

研究員報告書

第 10 号

(1989.3)

岡 山 理 科 大 学
岡山理科大学情報処理センター

岡山市理大町1-1
Tel (0862)52-3012(直)

目 次

(昭和63年度)

1. 2原子散乱モデルによる 180° 表面散乱			
教養部	竹内 渉	-----	1
2. SASの利用者環境整備			
理学部・応用数学科	山本 英二	-----	9
3. 金属錯体のX線結晶解析			
理学部・化学科	柴原 隆志	-----	11
4. X線回折による吸着構造解析			
理学部・化学科	森重 国光	-----	13
5. 層状不整格子のX線回折強度計算プログラム			
理学部・化学科	林 宏哉	-----	17
	加藤 至宏		
6. 分子軌道法によるPotential計算			
理学部・応用物理学科	中川 幸子	-----	21
7. Square-Well 流体の動径分布関数			
工学部・応用化学科	宮野 善盛	-----	23
8. 多重辞書類似度法の辞書作成のためのカテゴリ内クラス タリング実験			
工学部・電子工学科	塩野 充	-----	27
大学院システム科専攻	大倉 充		
9. 部分線形パラメータをもつ放物・楕円形偏微分方程式の 数値解			
工学部・電子工学科	塚本 幸雄	-----	31
10. 多重辞書方式による文字認識に関する研究			
工学部・電子工学科	橋本 礼治	-----	37
大学院システム科学専攻	王 暁文		
11. 熱ルミネッセンスカロリメータ中の電磁カスケードシャ ワーの計算			
工学部・電子工学科	山本 勲	-----	41

2 原子散乱モデルによる 180° 表面散乱

教養部 竹内 渉

概 要

2 原子散乱モデルに基づいた数値計算によって、Pt (111) 表面の $[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向に 2 keV Ne^+ イオンを入射させた場合の 180° 後方散乱強度を求めた。

1. 緒 言

結晶の表面構造（例えば、表面緩和、表面再構成、吸着）の研究の 1 つとして、keV 領域の低エネルギーイオン散乱 (low energy ion scattering ; LEIS) を用いて行う方法がある〔1, 2〕。LEIS の原理は、イオンが小角散乱により標的原子の後方にシャドーコーンを形成するという弾性散乱のシャドーイング効果に基づいている。

青野等〔3, 4〕によって考案された LEIS の特殊化、即ち、直衝突イオン散乱分光法 (impact collision ion scattering spectroscopy ; ICISS) は表面構造や表面欠陥に関して定量的な情報を直接的に得ることが出来る為に、表面構造の決定にしばしば利用されている。ICISS では、アナライザーは標的原子と正面衝突する 180° 後方散乱イオンの強度を検出するようにセッ

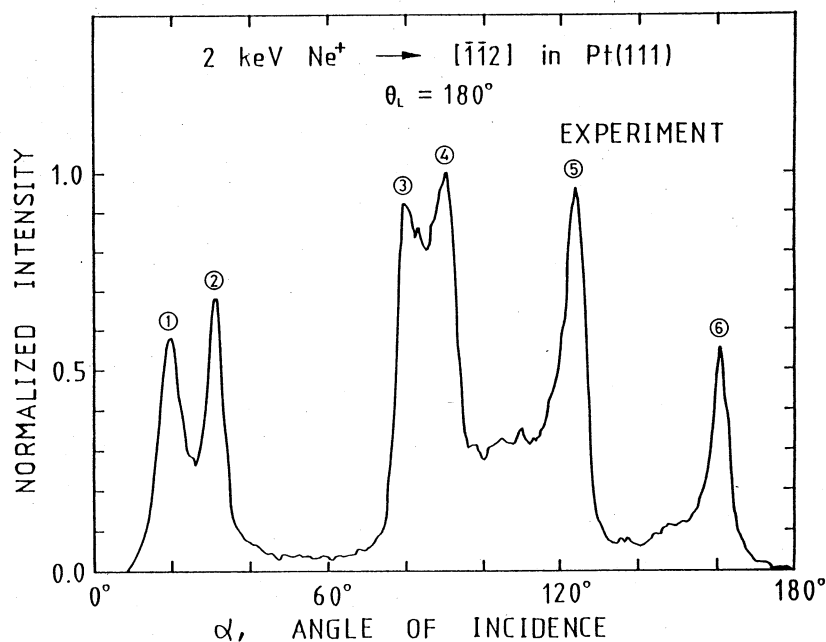


Fig. 1. Experimental intensity of 180° backscattered Ne neutral atoms (NICISS) at a Pt(111) surface〔5〕, where the angle of incidence α is measured from the $[\bar{1}\bar{1}2]$ direction of Pt(111) surface, and θ_L is the total scattering angle.

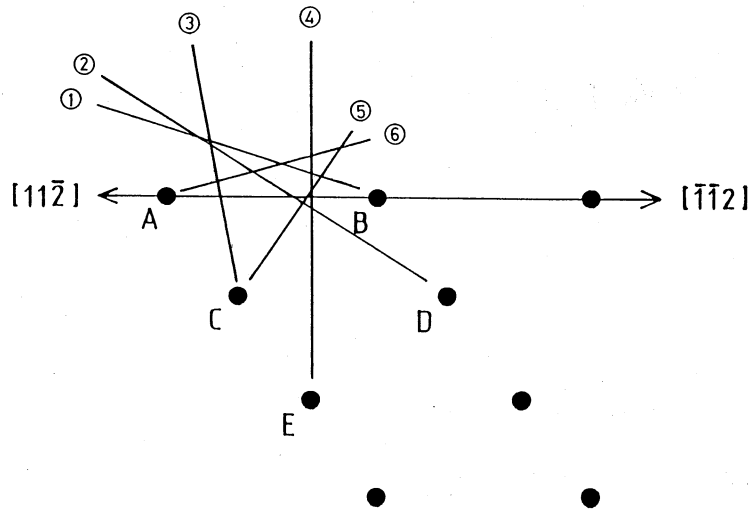


Fig. 2. Schematic trajectories of 180° Ne atoms backscattered from a Pt (111) surface, where the figures of trajectories correspond to those of peaks in fig. 1.

