]$ -Padé-Approximation – angewendet auf den Imaginärteil der letzten Modellreihe – die definiert sind durch

$$\operatorname{Im} S_l = \frac{\sum_{m=0}^l a_m P_m(\cos \vartheta)}{\sum_{n=0}^N b_n P_n(\cos \vartheta)} \quad (46)$$

für verschiedene N aufgetragen. M wird hierbei konstant ($M = 30$) gehalten. Wie aus der Abbildung ersichtlich ist, strebt der Wert der $[N, M]$ -Padé-App-

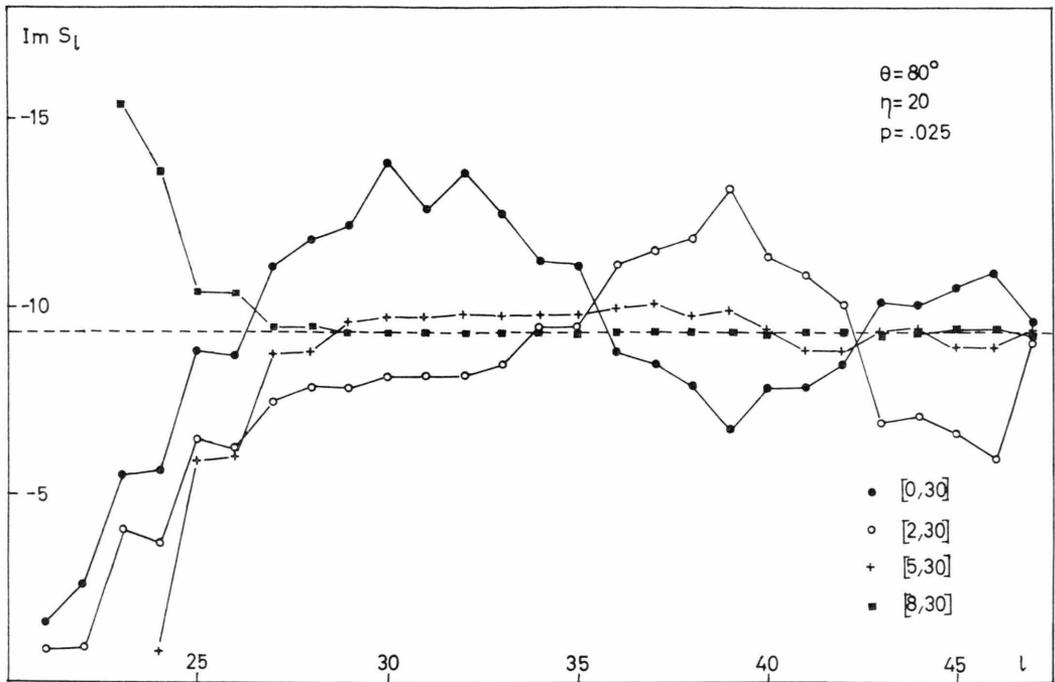


Abb. 5. Die Teilsummen S_l der $[N, M]$ -Padé-Approximation für den Imaginärteil der dritten Modellreihe mit $\vartheta=80^\circ$, $\eta=20$ und $\rho=0.025$.

