
ALPS

“Automatic Local (L-dependent) Potential Search”

Ver. 4.2d

manual

June 2004

井芹 康統

千葉経済大学短期大学部

〒 263-0021 千葉市稲毛区轟町 4-3-30

phone: 043-255-3451

fax : 043-252-6050

e-mail: iseri@chiba-kc.ac.jp

1 ALPS について

“ALPS”は“Automatic Local (L-dependent) Potential Search”の略であり、このプログラムは微分断面積および偏極の角度分布から optical potential を search するプログラムである。search できる光学ポテンシャルとしては、中心力、スピン軌道力だけでなく、ある型の L 依存ポテンシャルも含む。用意されているポテンシャルの形は通常の Woods-Saxon 型に限らず、種々の形およびその組み合わせで search できるようになっている。またポテンシャルを読み込んでその大きさを search することもできる。ただしテンソル力を含むことはできない。

以下にこのプログラムを用いる際のデータ入力の指定法を述べる。

1.1 入力データの一般的な注意

- 必要なパラメーターの行のみ入力すればよい。入力されなかったパラメーターについては省略値または直前の run の値が取られる。省略値は一般に 0 であり、そうでないものについては以下の説明中で () により示してある。
- 1 つの job の中で複数の run を行なうことができる。1 つの run の最初の入力行は CMREAD(必須) であり、最後の入力行には run の開始の印として 1-5 桁目に「/RUN/」(/run/でもよい) と記入した行を入れるか、または空白行を入力する。後に続く run がないときは「/RUN/」や空白行は省略できる。
- 先頭の数字で種類を区別する入力行については、その入力順序は任意である。また同種の入力行を複数回読ませた場合、その最後の値が有効となる。但し、run の先頭は必ず CMREAD(1枚だけ) であること。また実験データ、ポテンシャルの数値入力データ等の入力行については、その順番が意味を持つので注意すること。
- 一般に各パラメーターの値は直前の run の値が保存されている。続く run では変更されるパラメーターのみ入力すればよい。search したパラメーターについては、search 後の結果が保存されている。また search を続けて行なう場合は、パラメーター値を各 run ごとに指定し入力する必要がある。
- 行の 1,2 桁目が「/*」である行はコメント行として扱われ、3 桁目以降には何を記入してもよい。
- 入力行の FORMAT は一般に全て (7F10.5) である。この場合、入力する値が 0.0 の欄については空白でもよい。それ以外のものについては以下の説明中に記してある。
- 入力データセットの終了は、本来のファイル終了コード (EOF) だけでなく、1-5 桁目が「/END/」の行 (/end/でもよい) または最初の数値として「9999.0」とした行によっても指定できる。
- 次ページからの説明で、「◎」印は 1 行分の入力行に対応している。

1.2 制限値

- $LMAX \leq 205$
- $PSPIN \leq 3/2$
- $MATCHR \leq 501$
- 実験データ個数、 $NTHMAX \leq 241$
- 同時に search できる独立なパラメーターの組数 ≤ 20
- 最終結果再計算用の角度点の個数 ≤ 245

2 入力データ

[0] コメント

⊙ CMREAD

- 40 文字以内のコメントを書く。
- FORMAT は A40。

[1] 入射粒子・標的核のデータ

⊙ 1.0 PMASS TMASS PZZ TZZ PSPIN TSPIN

- PMASS, TMASS: 入射粒子・標的核の質量数
- PZZ, TZZ: 入射粒子・標的核の原子番号
- PSPIN, TSPIN: 入射粒子・標的核のスピン大きさ

[2] エネルギー・積分メッシュなど

⊙ 2.0 ELAB DR MATCHR LMAX IDENT1

⊙ 2.1 ECM DR MATCHR LMAX IDENT1

⊙ 2.2 TLAB DR MATCHR LMAX IDENT1

⊙ 2.3 TLAB DR MATCHR LMAX IDENT1

⊙ 2.4 TLAB DR MATCHR LMAX IDENT1

⊙ 2.5 TLAB DR MATCHR LMAX IDENT1

- 2.0, 2.1 のときは非相対論的 kinematics で計算する。
- 2.2 のときは Type I の相対論的補正を行なう。
- 2.3 のときは Type II の相対論的補正を行なう。
- 2.4 のときは Type III の相対論的補正を行なう。
- 2.5 のときは Type IV の相対論的補正を行なう。
- 相対論的補正の詳細は別セクション参照。
- ELAB ECM TLAB: 入射エネルギー。単位は MeV。
- DR: 動径座標の数値積分のメッシュ間隔。単位は fm。
- MATCHR: 内側から解いた波動関数を漸近形に接続する位置。
 - ▷ 原点を第 1 番目の点としたときの接続するメッシュ点の番号を指定する。
 - ▷ $r = DR * (MATCHR - 1)$ となる r で接続を行なう。
- LMAX: 計算する部分波の L の値の最大値。
- IDENT1: 入射粒子と標的核が同一の場合の対称性の補正の指定。
 - =0: 補正を行なう。
 - =1: 補正を行なわない。
 - ▷ 但し、現在のところ補正が行なえるのはスピン 0 のボゾンに限る。

[3] search コントロールパラメーター

⊙ 3.0 KSERCH KAISUMX DCHIMN INTGWF KCHISQ CHI2MN

- KSERCH: search をする・しないの指定。
 - =0: search をしない。
 - =1: 断面積のみで search する。
 - =2: 偏極のみで search する。
 - =3: 断面積・偏極両方を用いて search する。
- KAISUMX: search を行なう最大回数。
- DCHIMN: 収束の目安。 (10⁻³)
 - ▷ search の際、 χ^2 の変化がこの値以下になると search を止める。
- INTGWF: S 行列の変化を計算する際の動径積分の間隔。 (2)
 - ▷ DR > 0.2 で 1、0.1 ~ 0.2 で 2、< 0.2 で 3 ~ 4 程度でよい。
- KCHISQ: χ^2 を計算する物理量の指定。
 - =0: χ^2 を計算しない。
 - =1: 断面積についてのみ計算する。
 - =2: 偏極についてのみ計算する。
 - =3: 断面積・偏極両方について計算する。
 - ▷ KSERCH の指定により search を行なう量については、KCHISQ の指定にかかわらず χ^2 は計算される。
 - ▷ χ^2 を計算する量については、必ず実験データを入力すること。
 - ▷ 実験データの有無は χ^2 を計算するかどうかで判断される。