トされている。しかしながら、前述した ICISS では散乱角 θ_L が丁度 180° でない（例えば、 $\theta_L = 157^\circ \sim 166^\circ$ である）為に、第2層以下の原子の位置は表面第1層のブロッキング効果によって正確に決定されないという可能性がある。

Niehus〔5〕は Pt(111) 表面の $[\bar{1}12]$ 方向に 2 keV Ne⁺ イオンを入射させて、 180° Ne 中性原子 (NICISS) の散乱強度を観測した。fig. 1 は表面からの入射角 α に対する 180° Ne 後方散乱強度を表す。6 つのピークの原因は fig. 2 で概略的に表示されている Ne 軌道のシャドーコーンのフォーカシング効果によって説明される。但し、fig. 2 での軌道の数字は fig. 1 でのピークの数字に対応する。Pt(111) 表面の $[\bar{1}12]$ 方向に 2 keV Ne⁺ イオンを照射させた場合、Niehus の 180° Ne 後方散乱 (NICISS) 強度の実験結果〔5〕を、2 原子散乱モデルを用いて解析したので報告する。

2. 2 原子散乱モデル

固体表面における 180° 後方散乱強度は、fig. 3 で表示されている 2 原子散乱モデルを用いて計算できる〔6, 7〕。2 原子散乱モデルでは、入射イオンは 2 個の原子と相互作用する。即ち、1 個の原子 (原子 B) は 180° 後方散乱を生じ、もう 1 個の原子 (原子 A) は後方散乱の前後において小さい角度でイオンを散乱する。強度 I_0 のイオンビームが表面から測った入射角 α で標的表面に入射するとする。また、いまの問題は、入射イオンビームと 2 個の表面原子を含む平面内における 2 次元問題として取り扱われることが出来ると仮定する。

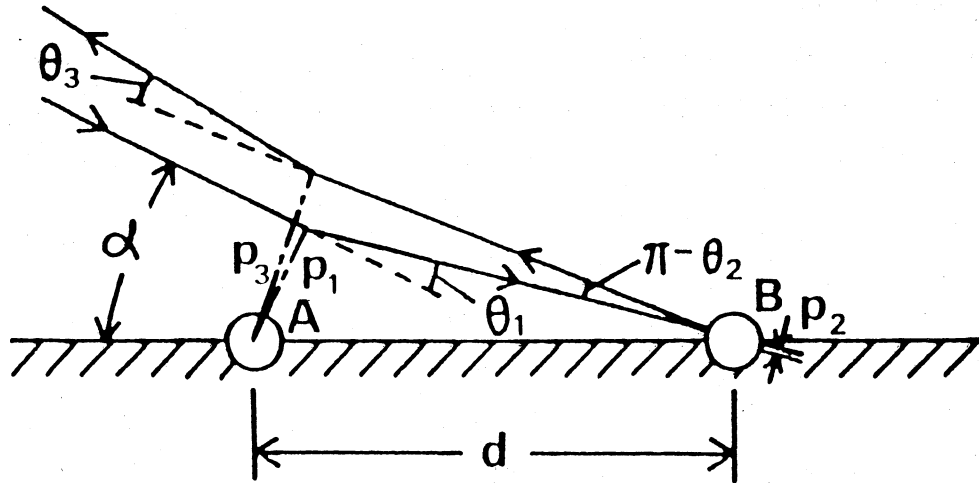


Fig. 3 The two-atom scattering model, where p_1 , p_2 and p_3 are the impact parameters, θ_1 , θ_2 and θ_3 are the scattering angles in the laboratory system associated with p_1 , p_2 and p_3 , respectively, and d is the distance between atoms A and B.

後方散乱原子の角度分布 $I(\theta)$ は

$$\frac{I(\theta)}{I_0} \propto \left| \frac{d\theta_L}{dp_1} \right|^{-1} \quad (1)$$

によって与えられる。但し、 θ_L は全散乱角、 p_1 は入射イオンと原子A間の衝突係数である。入射イオンと後方散乱原子との deflection angle $\Delta\theta$ は

$$\Delta\theta = \pi \cos\phi - \theta_L \quad (2)$$

で与えられる。但し、

$$\theta_L = \theta_1(p_1) + \theta_2(p_2) \cos\phi - \theta_3(p_3) \quad (3)$$

である。また、方位角 ϕ は、いまの2次元問題において0か或いは π である。

ここで、衝突時間と標の原子の熱振動周期との差に注意しなければならない。Pt(111)表面の $[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向に2keV Ne^+ イオンを照射させた場合、Neが原子AとB間を通過する為に 10^{-15} sec オーダーの時間がかかる。一方、固体での原子の熱振動周期は 10^{-13} sec オーダーである。だから、入射粒子の入射過程と出射過程の間で、原子Aは位置を変えないと仮定する事は妥当である。従って、

$$p_2 = p_1 \cos\theta_1 - (d + b_x - a_x) \sin(\alpha - \theta_1) + (a_z - b_z) \cos(\alpha - \theta_1), \quad (4)$$

$$p_3 = -p_1 \cos\theta_1 \cos\theta_2 + [(d + b_x - a_x) \cos(\alpha - \theta_1) + (a_z - b_z) \sin(\alpha - \theta_1)] \sin\theta_2 \cos\phi \quad (5)$$