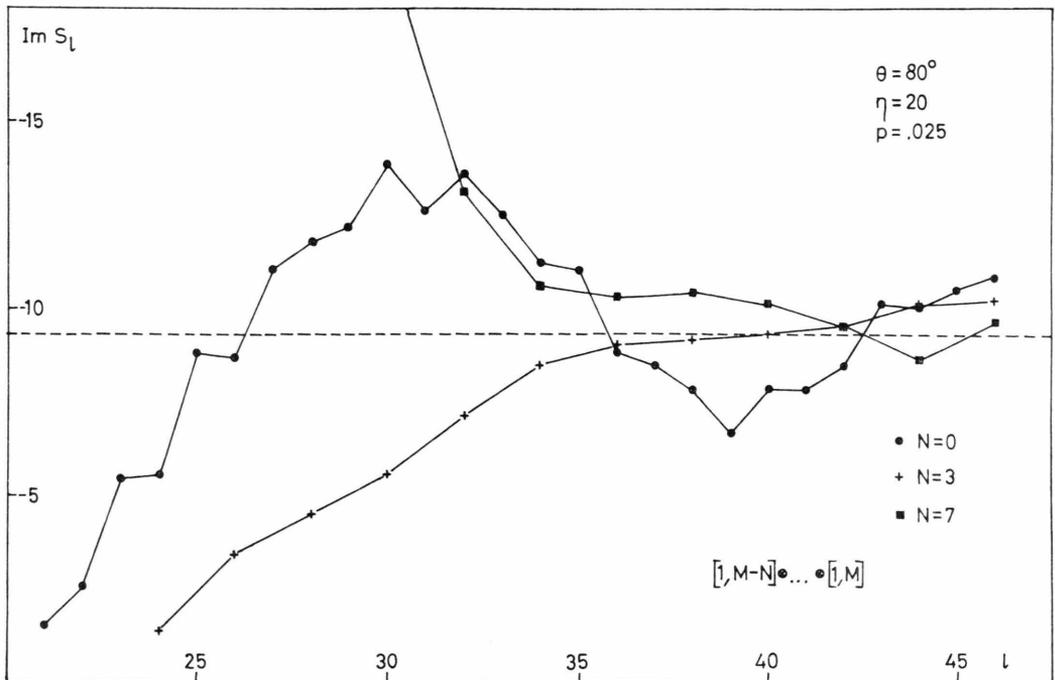


Abb. 6. Die Teilsumme S_l für die N -fach angewendete $[1, M]$ -Padé-Approximation.

proximation Im S_M mit zunehmendem N sehr schnell gegen den Grenzwert. Weiterhin sieht man, daß vom Glied $l=M$ an, N Glieder der Reihe Null werden, was ein guter Test für die numerische Stabilität der Methode ist. Der Fehler der Padé-Approximation ist dann von der Größenordnung des nächsten von Null verschiedenen Gliedes.

Wir wollen nun für denselben Parametersatz ($\vartheta = 80^\circ$, $\eta = 20$, $p = 0,025$) eine Approximation testen, die durch mehrmalige Anwendung der $[1, M]$ -Padé-Approximation zustande kommt. Wir wenden nämlich auf unsere Reihe nacheinander zuerst die $[1, M]$ -, dann die $[1, M-1]$ -, bis zur $[1, M-N]$ -Padé-Approximation an:

$$[1, M-N] \otimes [1, M-N+1] \otimes \dots \otimes [1, M] \text{ Im } T(\eta, p, \vartheta). \quad (47)$$

In Abb. 6 haben wir die Größe

$$\text{Im } S_l = \frac{\sum_{m=0}^l a_m P_m(\cos \vartheta)}{\prod_{n=1}^N (b_0^{(n-1)} + b_1^{(n-1)} \cdot \cos \vartheta)}, \quad (48)$$

die durch Anwenden dieser Vorschrift entsteht, für $M=35$ aufgetragen. Dabei erweist sich diese Methode als nicht besonders geeignet. Erst wenn man M größer wählt, ergibt sich eine wesentliche Konvergenzverbesserung. Dabei zeigt sich jedoch, daß für die Koeffizienten in (48) gilt:

$$b_1^{(k)}/b_0^{(k)} \cong -1, \quad (k=0, 1, \dots, N). \quad (49)$$

Somit ist dieses Verfahren jedoch nahezu identisch mit dem Rekursionsverfahren, bei dem $b_1^{(k)}/b_0^{(k)} \equiv -1$ gewählt wird. Diesen Fall haben wir in Abb. 7 dargestellt. Die Konvergenzverbesserung ist hier nur wenig schlechter als bei der $[N, M]$ -Padé-Approximation. Wählt man jedoch für $b_1^{(k)}/b_0^{(k)}$ einen anderen Wert, so wird das Rekursionsverfahren numerisch sehr schnell instabil, wie in Abb. 8 z. B. für $b_1^{(k)}/b_0^{(k)} = +1$ gezeigt wird. In diesem Fall kann keine Konvergenzverbesserung erreicht werden. Dies hängt damit zusammen, daß im Fall $b_1^{(k)}/b_0^{(k)} = -1$ die Rekursionsrelation asymptotisch folgende Form annimmt:

$$a_l^{(k)} \cong a_l^{(k-1)} - \frac{1}{2} (a_{l-1}^{(k-1)} + a_{l+1}^{(k-1)}), \quad \text{für } l \rightarrow \infty. \quad (50)$$