例) 断面積のみで search を行なうが、 χ^2 は偏極についても計算したいとき
KSERCH=1, KCHISQ=3 とする。
- CHI2MN: 収束の目安。 (10⁻¹⁰)
 - ▷ search の際、 χ^2 の値がこの値以下になると search を止める。
 - ▷ 特に入力する必要はない。

⊙ 3.1 KCHISQ DELPA1 KAISU1 DELPA2 KAISU2

- 数種のパラメーターをそれぞれ等間隔で変化させて、そのたびに χ^2 の値を求める。これを「grid 計算」と呼ぶ。この時、search は行なわず、KSERCH=4 と置かれる。
- 同時に変化させられる独立なパラメーターの組は 2 組までである。第 1 パラメーター・第 2 パラメーターがそれぞれどのポテンシャルパラメーターに対応するかは次の [4] の入力カードで決められる。またパラメーター値の starting value も [4] の入力カードで与える。
- KCHISQ: χ^2 を計算する物理量の指定。
 - ▷ 指定の仕方は 3.0 の入力行と同じ。
- DELPA1, DELPA2: 第 1・第 2 パラメーターの変化量。
- KAISU1, KAISU2: 第 1・第 2 パラメーターの変化の回数。
- 変化させたいパラメーターが 1 組のときは、DELPA2, KAISU2 は入力する必要はない。

[4] ポテンシャルパラメーター

⊙ 4.01	V0(1)	r0R(2)	aR(3)	KPASER(1)	KPASER(2)	KPASER(3)
⊙ 4.02	W0(4)	r0I(5)	aI(6)	KPASER(4)	KPASER(5)	KPASER(6)
⊙ 4.03	WD(7)	r0ID(8)	aID(9)	KPASER(7)	KPASER(8)	KPASER(9)
⊙ 4.04	r0C(10)	KPASER(10)				
⊙ 4.05	V50(11)	r0RS(12)	aRS(13)	KPASER(11)	KPASER(12)	KPASER(13)
⊙ 4.06	W50(14)	r0IS(15)	aIS(16)	KPASER(14)	KPASER(15)	KPASER(16)
⊙ 4.07	NR(17)	KIBANR	KPASER(17)	NI(18)	KIBANI	KPASER(18)
⊙ 4.08	V2(19)	r0R2(20)	aR2(21)	KPASER(19)	KPASER(20)	KPASER(21)
⊙ 4.09	VD(22)	r0RD(23)	aRD(24)	KPASER(22)	KPASER(23)	KPASER(24)
⊙ 4.10	L0(25)	aL(26)	KPASER(25) KPASER(26)			
⊙ 4.11	VLD(27)	r0RLD(28)	aRLD(29)	KPASER(27)	KPASER(28)	KPASER(29)
⊙ 4.12	WLD(30)	r0ILD(31)	aILD(32)	KPASER(30)	KPASER(31)	KPASER(32)
⊙ 4.13	NRS(33)	KIBNRS	KPASER(33)	NIS(34)	KIBNIS	KPASER(34)
⊙ 4.14	NXS(35)	KPASER(35)				
⊙ 4.15	V02(36)	r0R02(37)	aR02(38)	KPASER(36)	KPASER(37)	KPASER(38)
⊙ 4.16	W02(39)	r0I02(40)	aI02(41)	KPASER(39)	KPASER(40)	KPASER(41)

- ポテンシャルパラメーターの値を指定する。search を行なうパラメーターについてはここで指定した値が starting value となる。
- 各パラメーターとポテンシャルの関係は第 4 章を参照。
- 各パラメーターの後の () 内の数字は、パラメーターの通し番号である。
- 半径パラメーターについては全て $R = r_0 * TMASS^{1/3}$ の形である。
- search の指定はパラメーター番号に対応する KPASER により行なう。
 KPASER = 0 そのパラメーターについて search しない。
 ≥ 1 そのパラメーターについて search する。
- starting value が小数点以下 4 桁まで一致しているパラメーターどうしは互いに等しい値を保ったまま search を行なう。starting value の値が同じで、なおかつ独立に search したい場合は KPASER の値を互いに異なるようにしておけばよい。
- grid 計算の際、どのパラメーターを第 1・第 2 パラメーターの組にするかは、それぞれ KPASER=1,2 で指定する。このとき、同じ組では starting value は等しくなければならない。
- spin-orbit 力の項、4.05, 4.06 については、それぞれ 4.050, 4.060 で Thomas 型、4.051, 4.061 で Woods-Saxon 微分型とする。
- 実験断面積の normalization factor の項、4.14 については、4.140 で error bar にも同じ normalization factor を掛け、4.141 で error bar には normalization factor をつけない。
- 4.07, 4.13 ではそれぞれ central と spin-orbit ポテンシャルをファイルから読み込むことになる。
 KIBANR, KIBANI, KIBNRS, KIBNIS: 対応するポテンシャルの入っている機番。
 ▷ 毎回、REWIND を行なって読み込む。
 ▷ ポテンシャルデータの記述法は第 4 章を参照。
- 4.01 と 4.15、または、4.02 と 4.16 を同時に指定すると、double Woods-Saxon

型のポテンシャルが可能になる。この場合、2つのポテンシャルを全く同じ形状にして同時に search させると、パラメーターの独立性がなくなりエラーになるので注意する。。

⊙ 4.9xx PARMIN PARMAX

- パラメーターの値の最小値・最大値を指定する。search の途中でこの値を越えると、その直前の越えない値に戻される。
- 通常は入力の必要はない。
- xx は、パラメーターの通し番号を2桁で表す。
- 入力を省略したときの値
 - ▷ r0, a については最小値 10^{-20} 、最大値 20。
 - ▷ V, W, N については最小値 -10^3 、最大値 10^3 。

[5] 実験データの入力

◎ 5.00 KIBAN

- 実験データを格納しているファイルの機番。
- 実験データを別のファイルとして与えるときに指定する。
- この入力行を読み込むと、続いてその機番に移る。
- 移ったファイル内には 5.xx の入力行しか許されない。