を得る。但し、 a_x と b_x は、それぞれ原子AとBの変位の表面に対する平行成分を指す。一方 a_z と b_z は、それぞれ原子AとBの変位の表面に対する垂直成分を表す。また、 d は2個の表面原子

AとB間の距離である。

熱振動に対して、標的での原子は互いに自由に運動すると考えられているEinsteinモデルを用いている。Gauss分布が熱振動の確率分布関数 $f(u)$ として使用されている。即ち、

$$f(u) = (2\pi u_1^2)^{-1/2} \exp[-u^2/(2u_1^2)] \quad (6)$$

である。但し、 u は変位、 u_1 は1次元のrms値である。1次元のrms熱振動振幅は固体のDebyeモデル〔8〕を用いて計算出来る。即ち、

$$u_1 = 12.1 \left\{ \left\{ \Phi(x)/x + 1/4 \right\} / (M_2 T_D) \right\}^{1/2} \text{Å} \quad (7)$$

である。但し、 M_2 は振動原子の質量、 T_D はDebye温度、 $\Phi(x)$ はDebye関数、 $x = T_D/T$ 、 T は結晶の温度である。

有限の受け角幅を持った180°後方散乱強度は

$$\frac{I(\theta)}{I_0} \propto \int_{\theta-\Delta}^{\theta+\Delta} \left| \frac{dp_1}{d\theta} \right| d\theta \quad (8)$$

によって計算出来る。但し、 Δ はエネルギーアナライザーの受け幅の半角である、重心系において散乱角を計算する場合、Firsov遮蔽半径〔9〕を使ったThomas-FermiポテンシャルのMolière近似〔10〕を用いている。

3. 計算結果

大角後方散乱において、ピーク強度である入射角 α_m は原子間ポテンシャルと表面熱振動の非等方性の度合いに強く依存する〔7〕。実験結果と同じ受け角幅 $\Delta = \pm 1.5^\circ$ に対する計算のピーク位置 α_m がtable 1で示されている。但し、CAはMolièreポテンシャルでのFirsov遮蔽半径に対するスケールリングファクターであり、記号A-B, A-D, A-C, B-E, B-CおよびB-Aはそれぞれイオンフラックスが原子A, A, A, B, BおよびBのシャドーコーンによって原子B, D, C, E, CおよびAで密集するという原子の対を意味する (fig. 2参照)。また、 u_x と u_z は、表面に対してそれぞれ平行、垂直方面のrms変位である。ところで、非等方の熱振動は第1層原子のみで考慮されており、表面Debye温度の横方向成分はバルクDebye温度230 Kによって決定されている。即ち、 $u_x = 0.066 \text{Å}$ である。 u_z/u_x の値を議論する為に、 $u_z/u_x = 1.9$ は任意に選ばれている。また、 $u_z/u_x = 1.6$ を選んだ理由は後で説明されるであろう。CA = 0.8の場合、計算のピーク位置は α_m はA-C原子対を除いて実験結果と比較的に近い値を示している。CA = 0.8の場合で、 $u_z/u_x = 1.0, 1.6$ さらに1.9に対して計算された180°後方散乱強度が、それぞれfig. 4から6で表示されている。計算による6個のピークの原因は実験の6個のピークの原因に対応する。

表面熱振動における非等方の比 u_z/u_x を定量的に議論する為に、計算された強度のピーク幅(FWHM) $\Delta\alpha$ がtable 2で掲げられている。但し、CA = 0.8である。A-B, A-D, B-Aの原子対に対して、 $u_z/u_x = 1.0$ では計算の $\Delta\alpha$ は実験の $\Delta\alpha$ よりも小さいが、一方 $u_z/u_x = 1.9$ では計算の $\Delta\alpha$ は実験結果よりも大きい。つまり、比 $u_z/u_x = 1.9$ は表面熱振動の垂直成分を過

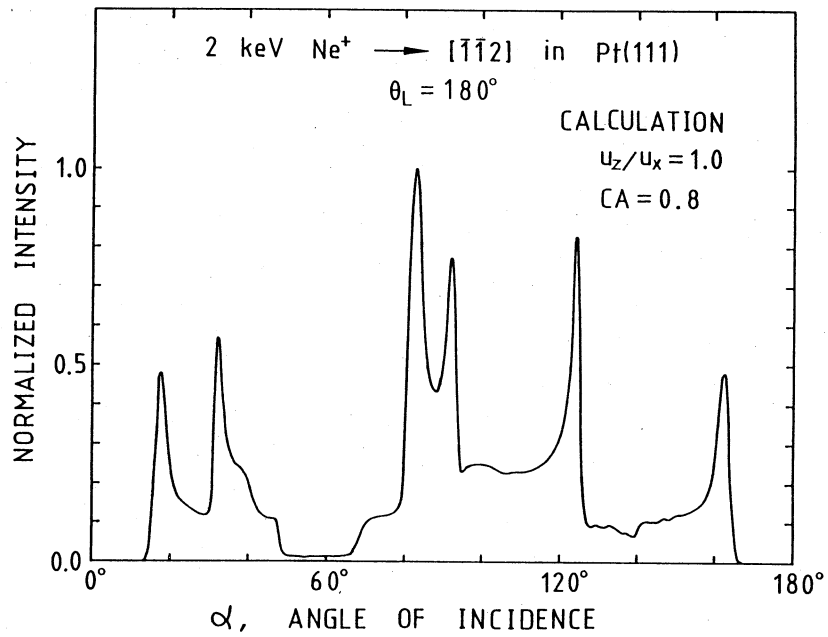


Fig. 4. Calculated intensity of 180° Ne NICISS backscattered from a Pt(111) surface, where CA=0.8 and $u_z/u_x = 1.0$.