Wenn nun $a_l^{(k-1)}$ als Funktion von l nicht zu stark variiert, können wir $a_{l\pm 1}^{(k)}$ nach Taylor entwickeln:

$$a_{l\pm 1}^{(k)} = a_l^{(k)} \pm \frac{(a_l^{(k)})'}{1!} \pm \frac{(a_l^{(k)})''}{2!} \pm \dots \quad (51)$$

Damit ergibt sich für $a_l^{(k)}$:

$$a_l^{(k)} \cong \frac{1}{2!} (a_l^{(k-1)})'' + \frac{1}{4!} (a_l^{(k-1)})^{(4)} + \dots, \quad (52)$$

so daß im neuen Koeffizienten nur noch höchstens die 2. Ableitung vorkommt. Dies führt nun natürlich fast immer zu einer Konvergenzverbesserung, während eine ähnliche Überlegung für $b_1^{(k)}/b_0^{(k)} \neq -1$ nicht mehr möglich ist.

Daß jedoch das obige Rekursionsverfahren von der $[N, M]$ -Padé-Approximation grundsätzlich verschieden ist, kann man leicht sehen, wenn wir das Nennerpolynom der Padé-Approximation in Gl. (21) in Linearfaktoren zerlegen:

$$\sum_{\lambda=0}^N b_\lambda P_\lambda(\cos \vartheta) = \prod_{i=1}^N (b_0^{(i-1)} + b_1^{(i-1)} \cdot \cos \vartheta). \quad (53)$$

Dies läßt sich einfach durchführen, wenn wir in (53) für das Legendre-Polynom einsetzen:

$$P_\lambda(\cos \vartheta) = \sum_{s=0}^{[\lambda/2]} (-)^s \frac{(2\lambda - 2s)!}{2^\lambda s! (\lambda - s)! (\lambda - 2s)!} \cdot (\cos \vartheta)^{\lambda - 2s}. \quad (54)$$

Bestimmt man nun bei gegebenen b_λ numerisch die Nullstellen des so entstandenen Polynoms in $\cos \vartheta$, so erhält man damit sofort die gewünschten $b_0^{(i-1)}$ und $b_1^{(i-1)}$. Dieses Verfahren auf die obigen Fälle angewendet, ergibt nun für die Koeffizienten $b_0^{(i-1)}$, $b_1^{(i-1)}$ nicht nur reelle Werte, sondern auch paarweise konjugiert komplexe Werte, im Gegensatz zu den rein reell gewählten Koeffizienten beim Rekursionsverfahren und der mehrfach angewendeten $[1, M]$ -Padé-Approximation.

IV. Schlußfolgerung

Wie wir aus den obigen Beispielen, die nur eine kleine typische Auswahl der gerechneten Fälle darstellen, gesehen haben, führt die $[N, M]$ -Padé-Approximation immer zu einer wesentlichen Konvergenzverbesserung, wenn man sie auf die Streuamplitudenreihen der Kernphysik anwendet. Aber auch das schon früher verwendete Rekursionsverfahren führt bei großen Streuwinkeln zu einer nahezu gleich guten Konvergenzverbesserung. Da dieses Verfahren zudem numerisch sehr viel einfacher zu handhaben ist, ist es für $\vartheta \gtrsim 100^\circ$ der $[N, M]$ -Padé-Approximation vorzuziehen. Die Situation ändert sich jedoch sehr schnell, wenn man zu kleinen Streuwinkeln übergeht. Wie in Abb. 9 für $p = 0,005$ und $\eta = 10$