◎ 5.11 NTHMAX KTDXPRT KTDPPR XFACT PFACT

◎ 5.12 NTHMAX KTDXPRT KTDPPR XFACT PFACT

◎ 5.13 NTHMAX KTDXPRT KTDPPR XFACT PFACT

- 5.11 の時: 読み込む実験断面積は Rutherford ratio である。
- 5.12 の時: 読み込む実験断面積は absolute value である。
- 5.13 の時: 読み込む実験断面積は absolute value であるが、search は Rutherford ratio で行う。
- NTHMAX: 実験データの角度点の個数。
- KTDXPRT, KTDPPR: それぞれ断面積・偏極について
=0: 読み込む誤差は絶対値。
=1: 読み込む誤差は相対値 (%)。
- XFACT, PFACT: それぞれ断面積・偏極の読み込んだ値に掛ける factor。
▷ 0.0 のときは 1.0 とみなす。

- これらの入力行の直後に以下の形式で実験データが続く。() 内は FORMAT。

- ◎ コメント (A80)
- ◎ THETAD XSEX DXEX POLEX DPEX (F10.5, 2D15.7, 2F10.5)
- ◎ : 以下、実験データが NTHMAX 個 (行) 続く。
- ◎ :
- ◎ :
- THETAD: 重心系での角度 (°)。
- XSEX, DXEX: 微分断面積の値 (mb/sr) と誤差。
- POLEX, DPEX: 偏極の値 (%) と誤差。

- 5.11, 5.12, 5.13 のかわりに 5.111, 5.121, 5.131 とすると、実験データの FORMAT を読み込むことができる。

- ▷ この時、上述の実験データ入力の際、コメントの次の入力行としてデータの FORMAT を (A80) で入れる。

◎ 5.21 THSAKI DELFOR DELBAK

◎ 5.22 THSAKI DELFOR DELBAK

- 実験データの誤差をマクロに指定するとき用いる。
- 5.21, 5.22 はそれぞれ、断面積・偏極に対応する。
- $$\begin{cases} \theta \leq \text{THSAKI のとき} & \Delta\sigma = \sigma * \text{DELFOR} \\ \theta > \text{THSAKI のとき} & \Delta\sigma = \sigma * \text{DELBAK} \end{cases}$$
 とする。偏極についても同様。

◎ 5.30

- この入力行を読み込むと、5.00 の入力行で移っていた機番=KIBAN のファイルから、通常の標準入力 (機番=5) へ戻る。
- 5.xx 以外または空白行を読み込んで、同様に戻る。

実験データ例: 実験データだけを含むファイルの内容例

(例 1) FORMAT を ALPS のものに合わせている場合

```

5.11      42.0                1.035
d+58Ni Ed=200MeV exp.data
2.28      1.040D+00          0.31D-01      2.8      0.6
3.11      1.247D+00          0.37D-01      9.8      1.1
3.95      2.078D+00          0.62D-01      8.0      1.4
4.80      3.196D+00          0.94D-01      5.2      1.6
:         :                 : データが 42 行続く
5.30

```

(例 2) FORMAT を別に指定する場合

```

5.111     42.0      0.0      0.0      1.035      1.0
d+58Ni Ed=200MeV exp.data
(F5.2,D11.3,D10.2,F7.2,F5.1)
2.28      1.040D+00  0.31D-01  2.8  0.6
3.11      1.247D+00  0.37D-01  9.8  1.1
3.95      2.078D+00  0.62D-01  8.0  1.4
4.80      3.196D+00  0.94D-01  5.2  1.6
:         :                 : データが 42 行続く
5.30

```

(例 3) 実験誤差をマクロに指定する場合

- ▷ 断面積の誤差は、20° より前方で 1%、後方で 3%、
偏極の誤差は、30° より前方で 3%、後方で 5%とする。

```

5.111     42.0      0.0      0.0      1.035      1.0
d+58Ni Ed=200MeV exp.data
(F5.2,D11.3,3F6.1)
2.28      1.040D+00  0.0  2.8  0.0
3.11      1.247D+00  0.0  9.8  0.0
3.95      2.078D+00  0.0  8.0  0.0
4.80      3.196D+00  0.0  5.2  0.0
:         :                 : データが 42 行続く
5.21      20.0  0.01  0.03
5.22      30.0  0.03  0.05
5.30

```

- ▷ 5.21, 5.22 のカードはファイルの外 (READ(5,) のファイル中) で指定してもよい。複数回指定された場合は、一番最後に読みこまれた値が有効となる。

[6] 角度・実験データのマクロ指定

◎ 6.00 THMIN THMAX THDEL

- 角度を [5] で読み込まないときに用いる。
- THMIN THMAX THDEL: 計算したい角度 (重心系、単位は $^{\circ}$) の開始値・終了値・増分値。

◎ 6.111 THSAKI DELFOR DELBAK

◎ 6.112 THSAKI DELFOR DELBAK

◎ 6.120 THSAKI DELFOR DELBAK

- 実験データとして直前の run の (理論) 計算値を用いるときに指定する。
- 6.111: 直前の run の断面積計算値 (Rutherford ratio) を断面積データとする。
- 6.112: 直前の run の断面積計算値 (absolute value) を断面積データとする。
- 6.120: 直前の run の偏極計算値を偏極データとする。
- THSAKI DELFOR DELBAK で実験データの誤差の指定を行なう。5.2x の入力行を参照。

◎ 6.21 0.0

◎ 6.22 0.0

- 実験データ及びその誤差を直前の run と同じものにする時に指定する。
- 数値としては 0.0 を与える。
- 6.21, 6.22: それぞれ断面積・偏極に対応する。

◎ 6.30 XFACT PFACT

- 実験データとして持っている断面積・偏極の値に掛ける factor。
- 5.1x の入力行のそれと同じ働きをする。
- XFACT, PFACT: それぞれ断面積・偏極に対応する。

[7] 未使用

[8] 標準出力への出力制御

- ⊙ 8.1 KTLOUT(1) KTLOUT(2) KTLOUT(3) KTLOUT(4) KTLOUT(5) KTLOUT(6)
- ⊙ 8.2 KTLOUT(7) KTLOUT(8) KTLOUT(9) KTLOUT(10) KTLOUT(11) KTLOUT(12)
- ⊙ 8.3 KTLOUT(13) KTLOUT(14) KTLOUT(15) KTLOUT(16) KTLOUT(17) KTLOUT(18)