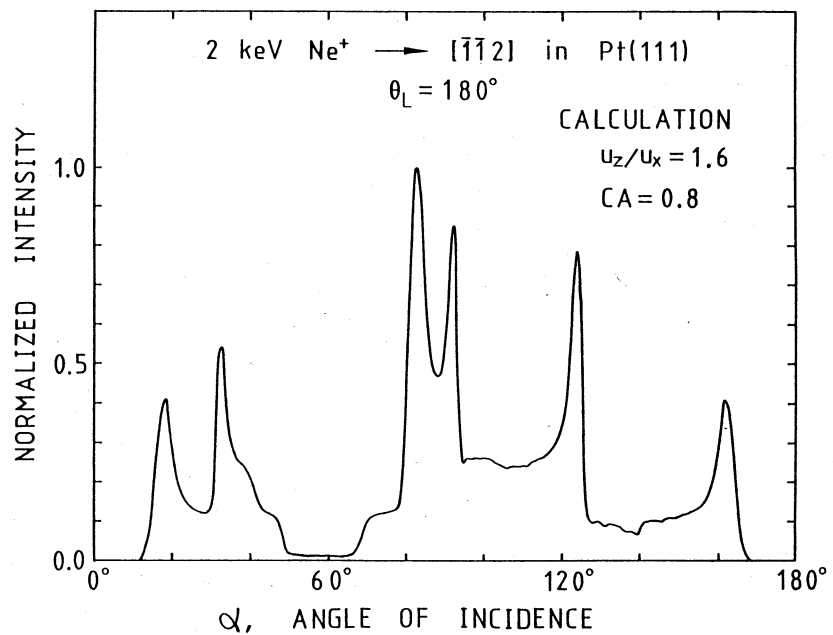


Fig. 5. The same as fig. 4 except $u_z/u_x = 1.6$.

大評価したことを意味する。もしピーク幅 $\Delta\alpha$ が比 u_z/u_x に比例すると仮定するならば、 $u_z/u_x=1.6$ がPt(111)表面に対してreasonableである。このことより、 $u_z/u_x=1.6$ の計算結果がfig. 5で示され、またtable 1と2でも掲げられている。table 2より、 $u_z/u_x=1.6$ であれば、計算結果の $\Delta\alpha$ は比較的实验結果の $\Delta\alpha$ に一致する傾向があることがわかる。この結果を表面Debye温度で換言すると、Pt(111)表面の表面Debye温度の垂直成分 $T_{D,v}$ は $T_{D,v}=143$ Kであれば、計算結果の $\Delta\alpha$ は実験結果の $\Delta\alpha$ と比較的一致することを意味する。尚、Pt(111)表面の表面Debye温度として、LEEDの実験〔11〕では $T_{D,v}=111$ Kであり、また、decouple-oscillator modelを用いたJackson〔12〕の計算では $T_{D,v}=174$ Kであると報告されている。これらの値と比較すると、2原子散乱モデルを用いて 180° 後方散乱強度の解析で得られた $T_{D,v}=143$ Kはreasonableな値であると言えるであろう。

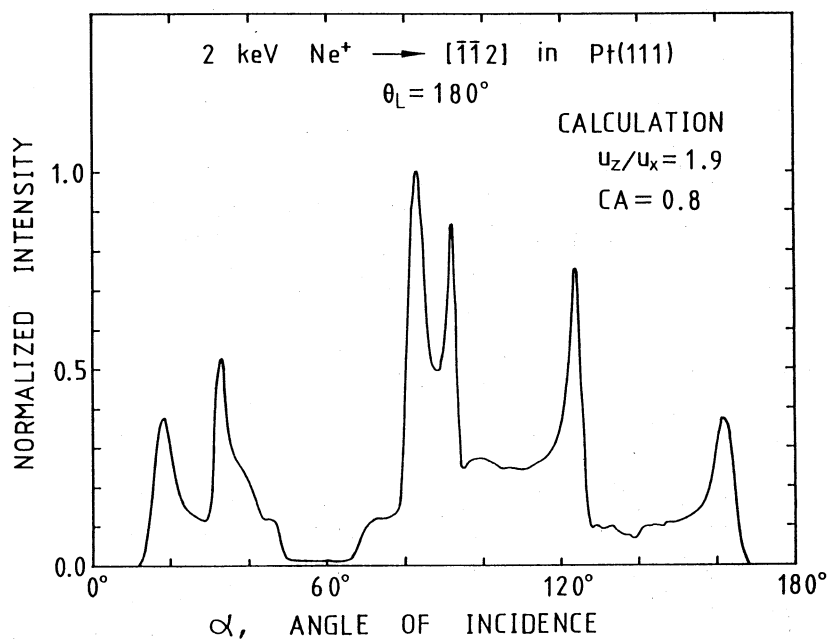


Fig. 6. The same as fig. 4 except $u_z/u_x = 1.9$.