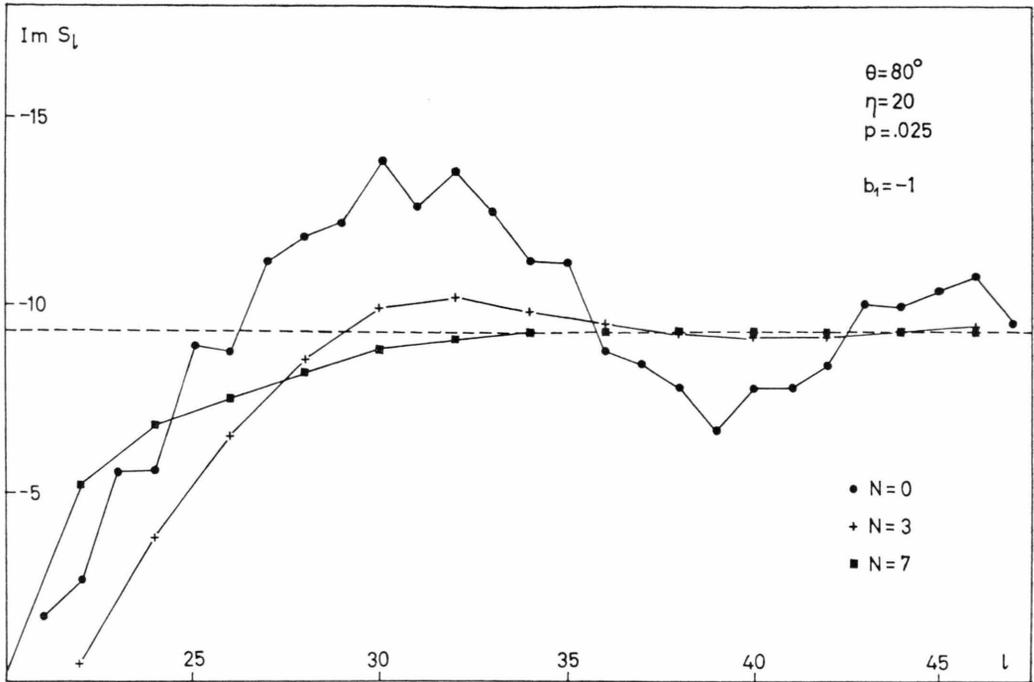


Abb. 7. Die Teilsumme S_l für das Rekursionsverfahren mit $b_1^{(k)}/b_0^{(k)} = -1$.