- 標準出力 (機番=6) への出力を制御する。
- 最終の断面積・偏極の結果は指定しなくとも常に出力される。
- () 内の番号と出力されるものとの対応は以下のとおりである。
 - 1: search process
 - 2: figure (標準出力に*と+でプロットする。)
 - 3: 始ポテンシャル (r の関数)
 - 4: 最終ポテンシャル (r の関数)
 - 5: 最終の S 行列要素
 - 6: テンソル偏極量。スピン 1/2 の場合はスピNFLリップや Q パラメーターなども出力する。 (θ の関数)
 - 7: ポテンシャル (r の関数)
 - 8: ポテンシャルのパラメーター微分値 (r の関数)
 - 9: 動径波動関数 (r の関数)
 - 10: S 行列要素
 - 11: S 行列要素のパラメーター微分値
 - 12: 散乱振幅 (θ の関数)
 - 13: 散乱振幅のパラメーター微分値 (θ の関数)
 - 14: 断面積・偏極 (θ の関数)
 - 15: 断面積・偏極のパラメーター微分値 (θ の関数)
 - 16: χ^2 値のパラメーター微分値
 - 17: 未使用
 - 18: 未使用
- 何れも 0.0 で出力しない、1.0 以上で出力する。
- KTLOUT(2) について
 - = 0 プロット出力しない。
 - = ± 1 断面積のみプロットする。
 - = ± 2 偏極のみプロットする。
 - = ± 3 断面積と偏極両方をプロットする。
 - ▷ + のとき: 断面積は Rutherford ratio にする。
 - ▷ - のとき: 断面積は absolute value にする。
- 3, 4, 6, 7, 8, 9, 12, 13, 14, 15 については、1 以上の値を指定すると、(その値 - 1) の値おきで出力する。
- 7~18 は、“FUNDER” を CALL するたびに出力するので、search する際出力させると膨大な出力結果となるので注意すること。

[9] ファイル出力制御

- ⊙ 9.1 KFLOWT(1) KFLOWT(2) KFLOWT(3) KFLOWT(4) KFLOWT(5) KFLOWT(6)
 - 標準出力以外のファイルへの出力を制御する。
 - () 内の番号と出力されるものとの対応は以下のとおりである。
 - 1: 断面積と偏極 (実験データがあるときは実験データも出力する。)
 - 2: テンソル偏極量
 - 3: 最終ポテンシャル (r の関数)
 - 4: 未使用
 - 5: 未使用
 - 6: 未使用
 - 何れも 0.0 で出力しない、1.0 以上で出力する。
 - 指定した数値を機番とするファイルに出力する。
 - 同じ番号を指定すると同一のファイルに続けて出力する。
 - 各ファイルの先頭部分には、入射粒子と標的核の質量数と電荷、入射エネルギーなどの profile データと、ポテンシャルパラメーターの値を出力する。

[#] その他の指定

コメント行

- ⊙ /* コメント
 - 行の 1-2 桁目に「/* 」と書いた行は、コメント行として扱われ、3 桁目以降には何を記述しても無視される。

計算開始指示

- ⊙ /RUN/
- ⊙ /run/
- ⊙ 空白 (blank) 行
 - 行の 1-5 桁目に「/RUN/」か「/run/」と書いた行、または空白行を読み込むと、これまでに読み込んだデータに従って 1 回の run を実行する。
 - この後続く run がない時 (この run が job 内の最後の run の時) は、これらの行を省略できる。

データ終了

- ⊙ /END/
- ⊙ /end/
- ⊙ 9999.0
 - 行の 1-5 桁目に「/END/」か「/end/」と書いた行、または数値として 9999.0 を指定した行を読み込むと、本当のファイル終了でなくても、入力データの終了とみなし、job を終了する。それ以降のデータは読み込まない。
 - まだ run をしていないときは、それまでに読み込んだデータに従って 1 回の run を実行した後、job を終了する。
 - この後続くデータがない時 (本当のファイル終了の時) は、これらの指定を省略できる。

3 ポテンシャルの数値入力

4.07, 4.13 のカードによりポテンシャルの数値をファイルから読み込むように指定したときは、対応する機番のファイルに以下の形式でポテンシャルのデータを記述しておく。()内はFORMAT。

3.1 ポテンシャルデータを r について横に並べる場合

- ⊙ コメント (A40)
- ⊙ DR NRMAX (F10.6, I10)
- ⊙ FORMAT (A80)
- ⊙ : 以下、数値データが NRMAX 個続く。
- ⊙ :
- ⊙ :

- DR: データのメッシュ間隔 (fm)。
- NRMAX: データ点の個数。
- FORMAT: データの FORMAT。
- 原点 (0.0 fm) を 1 番目のデータ点として与える。
- ALPS の計算に必要な半径よりも遠くまで数値を与えておく。
- DR の値は ALPS の計算の際のそれと等しくなくてもよい。

ポテンシャルデータ例: ポテンシャル数値を含むファイルの内容例

```
d+58Ni Ed=400MeV Dirac Pot.
0.50000          43
(6F12.5)
2.90296D-32 1.26537D-02 4.34796D-02 8.06720D-02 1.01890D-01 8.26449D-02
3.74175D-02 4.61492D-02 1.35554D-01 1.99061D-01 1.74634D-01 1.11253D-01
5.89644D-02 2.84527D-02 1.32080D-02 6.08251D-03 2.82222D-03 1.32825D-03
6.35432D-04 3.08963D-04 1.52521D-04 7.63397D-05 3.86881D-05 1.98276D-05
1.02649D-05 5.36310D-06 2.82553D-06 1.50002D-06 8.01935D-07 4.31508D-07
2.33585D-07 1.27154D-07 6.95799D-08 3.82594D-08 2.11304D-08 1.17158D-08
6.51729D-09 3.63480D-09 2.03052D-09 1.13472D-09 6.33114D-10 3.51626D-10
1.93438D-10
```