Table 1. Calculated peak positions α_m and experimental ones [5] of 180° Ne NICISS intensity at a Pt(111) surface, where $\Delta = \pm 1.5^\circ$

CA	u_z/u_x	A-B	A-D	A-C	B-E	B-C	B-A
0.7	1.0	16.3°	31.0°	80.2°	93.7°	126.0°	163.7°
0.7	1.6	16.9°	31.2°	80.5°	93.6°	125.6°	163.1°
0.7	1.9	17.2°	31.9°	80.5°	93.5°	125.4°	162.8°
0.8	1.0	17.5°	32.3°	82.8°	92.1°	124.1°	162.5°
0.8	1.6	18.5°	32.8°	82.8°	92.1°	123.7°	161.5°
0.8	1.9	18.8°	33.0°	83.1°	92.0°	123.5°	161.2°
0.9	1.0	19.0°	33.3°	85.1°	90.6°	122.4°	161.0°
0.9	1.6	19.8°	33.8°	85.2°	90.6°	122.1°	160.2°
0.9	1.9	20.3°	34.1°	85.4°	90.5°	121.7°	159.7°
1.0	1.0	20.4°	34.4°	87.4°	89.4°	120.6°	159.6°
1.0	1.6	21.2°	34.7°	87.6°	89.2°	120.6°	158.8°
1.0	1.9	21.7°	35.1°	87.8°	89.2°	120.1°	158.3°
Experiment		19.5°	31.2°	79.8°	90.3°	123.7°	160.9°

Table 2. Calculated peak widths $\Delta\alpha$ (FWHM) and experimental ones [5] of 180° Ne NICISS intensity at a Pt(111) surface, where $\Delta = \pm 1.5^\circ$ and CA=0.8.

u_z/u_x	A-B	A-D	A-C	B-E	B-C	B-A
1.0	3.4°	3.0°	3.4°	2.0°	2.2°	3.5°
1.6	4.5°	3.6°	3.7°	2.0°	3.2°	4.6°
1.9	5.1°	4.1°	4.2°	2.1°	3.6°	5.4°
Experiment	4.7°	3.5°	2.6°	3.5°	5.4°	4.8°

4. 結 論

Pt (111) 表面の $[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向に 2 keV Ne⁺ イオンを入射させた場合, 180° Ne 原子の後方散乱強度の実験結果を解析する為に, 2 原子散乱モデルを用いて数値計算した。実験結果と比較して, 一応満足な計算結果を得た。

参考文献

- [1] J.M. van Zoest, J.M. Fluit, T. T. Vinkand and B.A. van Hassel, Surface Sci. 182 (1987) 179.
- [2] D.R. Mullins and S.H. Overbury, Surface Sci. 193 (1988) 455.
- [3] M. Aono, C. Oshima, S. Zaima, S. Otani and Y. Ishizawa, Japan. J. Appl. Phys. 20 (1981) L 829.
- [4] M. Aono, Nucl. Instr. and Meth. B2 (1984) 374.
- [5] H. Niehus, Nucl. Instr. and Meth. B33 (1988) 876.
- [6] Y. Yamamura and W. Takeuchi, Radiation Effects 82 (1984) 73.
- [7] W. Takeuchi and Y. Yamamura, Nucl. Instr. and Meth. B2 (1984) 336.
- [8] D.S. Gemmell, Rev. Mod. Phys. 46 (1974) 129.
- [9] O.B. Firsov, Soviet Phys. - JETP 6 (1958) 534.
- [10] G. Molière, Z. Naturforsch. 2a (1947) 133.
- [11] H.B. Lyon and G.A. Somorjai, J. Chem. Phys. 44 (1966) 3707.
- [12] D.P. Jackson, Surface Sci. 43 (1974) 431.

SASの利用者環境整備

応用数学科 山本英二

統計解析用汎用システムSAS (Statistical Analysis System) が本学に導入されたのは1987年6月である。統計解析のみならずその前処理に当るデータ処理, 後処理のグラフィックス等が強力でユーザーフレンドリーなシステムインターフェイスが整備されていることから統計解析の研究者, 実務家ばかりでなく事務処理の担当者にも名高いシステムである。数理系の研究者よりむしろ調査データ, 実験データの整理統計解析を行う必要から医薬系や人文社会系の研究者に広く知られ利用されている。

本学ではまだ利用者は一部に限られているがこれは本学でのSAS利用者環境が充分整備されていないためであろう。本年度はこの環境整備, 利用者マニュアルの作成を目指した。

学内の教員学生がSASを利用するとき一番使い易い環境は各研究室からSASを運転出来ることであろう。情報処理センターとの学内通信網に乗ればBSCかTTY通信方式でセンターのM380にアクセス出来る体制は出来ているのでこれが利用出来れば都合が良い。利用者はNEC PC-98シリーズかFACOM FMシリーズのPCを端末として使うのが一般的であろう。幸い昨年上のPCに関しては各通信方式でのエミュレーターが出そろったので一応SASの全てのサービスが受けられる様になった。ウィンドウ・マネージャーを用いたTSS操作や, グラフィックス表示全てが可能になっている。

学内におけるSAS利用者マニュアルの作成が急がれている。小生の研究室では情報処理センター, 4年次ゼミ生の協力も得て, SAS利用者マニュアルの作成を進め, 近く年内に配布出来る予定である。

金属錯体の X 線結晶解析

化学科 柴原隆志

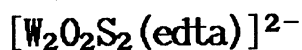
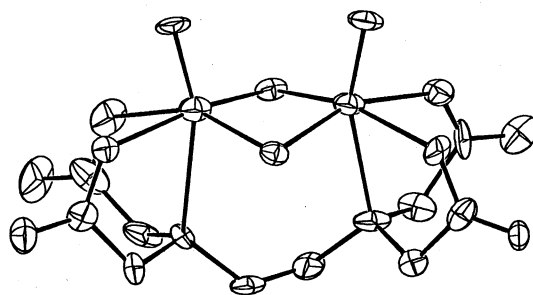
1. はじめに