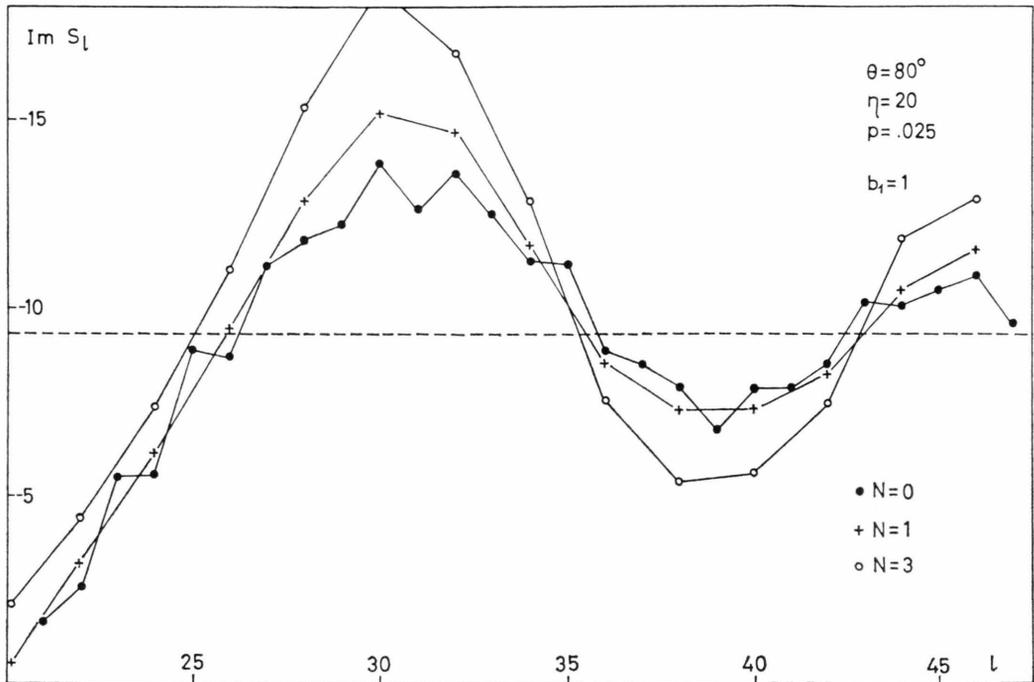


Abb. 8. Die Teilsumme S_l für $b_1^{(k)}/b_0^{(k)} = +1$.

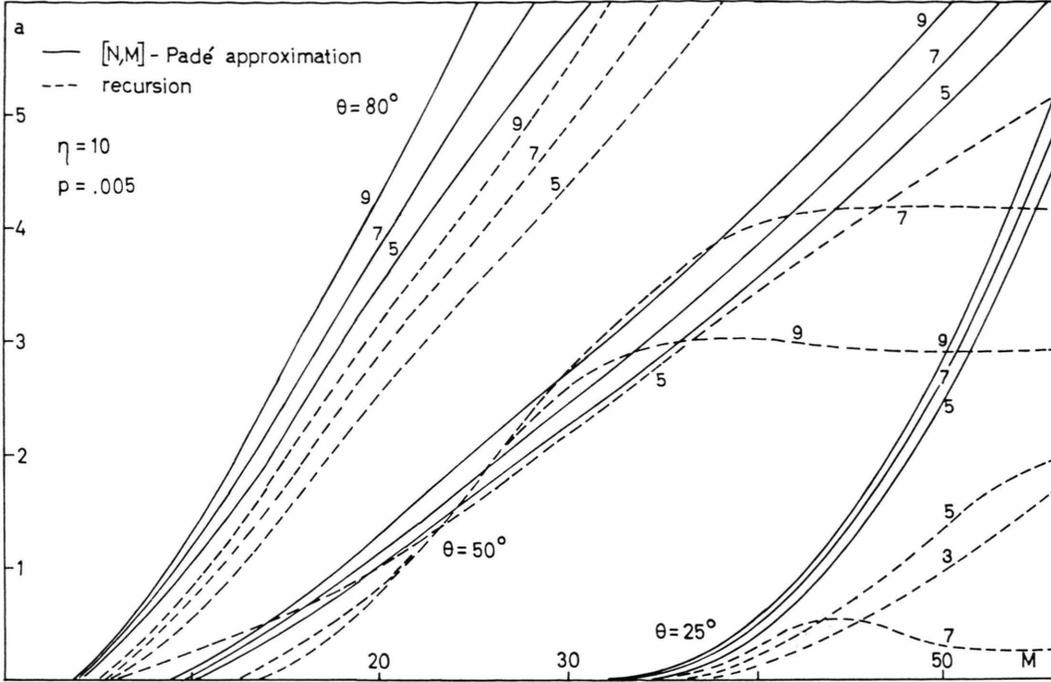


Abb. 9. Vergleich der erreichten Genauigkeit der Teilsummen bei der $[N, M]$ -Padé-Approximation und dem Rekursionsverfahren (N Rekursionsschritte) für verschiedene Winkel; $\eta=10$ und $p=0.005$.

gezeigt wird, beginnt dann das Rekursionsverfahren sehr rasch numerisch instabil zu werden und liefert keine oder nur eine geringe Konvergenzverbesserung. Dagegen kann die $[N, M]$ -Padé-Approximation auch in diesen Fällen ohne große Schwierigkeiten angewendet werden und führt gerade hier zu einer erheblichen Konvergenzverbesserung gegen-

über der sehr schlecht konvergierenden ursprünglichen Reihe.