3.2 ポテンシャルデータを r について縦に並べる場合

- ⊙ コメント (A40)
- ⊙ : 以下、必要な分のコメント行。
- ⊙ R VCE(R) WCE(R) VSO(R) WSO(R)
- ⊙ : 以下、必要な分のデータ行。
- ⊙ : FORMAT は自由形式 (READ(xx,*)) で読みこむ。
- ⊙ : 各データを「,」または「space」で区切る。
- R: 原点からの動径方向の距離 (fm)。
- VCE(R), WCE(R), VSO(R), WSO(R): R でのそれぞれ、real central, imaginary central, real spin-orbit, imaginary spin-orbit potential の値 (MeV)。

- 原点 (0.0 fm) を 1 番目のデータ点として与える。
- データの順序 (R, VCE, WCE, VSO, WSO) は必ずこのとおりであること。
 - ▷ 例えば VCE, WCE しか読みこませないときは、各行の VSO, WSO は省略できる。
 - ▷ しかし、VSO を読みこませるときは、VCE, WCE は省略できない。dummy でもよいので何か数値を入れておくこと。
- R について必ず等間隔で与える。間隔の値は ALPS の計算の際のそれと等しくなくてもよい。ALPS の計算に必要な半径よりも遠くまで数値を与えておく。
- R として負の値を読みこむと、読み取りをそこで終了する。本当のデータファイル終了まで読みこませたくないときに使うとよい。
- 4.07, 4.13 のカードで指定する機番は次のようにして求める。
 - ▷ 指定する機番 = 本当の機番 + (ファイル先頭のコメント行数 + 1) * 100
 - ▷ コメント行とはデータに関係ない、読み飛ばす行のことである。

ポテンシャルデータ例: ポテンシャル数値を含むファイルの内容例

```
<< Sch.-equiv. Opt.Pot. (Output from global.for) >>
FitType= 9 Kin.Fac.Type= 4 Coul.Type= 1
Tp= 28.000 A,Z= 58.000 28.000 Rmax,Dx= 25.000 0.100
Radius Re. Cent Im. Cent Re. S-0 Im. S-0
0.000 -4.52031883D+01 -7.91135050D-01 -5.53180287D-02 4.72222089D-04
0.500 -4.51540716D+01 -7.93416355D-01 -6.10931023D-02 5.38031388D-04
1.000 -4.49852168D+01 -8.01875036D-01 -8.18648345D-02 7.88286953D-04
1.500 -4.46475167D+01 -8.21642357D-01 -1.26725577D-01 1.38416859D-03
2.000 -4.40396166D+01 -8.66745742D-01 -2.14732616D-01 2.70942747D-03
: : : データが続く
19.500 4.35188412D-08 -5.10529863D-09 -5.66561681D-05 4.19053015D-12
20.000 4.02074401D-08 -2.38388313D-09 -5.25108970D-05 1.90762775D-12
-999.0
以下のデータを読みこませたくないときは、R を負とする。
20.500 -3.50660293D-10 -1.10058710D-09 -4.20890722D-13 8.73990424D-13
21.000 -1.51477794D-10 -5.13883948D-10 -1.74853393D-13 3.98358106D-13
```

- ▷ このデータファイルを、例えば機番 3 から読ませたい場合、コメント行が 4 行ある (ポテンシャルデータは 5 行目から始まる) ので、4.07, 4.13 のカードで指定する機番数値としては、 $3 + (4 + 1) * 100$ より、503 とする。

4 用いている公式

4.1 Schrödinger 方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right\} + U_{\ell j}(r) - E_{\text{cm}} \right] u_{\ell j}(r) = 0 \quad (1)$$

ここで μ は換算質量、 ℓ は軌道角運動量、 E_{cm} は重心系での入射エネルギーである。

4.2 波動関数の漸近形

ALPS で解かれる動径波動関数 $u_{\ell j}(r)$ は次の漸近形を持つ。

$$u_{\ell j}(r) \sim U_{\ell}^{(-)}(r) - S_{\ell j}^{\text{N}} \cdot U_{\ell}^{(+)}(r) \quad (2)$$

ここで $S_{\ell j}^{\text{N}}$ は部分波 (ℓ, j) の nuclear S-matrix element、 $U_{\ell}^{(\pm)}(r)$ は漸近形が

$$U_{\ell}^{(\pm)}(r) \sim \exp[\pm i(kr - \eta \ln 2kr + \sigma_{\ell} - \frac{\ell\pi}{2})] \quad (3)$$

となる Coulomb 関数である。但し、 σ_{ℓ} は Coulomb phase shift、 k は wave number である。

4.3 用いている定数

ALPS で用いている物理定数の値は次のとおりである。

- Ver.4.2c 以前
 - ▷ atomic mass unit: $Mc^2 = 938.29 \text{ MeV}$
 - ▷ fine structure constant: $\hbar c/e^2 = 137.0388$
 - ▷ Planck constant: $\hbar c = 197.3216 \text{ MeV}\cdot\text{fm}$
- Ver.4.2d 以後 (CODATA recommended values (1998))
 - ▷ atomic mass unit: $Mc^2 = 931.494013 \text{ MeV}$
 - ▷ fine structure constant: $\hbar c/e^2 = 137.03599976$
 - ▷ Planck constant: $\hbar c = 197.3269601 \text{ MeV}\cdot\text{fm}$

4.4 光学ポテンシャル

ALPS で計算できる光学ポテンシャルは次の形のものである。

$$U_{\ell j}(r) = U^{\text{CE}}(r) + U^{\text{SO}}(r)\ell \cdot \sigma + U_{\ell}^{\text{LD}}(r) \quad \text{但し、} \sigma \equiv 2S \quad (4)$$

ここで、CE, SO, LD は、それぞれ中心力, スピン軌道力, L 依存力を表す。また、スピン軌道力は核子 ($S = 1/2$) 以外の場合も $\ell \cdot \sigma$ で定義されており、 $\ell \cdot S$ より 2 倍大きくなっていることに注意すること。