X線結晶構造解析において位相決定に直接法がよく用いられるようになってきた。私達の研究室では以前より直接法のプログラムとして“MULTAN”を用いていたが、このたび別の直接法プログラム“SHELXS”を導入した。これら二つのプログラムの併用により結晶解析の成功率が高くなった。以下にSHELXSを用いて解いた解析の一例を示す。なお、このプログラムの導入および結晶解析は本学大学院修士課程化学専攻の山崎幹緒君が修士論文作製のために行ったものである。なお、山崎君はこの解析結果を本年4月、日本化学会第58春期年会において発表した。

2. $K_2 [W_2O_2S_2(edta)] \cdot 4H_2O$ の結晶解析

図1に $[W_2O_2S_2(edta)]^{2-}$ の構造を図1に、結晶学的データを表1に、結合距離の一部を表2に示す。

3. プログラム



〔図 1〕

〔表 1〕

Crystal data	
$K_2[W_2O_2S_2(edta)] \cdot 4H_2O$	
fw=902.29	
Crystal system	Triclinic
Space group	PI
a =	7.236(3) Å
b =	24.105(10) Å
c =	7.054(2) Å
α =	95.41(4)°
β =	116.60(2)°
γ =	90.10(4)°
V =	1093.9(7) Å ³
Z =	2
R =	0.0576
D _m =	2.73(g/cm ³)
D _c =	2.74(g/cm ³)

〔表 2〕

Bond distances (Å)	
W-W	2.784(2)
W- μ_2 -S	2.304(7)
W-O _t	1.70 [2]
W-O	2.11 [2]
W-N	2.46 [2]

X線回折による吸着構造解析

化学科 森重国光

1. 緒言

微細結晶表面に吸着した気体の粉末X線回折測定から吸着構造を解析するために、必要とされるプログラムを開発した。

2. データ解析

グラファイト基底面のような均一表面に吸着した気体は低温において二次元結晶を形成する。二次元結晶の粉末X線回折パターンはその二次元性のためにいわゆる「のこぎりの歯状」と呼ばれる高角側に尾を引いた回折プロファイルを与える。回折ピーク位置は二次元結晶の単位格子の形と大きさに関する情報を、回折強度は単位格子内における吸着気体分子の配列の情報を、そして回折ピーク幅は二次元結晶の大きさあるいは結晶性に関する情報を与えてくれる。X線回折強度は次式によって与えられる。

$$I(Q) = \sum_r S |F_r|^2 M_r P(Q) I_p(Q) + I_b(Q) \quad (1)$$

ここでQは散乱ベクトル、rは回折ピークの番号、Sは尺度因子、 F_r は構造因子、 M_r は多重度、 $P(Q)$ は分極因子、 $I_p(Q)$ は回折プロファイル関数、そして $I_b(Q)$ はバックグラウンド強度を示す。

回折プロファイル関数としてGaussianとLorentzianの2通りを用いることができる。

Gaussian line profile 関数は

$$I_p(Q) = f \cdot \frac{1}{2r} \left[\frac{\pi}{Qq_0} \right]^{1/2} \int_0^{\pi/2} d\psi (\cos\psi)^{1/2} \exp\left[-\left(\frac{Q\cos\psi - q_0}{r}\right)^2\right] \\ + (1-f) \frac{1}{\xi r} \left(\frac{1}{Qq_0}\right)^{1/2} \int_0^{\pi/2} d\psi e^{-\left(\psi/\xi\right)^2} \exp\left[-\left(\frac{Q\cos\psi - q_0}{r}\right)^2\right] \quad (2)$$

Lorentzian line profile 関数は

$$I_p(Q) = f \frac{\sqrt{\pi}}{2\delta} \int_{-\infty}^{\infty} dQ' \frac{2\pi}{\sqrt{(k^2 + Q'^2 + q_0^2)^2 - (2Q'q_0)^2}} \int_0^{\pi/2} d\psi \exp\left[-\frac{(Q - (Q'/\cos\psi))^2}{\delta^2}\right] \\ + (1-f) \frac{\sqrt{Q}}{\delta\xi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dQ'}{\sqrt{Q'}} \frac{2\pi}{\sqrt{(k^2 + Q'^2 + q_0^2)^2 - (2Q'q_0)^2}} \int_0^{\pi/2} d\psi \exp\left[-\left\{\frac{\psi^2}{\xi^2} + \frac{(Q - (Q'/\cos\psi))^2}{\delta^2}\right\}\right] \quad (3)$$

で与えられる。(1) 各記号の意味は文献(1)を参照されたい。前者は固体表面構造と整合した吸着構造を持つ二次元結晶に、後者は不整合な二次元結晶に適した回折プロファイル関数である。しかし、回折プロファイルの微細構造を問題としない限り、両者はほぼ同様な理論曲線を与える。

実測データへの非線形最小二乗法によるあてはめは中川および小柳らによって開発された「最小二乗法標準プログラム SALS」(2) を利用して行った。

3. 結果と考察

Fig 1 と Fig 2 はグラファイト表面に吸着した塩化メチルの X 線回折パターンを示す。回折パターンの吸着密度依存性および温度変化から 2 種類の二次元結晶の形成が示される (α および β 相)。低吸着密度相である α 相は約 118 K で融解し、高吸着密度の β 相はより高い融点を持つ。回折ピーク強度の吸着量依存性から、 α 相の単分子層容量は約 $0.05 \text{ 分子}/\text{\AA}^2$ 、 β 相のそれは約 $0.07 \text{ 分子}/\text{\AA}^2$ と推定される。図中に示される理論曲線は Gaussian line profile によった。