Appendix

1. Berechnung des DWBA-Matrixelementes

Für das DWBA-Matrixelement (40) erhält man nach Spezialisierung auf den Fall der elastischen Streuung¹¹:

$$T(\eta, p, \vartheta) = \frac{8 \pi^2 \eta}{e^{2\pi\eta} - 1} \left(\frac{1 - i/p}{1 + \sin^2(\vartheta/2)/p^2} \right)^{2i\eta} \frac{1}{p^2 + \sin^2(\vartheta/2)} {}_2F_1(-i\eta, -i\eta; 1; -\sin^2(\vartheta/2)/p^2). \quad (\text{A } 1)$$

Nach kurzer Umformung erhalten wir hieraus:

$$T(\eta, p, \vartheta) = \frac{\pi^2 \eta}{\sinh \pi \eta} \frac{\exp\{-2\eta \arctan p\}}{p^2 + \sin^2(\vartheta/2)} \exp\left\{2i\eta \log \frac{p \sqrt{p^2 + 1}}{p^2 + \sin^2(\vartheta/2)}\right\} {}_2F_1(-i\eta, -i\eta; 1; -\zeta), \quad (\text{A } 2)$$

$$\text{mit} \quad \zeta = \sin^2(\vartheta/2)/p^2. \quad (\text{A } 3)$$

Da wir diesen Ausdruck für große η und kleine p berechnen wollen, müssen wir eine geeignete analyti-

sche Fortsetzung für die hypergeometrische Funktion benutzen, die in diesem Fall auf ψ -Funktionen führt (siehe Ref. ¹⁰, Band 1, Seite 10). Somit erhalten wir endgültig:

$$T(\eta, p, \vartheta) = (\pi \eta / [p^2 + \sin^2(\vartheta/2)]) \exp\{-2\eta \arctan p\} \exp\{i\Phi\} \sum_{n=0}^{\infty} (-\zeta)^{-n} ((-i\eta)_n / n!)^2 \{\log \zeta + 2\psi(n+1) - 2\psi(-i\eta+n) - i(\pi/2) \sinh 2\pi\eta / \sinh^2 \pi\eta\}, \quad (\text{A } 4)$$

$$\Phi = -(\pi/2) + 2\eta \log [\sin(\vartheta/2) \sqrt{1+p^2} / (p^2 + \sin^2(\vartheta/2))]. \quad (\text{A } 5)$$

Φ geht für $p \rightarrow 0$ in die bekannte „Rutherford-Phase“ über:

$$\Phi_{\text{Ruth.}} = -(\pi/2) - 2\eta \log \sin(\vartheta/2). \quad (\text{A } 6)$$

Benutzt man in (A 4) noch die Rekursionsrelationen für die ψ -Funktionen, so läßt sich das DWBA-Matrixelement sehr schnell und einfach berechnen.

2. Direkte Berechnung der radialen DWBA-Integrale

Für die radialen Integrale

$$R_l(\eta, p) = \int_0^\infty dr F_l^2(\eta, kr) e^{-\mu r}/r \quad (\text{A } 7)$$

$$R_l(\eta, p) = \frac{1}{4} \exp\{-2\eta \arctan p\} \frac{1}{(1+p^2)^{l+1}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|(l+1+i\eta)_n|^2}{n!^2} \left(\frac{p^2}{1+p^2}\right)^n \cdot \left\{ 2\psi(n+1) - 2\operatorname{Re} \psi(n+l+1+i\eta) - \log \frac{p^2}{1+p^2} \right\}. \quad (\text{A } 9)$$

Damit ist die numerische Berechnung der radialen Integrale für nicht zu große l und η ermöglicht. Für $l, \eta \gg 1$ dagegen ist auch mit (A 9) aus numerischen Gründen die Berechnung der Integrale nicht mehr möglich, so daß wir für diese Fälle nach geeigneteren Möglichkeiten zur Berechnung von (A 7) suchen müssen.