4.4.1 central part

中心力部分 $U^{\text{CE}}(r)$ は次の形をとる。

$$\begin{aligned} U^{\text{CE}}(r) = & [-V_0 \cdot f(r_{0R}, a_R; r) - V_2 \cdot f^2(r_{0R2}, a_{R2}; r) - V_D \cdot g(r_{0RD}, a_{RD}; r) \\ & - V_{02} \cdot f(r_{0R02}, a_{R02}; r) + N_R \cdot h_R(r) + V^{\text{Coul}}(r_{0C}; r)] \\ & + i [-W_0 \cdot f(r_{0I}, a_I; r) - W_D \cdot g(r_{0ID}, a_{ID}; r) + N_I \cdot h_I(r)] \end{aligned} \quad (5)$$

4.4.2 spin-orbit part

スピン軌道力部分 $U^{\text{SO}}(r)$ は次の形をとる。

$$U^{\text{SO}}(r) = \lambda_{\pi}^2 [-V_{\text{SO}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r_{0RS}, a_{RS}; r) \\ \frac{1}{R_{RS}} \frac{d}{dr} f(r_{0RS}, a_{RS}; r) \end{array} \right\} + i \cdot W_{\text{SO}} \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r_{0IS}, a_{IS}; r) \\ \frac{1}{R_{IS}} \frac{d}{dr} f(r_{0IS}, a_{IS}; r) \end{array} \right\}] \quad (6)$$

$$+ [N_{RS} \cdot h_{RS}(r) + i \cdot N_{IS} \cdot h_{IS}(r)] \quad (7)$$

ここで $\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f(r_{0RS}, a_{RS}; r) \\ \frac{1}{R_{RS}} \frac{d}{dr} f(r_{0RS}, a_{RS}; r) \end{array} \right\}$ の中の形は、上を Thomas 型、下を Woods-Saxon 微分型と呼び、どちらか一方を選択できる。両方同時には指定できない。また、 $\lambda_{\pi}^2 = 2.0 \text{ fm}^2$ である。

4.4.3 L-dependent part

L 依存力部分 $U^{\text{LD}}(r)$ は次の形をとる。

$$U^{\text{LD}}(r) = [-V_{\text{LD}} \cdot g(r_{0RLD}, a_{RLD}; r) - iW_{\text{LD}} \cdot g(r_{0ILD}, a_{ILD}; r)] \cdot f_L(L_0^2, a_L^2; \ell^2) \quad (8)$$

4.4.4 potential form factor

各ポテンシャルの形状因子、 $f(r)$ は Woods-Saxon 型、 $g(r)$ は Woods-Saxon 微分型であり、次の形をとる。

$$f(r_0, a; r) = 1 / [1 + \exp\left(\frac{r - R}{a}\right)] \quad (9)$$

$$g(r_0, a; r) = 4 \exp\left(\frac{r - R}{a}\right) / [1 + \exp\left(\frac{r - R}{a}\right)]^2 \quad (10)$$

$$f_L(L_0^2, a_L^2; \ell^2) = 1 / [1 + \exp\left(\frac{\ell^2 - L_0^2}{a_L^2}\right)] \quad (11)$$

ただし、どの場合も半径パラメーター R は、標的核の質量数 A_T を用いて

$$R = r_0 \cdot A_T^{1/3} \quad (12)$$

と表される。

また $h(r)$ は読み込んだポテンシャルである。

$$h(r) = (\text{読み込んだポテンシャル}) \quad (13)$$

Coulomb ポテンシャル $V^{\text{Coul}}(r_{0C}; r)$ は、半径 R_C の一様帯電球によるポテンシャルの形をしている。

$$V^{\text{Coul}}(r_{0C}; r) = \begin{cases} \frac{zZe^2}{2R_C} \left(3 - \frac{r}{R_C}\right) & \text{for } r \leq R_C \\ \frac{zZe^2}{r} & \text{for } r > R_C \end{cases} \quad (14)$$

ここで z, Z はそれぞれ入射粒子、標的核の原子番号、 e は単位電荷であり、また

$$R_C = r_{0C} \cdot A_T^{1/3} \quad (15)$$

である。

4.4.5 normalization of experimental cross section data

微分断面積の実験データの normalization factor N_X を search する際には、 χ^2 の計算法について次の 2 とおりから選ぶことができる。

$$\chi_\sigma^2 = \begin{cases} \sum_m \left(\frac{\sigma_m^{\text{th}} - N_X \sigma_m^{\text{ex}}}{N_X \Delta \sigma_m^{\text{ex}}} \right)^2 \\ \sum_m \left(\frac{\sigma_m^{\text{th}} - N_X \sigma_m^{\text{ex}}}{\Delta \sigma_m^{\text{ex}}} \right)^2 \end{cases} \quad (16)$$

ここで \sum_m は角度点による和を表し、 m は角度点の番号である。両式の違いは誤差 $\Delta \sigma^{\text{ex}}$ にも normalization factor N_X を掛けるかどうかの違いである。

4.5 kinematics の相対論的補正

kinematics の相対論的補正として次のタイプのものを用意してある。

- Type I: Goldberger-Watson による補正式。
- Type II: Dirac phenomenology で用いられた補正式。
- Type III: Newton による (?) 補正式。
- Type IV: Yahiro による補正式。

これらの補正では以下の式を利用している。

入射粒子を 1、標的核を 2 とし、それらの質量をそれぞれ M_1, M_2 とする。実験室系での粒子 1 の運動エネルギー（入射エネルギー）を T_1^L 、重心系（1,2 の 3 元運動量の和が zero となるような系）での 3 元運動量を \vec{K} で表す。以下では、簡単のため $c = 1$ とする。