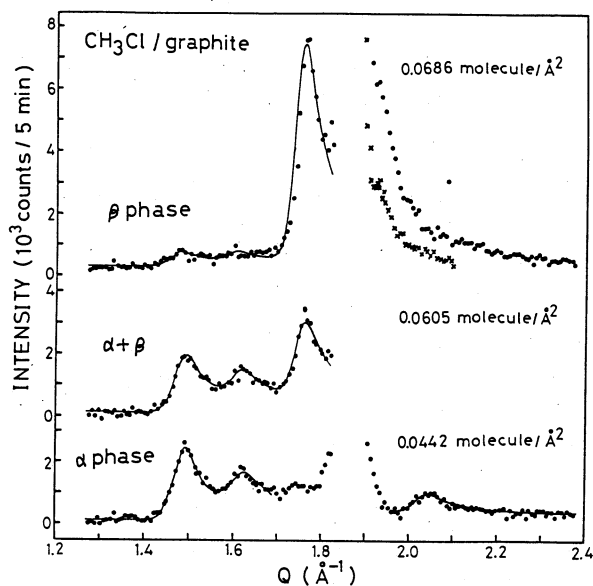


Fig. 1 X-ray scattering profiles of CH_3Cl on graphite as a function of coverage at a constant temperature of 99.7 K. To improve clarity the half of the data point is not shown in these and succeeding diffraction profiles. The solid lines are fits the data as described as in the text. Crosses represent a scan done in a better resolution.

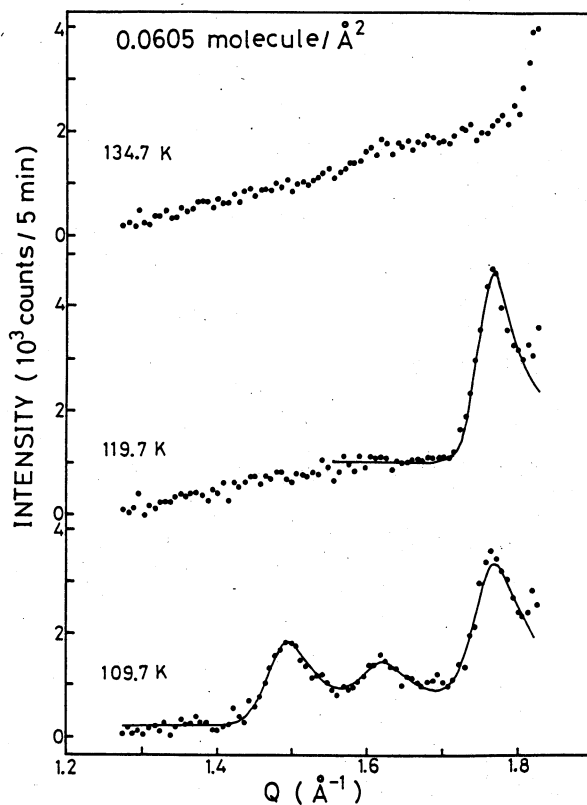


Fig. 2 X-ray scattering profiles of CH_3Cl on graphite at a coverage of $0.0605 \text{ molecule}/\text{\AA}^2$ and several temperatures. The solid lines are fits to the data as described in the text.

α 相の回折測定をより広い角度範囲で行ったところ (測定温度 30 K), 計 6 本の回折ピークの存在が認められた。これらのピークは $a = 5.04$, $b = 7.68 \text{\AA}$ の二次元直方格子で指数付けできること

が図的方法によってわかった。消滅則から、 α 相結晶は二次元空間群Pgに属することが示される。単分子層容量の値から、単位格子は2分子の CH_3Cl を含むことも結論できる。単位格子内における CH_3Cl 分子の配列を決めるため、現在さらに回折強度の解析を進めている。

β 相は、極く最近になって報告された原子線散乱実験とMolecular Dynamics計算とからの吸着モデル⁽³⁾に一致することがわかった。この相は35 Kで $a = 4.26$, $b = 6.38 \text{ \AA}$ の直方格子を形成しており、分子軸は表面の法線と 18° の角度を成すように分子が立ち上がっている。この構造は二次元空間群の pmg に属する(特殊等価点の2C位置)。

参考文献

- (1) P. W. Stephens, P. A. Heiney, R. J. Birgeneau, P. M. Horn, D. E. Moncton and G. S. Brown, Phys. Rev. B29 (1984) 3512.
- (2) T. Nakagawa and Y. Oyanagi, in Recent Developments in Statistical Inference and Data Analysis, edited by K. Matsusita (North Holland, New York, 1980), P. 221.
- (3) J. Carlos Ruiz-Suarez, Michael L. Klein, Michael A. Moller, Paul A. Rowntree, Giacinto Scoles, and Jiaxu, Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 710.