3. Rekursive Berechnung der radialen Integrale

Nach Ref. ⁸ ergibt sich für die radialen Integrale (A 7) die folgende Rekursionsrelation:

$$l((l+1)^2 + \eta^2) R_{l+1}(\eta, p) = (2l+1) \{l(l+1)(1+2p^2) + \eta^2\} R_l(\eta, p) - (l+1)(l^2 + \eta^2) R_{l-1}(\eta, p). \quad (\text{A } 10)$$

Benutzt man nun die nach (A 9) berechneten Matrixelemente $R_0(\eta, p)$ und $R_1(\eta, p)$ als Startwerte und rekuriert in l nach oben, so ergibt sich schon nach wenigen Schritten eine numerische Instabilität, die die weitere Berechnung der radialen Integrale unmöglich macht. Wir benutzen daher ein anderes Verfahren:

Wir starten bei großen l -Werten mit approximativen Werten für das radiale Integral und rekuriert zu kleinen l -Werten hinunter. Wie sich numerisch zeigt, und weiter unten dargelegt wird, ist dieses Verfahren außerordentlich stabil. Hierbei werden jedoch, da ja approximative Startwerte benutzt werden, die radialen Integrale nur bis auf eine gemein-

erhalten wir mit Ref. ⁸ nach einfacher Spezialisierung:

$$R_l(\eta, p) = \frac{1}{4} \frac{|F(l+1+i\eta)|^2}{(2l+1)!} \cdot \exp\{-2\eta \arctan p\} \frac{1}{(1+p^2)^{l+1}} \cdot {}_2F_1\left(l+1+i\eta, l+1-i\eta; 2l+2; \frac{1}{1+p^2}\right). \quad (\text{A } 8)$$

Auch hier ist es notwendig, für $p \ll 1$ eine analytische Fortsetzung für die hypergeometrische Funktion zu wählen, die nach kurzer Rechnung zu folgendem Ausdruck führt:

same Normierungskonstante bestimmt (s. u.). Diese kann nun durch Vergleich von $R_0^{\text{rek.}}(\eta, p)$ mit dem nach (A 9) berechneten Wert von $R_0(\eta, p)$ sehr einfach bestimmt werden, womit alle gewünschten radialen Integrale bekannt sind.

Als Startwerte für $R_l(\eta, p)$ für große Werte von l ergeben sich zwei Möglichkeiten:

Benutzt man in (A 8) den asymptotischen Wert für die hypergeometrische Funktion, so erhält man ¹²:

$$R_l(\eta, p) \cong \frac{1}{2} \cdot \exp\{-2\eta \arctan p\} \sqrt{\frac{\pi}{l+1}} \nu^{-l} \frac{1}{\sqrt{\nu^2-1}}, \quad (\text{A } 11)$$

$$\text{mit} \quad \nu = (p + \sqrt{1+p^2})^2. \quad (\text{A } 12)$$

Diese Werte sind insbesondere für $l \gg \eta > 1$ geeignet. Ist $l \cong \eta \gg 1$, so benutzt man besser die halbklassische Approximation der radialen Integrale, die entsteht, wenn man die exakten Coulomb-Funktionen in (A 7) durch ihre WKB-Näherungen ersetzt. Mit ⁸ und ¹² erhält man damit:

$$R_l(\eta, p) \cong (e^{-2p\eta/2}) K_0(2p\sqrt{\eta^2+l(l+1)}), \quad (\text{A } 13)$$

wo K_0 die nullte Bessel-Funktion dritter Art ist. Mit (A 11) und (A 13) haben wir hiermit für alle vorkommenden Fälle geeignete Startelemente gefunden.

Wir wollen nun noch zeigen, warum unsere gewählte Rekursionsmethode numerisch so stabil ist: Schreibt man Gl. (A 10) in der Form

$$R_l(\eta, p) = m_l(\eta, p) R_{l+1}(\eta, p) + n_l(\eta, p) R_{l+2}(\eta, p), \quad (\text{A } 14)$$

wobei $m_l(\eta, p)$ und $n_l(\eta, p)$ die aus (A 10) gegebenen Funktionen sind, und benutzt

$$\lim_{l \rightarrow \infty} m_l(\eta, p) = \text{konst.} \equiv m, \\ \text{ sowie } \lim_{l \rightarrow \infty} n_l(\eta, p) = \text{konst.} \equiv n, \quad (\text{A } 15)$$

so läßt sich Gl. (A 14) für $l \gg 1$ mit dem Ansatz

$$R_l = c \cdot e^{al} \quad (\text{A } 16)$$

erfüllen.