このとき、 K は

$$K = P_1^L M_2 / E_{tot}^C \quad (17)$$

で求めることができる。ただし、 \vec{P}_1^L は粒子 1 の実験室系での 3 元運動量、 E_{tot}^C は重心系での 1,2 を合わせた全エネルギーで、

$$P_1^L = \sqrt{(E_1^L)^2 - M_1^2} \quad (18)$$

$$E_{tot}^C = \sqrt{M_1^2 + M_2^2 + 2M_2 E_1^L} \quad (19)$$

と書ける。 E_1^L は実験室系での粒子 1 のエネルギーで

$$E_1^L = M_1 + T_1^L \quad (20)$$

である。

各 Type の補正では、計算に使う相対運動の運動量とエネルギーを以下のように取る。

Type	I	II	III	IV
momentum	K	K	K	K
kinetic energy	$\frac{\varepsilon - M_1^2}{2\varepsilon}$	$\frac{K^2}{2E_1^C}$	$\frac{K^2}{2E_1^C} + \frac{K^2}{2E_2^C}$ $= \frac{1}{2} \frac{E_1^C + E_2^C}{E_1^C E_2^C} K^2$	$\frac{K^2}{E_1^C + M_1} + \frac{K^2}{E_2^C + M_2}$ $= \frac{E_1^C + M_1 + E_2^C + M_2}{(E_1^C + M_1)(E_2^C + M_2)} K^2$
reduced mass	$\frac{\varepsilon M_2}{E_{tot}^C}$	E_1^C	$\frac{E_1^C E_2^C}{E_1^C + E_2^C}$	$\frac{1}{2} \frac{(E_1^C + M_1)(E_2^C + M_2)}{E_1^C + M_1 + E_2^C + M_2}$

ここで、 E_i^C は粒子 i の重心系での全エネルギーで、

$$E_i^C = \sqrt{K^2 + M_i^2} \quad (21)$$

で与えられ、 $E_{tot}^C = E_1^C + E_2^C$ である。また、 ε は次式で与えられる。

$$\varepsilon = E_1^C + \frac{K^2}{2M_2} \quad (22)$$

5 ファイル割り当て用 subroutine “FOPEN” について

従来の汎用大型計算機用の OS においては、FORTRAN プログラム実行の際のファイルの割り当て (ファイル機番と実ファイル名の対応付け) は JCL 中の DD 文などで行なっていた。またプログラム中で特に OPEN 文を記述する必要はなかった。一方、Work Station などで用いられている UNIX においては、JCL に相当するものがないため、ファイルの割り当てはプログラム中で OPEN 文を実行させる事によって行なわなければならない。しかし、実ファイル名をプログラム中に explicit に書き込むことは、プログラムの汎用性を著しく損なうことになり好ましくない。そこで、ファイル割り当て情報をデータとして入力し、割り当てを実行する subroutine “FOPEN” および “FOPEN2” を作成した。ALPS でもこれらを用いている。

subroutine “FOPEN” / “FOPEN2” は、プログラムの最も初めに実行され、機番・実ファイル名・ファイルの status といったファイル割り当て情報を標準入力から読み込み、それに従い直ちにファイルの割り当てを行なう。ユーザーは、従来の JCL の DD 文などにおいて記述していたようなファイル割り当て情報を、以下の書式に従って、入力データの先頭に書いておけばよい。それらの後に、従来の SYSIN データを続けて書くことになる。

“FOPEN” と “FOPEN2” はデータの互換性がないので、使用する場合、どちらかを選択しなければならない。“FOPEN” と “FOPEN2” の違いは入力データの記述の仕方の違いで “FOPEN” はどちらかという固定形式、“FOPEN2” はやや自由形式である。ALPS の source file の先頭部分で、どちらを CALL するかを選択して compile すること。

5.1 FOPEN の使い方

FOPEN 用の入力データは次の形式である。

◎ コメント

- 1 行目に必須。コメント行であり、必要なコメントを書ける。
- FORMAT は (A60)。

◎ OFF IUNIT STA FNAME

- ファイル情報を記述する。(DD 文に相当する。)
FORMAT は (A1, I3, 1X, A8, 2X, A50)。
- 各変数の意味は次のとおり。
OFF: その行を有効にするか無効にするかのスイッチ。空白以外の何かが記入してあるときは、その行を無視する。一旦記入したファイル割り当て記述を一時的に無視させたいときに使うと便利。
IUNIT: ファイル機番。00 ~ 99 の値をとる。
STA: ファイルの status。OLD や NEW などを記入する。
FNAME: 実ファイル名。パス名も含まれる。
- この行を読み込むと、OFF が空白の場合、直ちに
OPEN(IUNIT, FILE=FNAME, STATUS=STA)
の形式で OPEN 文が実行される。

- このカードは繰り返し読み込まれる。IUNIT として 0 未満または 100 以上の数が入力されると、繰り返しを終了して次のカード (区切り行) に移る。

◎ 区切り行

- “FOPEN” の入力行と他の入力行 (例:ALPS のための入力行) を区別するために、1 行区切りのための行を入れる。内容は何でもよい。
- このカードを読み込んだ後、FOPEN から RETURN する。

5.2 FOPEN2 の使い方

FOPEN2 用の入力データは次の形式である。

◎ * コメント

- 1 桁目が空白以外 (さらに「-」以外) の行はコメント行とみなす。必要なコメントを書ける他、1 桁目に何かつけることで、記述を一時的にコメントアウトできる。
- 先頭だけでなく、好きな場所に入れてよい。

◎ OFF IUNIT STA FNAME

- ファイル情報を記述する。(DD 文に相当する。)
FORMAT は (A1, I3, 1X, A8, 2X, A50)。
- このカードは繰り返し読み込まれる。
- 各変数の意味および機能は fopen と同様である。IUNIT として 0 未満または 100 以上の数が入力されると、その機番は無視してもう一度読みこみを行う。
- 読みこみ終了は、以下の終了行で判断するので、FOPEN の場合のように 0 未満または 100 以上の機番を入れる必要はない。

◎ - 終了行

- “FOPEN2” の入力の終了を知らせるために入れる。1 桁目が「-」であれば、2 桁目以降の内容は何でもよい。
- このカードを読み込んだ後、FOPEN2 から RETURN する。

(注) fopen のデータで、最初のコメント行の 1 桁目を空白以外にすれば、そのまま fopen2 で読むことができる。

(例2) 一度に複数のrunを行う場合

```
****ALPS_control_data****
uu10:newuuuuuu:call.dat
uu11:newuuuuuu:pot1.dat
uu20:newuuuuuu:cal2.dat
uu21:newuuuuuu:cal3.dat
uu22:newuuuuuu:pot2.dat
uu06:olduuuuuu:alps.outlist
---INPUT_DATA-----
uuREIDAI
1.0uuuuuuuu1.0uuuuuuuu120.0uuuuuu1.0uuuuuuuu50.0uuuuuu0.50uuuuuu0.0
2.0uuuuuuuu25.0uuuuuuuu0.100uuuuuu180.0uuuuuu20.0
3.0uuuuuuuu0.0
4.01uuuuuuuu50.0uuuuuuuu1.170uuuuuu0.75
4.02uuuuuuuu5.0uuuuuuuu1.200uuuuuu0.65
4.03uuuuuuuu10.0uuuuuuuu1.200uuuuuu0.65
4.04uuuuuuuu1.300
4.05uuuuuuuu6.0uuuuuuuu1.25uuuuuu0.500
6.00uuuuuuuu0.0uuuuuuuu180.0uuuuuu5.0
9.10uuuuuuuu10.0uuuuuuuu10.0uuuuuu11.0
/run/
uuSEARCH
3.0uuuuuuuu3.0uuuuuuuu50.0
4.01uuuuuuuu40.00uuuuuuuu1.170uuuuuu0.500uuuuuu1.0uuuuuuuu0.0uuuuuuuu1.0
4.02uuuuuuuu10.0uuuuuuuu1.2000uuuuuu0.600uuuuuu1.0uuuuuuuu0.0uuuuuuuu1.0
4.03uuuuuuuu15.0uuuuuuuu1.2000uuuuuu0.600uuuuuu1.0uuuuuuuu0.0uuuuuuuu1.0
6.111uuuuuuuu90.0uuuuuuuu0.01uuuuuuuu0.05
6.120uuuuuuuu90.0uuuuuuuu0.01uuuuuuuu0.05
8.10uuuuuuuu1.0uuuuuuuu3.0uuuuuuuu0.0uuuuuuuu0.0uuuuuuuu0.0uuuuuuuu0.0
9.10uuuuuuuu0.0uuuuuuuu0.0uuuuuuuu0.0
/run/
uuSEARCH_RESULTS_OUTPUT
3.0uuuuuuuu0.0
6.00uuuuuuuu0.0uuuuuuuu180.0uuuuuu1.0
8.10uuuuuuuu0.0uuuuuuuu0.0uuuuuuuu0.0uuuuuuuu5.0uuuuuuuu1.0uuuuuuuu0.0
9.10uuuuuuuu20.0uuuuuuuu21.0uuuuuuuu22.0
/end/
```

- 最初の8行はFOPEN2の入力データ、それ以降はALPSの入力データになる。
- 最初のrunで計算した計算値を実験データとみなして、次のrunでsearchする。その際、ポテンシャルパラメーターの値を少し変えたところから始めて、searchさせている。
- 1番目、2番目のrunでは角度を $0^{\circ} \sim 180^{\circ}$ を 5° 間隔で計算している。これを 1° 間隔にするため、もう一度3回目のrunで再計算しファイルに出力している。前のrunの値を保持するので、3回目のrunではポテンシャルパラメーターの値は入力する必要はない。
- 「/run/」の行は、空白行でもよい。

(例3) 実験データを読み込んで search する場合

```
****_ALPS_control_data_****
03:OLD::data/exp/dca56
11:new::.../data/xout/result.dat
12:new::.../data/xout/pot.dat
06:old::alps.outlist
-----INPUT DATA-----
d+40Ca_56MeV_searchNo.2
1.000000002.0000000040.000000001.0000000020.000000001.000000000.0
2.0000000056.000000000.10000000180.0000000040.0
3.000000003.0000000020.0
4.0100000040.000000001.200000000.750000001.000000001.000000000.0
4.020000005.000000001.300000000.550000001.000000001.000000000.0
4.030000005.000000001.300000000.550000002.000000001.000000000.0
4.040000001.25
4.050000006.000000001.000000000.750000001.000000001.000000000.0
5.000000003.0
8.100000001.000000001.000000000.000000000.000000000.000000000.0
d+40Ca_56MeV_searchNo.2
3.000000000.0
6.000000000.00000000180.000000001.0
8.100000000.000000000.000000000.000000005.000000001.000000000.0
9.1000000011.000000000.0000000012.0
/end/
```

- 最初の6行はFOPEN2の入力データ、それ以降はALPSの入力データになる。
- 実験データは3番の機番のファイルから読み込む。
- searchした結果のポテンシャルで 1° 間隔の再計算を行い、ファイルに出力している。
- imaginary potentialの深さ W_0 と W_D については、searchする際starting valueを等しくしたいが、値としては別々にsearchしたいので、KPASERとして指定する値を一方は1.0、他方は2.0と異なるものになっている。radius parameter r_{0I} と r_{0ID} については、searchする間も等しい値にしておきたいので、starting value, KPASERともに互いに同じ値を指定している。

(例5) grid 計算をする場合

```
****_ALPS_control_data_****
*_03:OLD: data/exp/dca56
*_04:old: ../fort/pni56BG.dat
*_06:old: alps.outlist
_999:
-----INPUT_DATA-----
original_data
1.0_58.0_1.0_28.0_0.50_0.0
2.0_28.0_0.100_180.0_20.0
3.0_0.0
4.01_48.76099_1.170_0.75
4.02_3.460000_1.3200_0.53414
4.03_5.213791_1.3200_0.53414
4.04_1.27075
4.05_6.20_1.010_0.7500
4.06_0.00_1.010_0.7500
6.00_0.0_180.0_5.0

grid_calculation(V,r0I_change)
3.1_3.0_2.00_10.0_0.05_10.0
4.01_40.00_1.170_0.75_1.00
4.02_3.460000_1.0000_0.53414_0.0_2.0
4.03_5.213791_1.0000_0.53414_0.0_2.0
6.11_120.0_0.01_0.05
6.12_120.0_0.01_0.05
9999.0
```

- 最初の6行は FOPEN の入力データ、それ以降は ALPS の入力データになる。この例ではこのまま FOPEN2 でも読み込み可能。
- 1 回目の run ではポテンシャルをパラメーターで読み込んで計算する。2 回目でポテンシャルのパラメーターを等間隔で変化させる grid 計算を行い、1 回目との違いの χ^2 を求めるようにしている。search は行わない。
- この例では、第1パラメーターとして V_0 を 40.0 から始めて、2.0 ずつ 10 回変化させる。また第2パラメーターとして r_{0I} と r_{0ID} を 1.00 から 0.05 ずつ 10 回変化させる。そのたびに (10 × 10 回)、 χ^2 を計算し出力を行う。