Einsetzen liefert:

$$\alpha_{1,2} = \log \left(\frac{-m \pm \sqrt{m^2 + 4n}}{2n} \right). \quad (\text{A } 17)$$

In unserem Fall gilt speziell:

$$\alpha_{1,2} = \log \left((1 + 2p^2) \pm 2p\sqrt{1 + p^2} \right), \quad (\text{A } 18)$$

d. h. $\alpha_1 > 0$ und $\alpha_2 < 0$.

Es existieren demnach zwei Lösungen von (A 14), die sogenannte irreguläre und reguläre Lösung, wobei wir natürlich an der im Unendlichen abfallenden regulären Lösung interessiert sind. [Dies entspricht der Tatsache, daß die Rekursionsrelation (A 14) einer Differentialgleichung zweiter Ordnung mit zwei Lösungen äquivalent ist.] Man kann daher für $l_0 \gg 1$ ansetzen:

$$R_{l_0}^{\text{appr.}} = a R_{l_0}^{\text{reg.}} + b R_{l_0}^{\text{irreg.}}, \\ R_{l_0+1}^{\text{appr.}} = a R_{l_0+1}^{\text{reg.}} + b R_{l_0+1}^{\text{irreg.}}, \quad (\text{A } 19)$$

womit die Konstanten a und b eindeutig bestimmt sind. Ist nun $R_{l_0+1}^{\text{appr.}} \cong R_{l_0+1}^{\text{reg.}}$, so ist $a \cong 1$ und $|b| \ll 1$. Nach n Rekursionsschritten ($n \gg 1$) erhält man durch Einsetzen von (A 19) in (A 14):

$$R_{l_0-n}^{\text{rek.}} = a R_{l_0-n}^{\text{reg.}} + b R_{l_0-n}^{\text{irreg.}}, \quad (\text{A } 20)$$

wobei nun bis auf numerisch vernachlässigbare Terme gilt:

$$R_{l_0-n}^{\text{rek.}} = a R_{l_0-n}^{\text{reg.}}. \quad (\text{A } 21)$$

Bestimmt man noch, (z. B. für $n = l_0$), aus Gl. (A 9) $R_{l_0-n}^{\text{reg.}}$, so erhält man daraus sofort die Normierungskonstante a und damit weiterhin die gewünschten radialen Integrale.

Aus dem eben Gesagten ist natürlich sofort ersichtlich, warum das Rekursionsverfahren in umgekehrter Richtung sehr viel weniger numerisch stabil ist.

Dieselben Überlegungen lassen sich natürlich auf jede andere Rekursionsrelation, die nicht durch (A 15) eingeschränkt ist, übertragen, womit dieses Rekursionsverfahren einen viel allgemeineren Anwendungsbereich hat.

¹ G. A. BAKER, J. Adv. Theor. Phys. **1**, 1 [1965].

² J. ZINN-JUSTIN, Phys. Lett. **Cl**, **3**, 55 [1971].

³ W. GLÖCKLE, Nucl. Phys. **A** **175**, 337 [1971].

⁴ J. FLEISCHER, Nucl. Phys. **B** **37**, 59 [1972].

⁵ D. R. YENNIE, D. G. RAVENHALL u. R. N. WILSON, Phys. Rev. **95**, 500 [1954].

⁶ R. D. VIOLLIER u. K. ALDER, Helv. Phys. Acta **44**, 77 [1971].

⁷ K. ALDER u. H. K. A. PAULI, Nucl. Phys. **128**, 193 [1969].

⁸ D. TRAUTMANN u. K. ALDER, Helv. Phys. Acta **43**, 363 [1970].

⁹ A. R. EDMONDS, Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton University Press, Princeton 1957.

¹⁰ A. ERDÉLYI et al., Higher Transcendental Functions, Mc Graw Hill, New York 1953.

¹¹ K. A. TER-MARTIROSYAN, J. Exp. Theor. Phys. **2**, 620 [1956].

¹² K. ALDER u. D. TRAUTMANN, Ann. Phys. **66**, 884 [1971].