層状不整格子の X 線回折強度計算プログラム

化学科 林 宏 哉
加藤 至 宏

§ 1 はじめに

積層不整による構造のみだれを持つ結晶による X 線回折理論は Landau, Lifschitz によって与えられ、その後 Hendrick, Teller により発展させられ、さらに柿木, Wilson, Zachariasen, Warren, Patterson らにより様々な不整形に対応する X 線回折強度計算式が工夫されてきた。

近年層状化合物の研究が急速に進歩したため、新しい不整の形がいくつも見い出され始めている。例えば電荷密度波 (CDW) による格子歪では、元の格子と不整合になるため、従来の整合格子の積層不整を考えた計算式は適用できない。またノンコンメンスレイトの格子では、一次元的に全く周期の異なる格子が積み重なり、積層方向で整合、それに垂直な一方向で不整合という格子を形成している。このような新しい系については、従来の格子不整計算はやはり適用できない。

これを解決する試みは山本によって行われた。それによると不整合の周期を新しい次元として取入れ、結晶の逆格子空間を三次元より高次の空間にして計算をすすめると回折強度計算が著しく簡略化するという。

以上のように様々な回折強度計算が層状不整格子についてなされているが、ここでは、計算機的能力を生かして、計算時間、計算回数等の削減は考慮せずに、回折理論の根本式に基づいてできるだけ原始的な式で回折強度計算することにして、新しい形の不整構造の回折強度計算にも対応できる回折強度計算プログラムをつくることを目指した。

§ 2 計算式の概略

X 線による干渉性の散乱のみを考えると結晶による X 線の回折強度は、

$$I_{CO} = I_e \cdot \left| \int P(r) e^{\frac{2\pi i(s-s_0) \cdot r}{\lambda}} dv \right|^2 \quad (1)$$

によって与えられる。ここで $P(r)$ は結晶内の電子密度で、積分は結晶全体について行う。 S_0 は入射 X 線の進行方向を表わし、 S は散乱 X 線の方向を表わす単位ベクトルである。いま単位格子の大きさが a_1, a_2, a_3 および b_1, b_2, b_3 の 2 種類の格子 A, B が層状に積み重なった結晶を考える。このときそれぞれの格子の n 番目の層での原点を表わすベクトルを A_n, B_n とするならば、A, B それぞれの格子点のベクトルは

$$\bar{A} = n_1 a_1 + n_2 a_2 + A_n \quad (2)$$

$$\bar{B} = m_1 b_1 + m_2 b_2 + B_n \quad (3)$$

$$A_n = \alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 + p_3 (a_3 + b_3) \quad (4)$$

$$B_n = \beta_1 b_1 + \beta_2 b_2 + q_3 (a_3 + b_3) - b_3 \quad (5)$$

なお, n, m, p, q は整数とするが, α, β は整数でなくともよい。

以上の条件で(1)を計算すると,

$$\begin{aligned} & \int p(r) e^{\frac{2\pi i(s-s_0) \cdot r}{\lambda}} dv \\ &= \sum_{n_1 n_2 p_3} \frac{2\pi i(s-s_0)}{\lambda} (n_1 a_1 + n_2 a_2 + p_3 (a_3 + b_3)) \times \int_A p(r') e^{\frac{2\pi i(s-s_0) r'}{\lambda}} dv' \\ &+ \sum_{m_1 m_2 q_3} \frac{2\pi i(s-s_0)}{\lambda} (m_1 a_1 + m_2 a_2 + q_3 (a_3 + b_3) - b_3) \times \int p(r'') e^{\frac{2\pi i(s-s_0) r''}{\lambda}} dv'' \end{aligned} \quad (6)$$

(ただしここでは $\alpha = \beta = 0$ とおいた。)

従って強度式は

$$\begin{aligned} I_{co} &= I_e \langle |F_a|^2 \rangle \times \frac{\sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} \cdot N_1 \cdot a_1 (s-s_0) \right] \sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} \cdot N_2 \cdot a_2 \cdot (s-s_0) \right]}{\sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} \cdot a_1 (s-s_0) \right] \sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} a_2 (s-s_0) \right]} \\ &\times \frac{\sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} \cdot P_3 (a_3 + b_3) (s-s_0) \right]}{\sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} (a_3 + b_3) (s-s_0) \right]} \times e^{-\frac{2\pi}{\lambda} i r m (s-s_0)} \\ &+ |F_b|^2 \times \frac{\sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} \cdot M_1 \cdot b_1 (s-s_0) \right] \sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} \cdot M_2 \cdot b_2 (s-s_0) \right]}{\sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} b_1 (s-s_0) \right] \sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} b_2 (s-s_0) \right]} \\ &\times \frac{\sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} \cdot Q_3 \cdot (a_3 + b_3) (s-s_0) \right]}{\sin^2 \left[\frac{\pi}{\lambda} \cdot (a_3 + b_3) (s-s_0) \right]} \times e^{-\frac{2\pi i}{\lambda} b_3 (s-s_0)} \end{aligned} \quad (7)$$

ここで $F_a = \int_A p(r) e^{\frac{2\pi i}{\lambda} (s-s_0) r} du$ であり,

$$F_b = \int_B p(r) e^{\frac{2\pi i}{\lambda} (s-s_0) r} du \text{ である。}$$

ところで N, P, M, Q が十分に大きければ, $\sin^2 N x / \sin^2 x$ の形の関数は $X = n\pi$ に対して 1 となり他の X の値に対してはほとんどゼロである。従って, (7) 式の散乱強度は, 次の条件を満足するときだけ著しく大きな値となる。

$$\left. \begin{aligned} a_1 (s-s_0) &= \lambda h_1 \\ a_2 (s-s_0) &= \lambda h_2 \\ (a_3 + b_3) (s-s_0) &= \lambda h_3 \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

又は

$$\left. \begin{aligned} b_1 (s-s_0) &= \lambda k_1 \\ b_2 (s-s_0) &= \lambda k_2 \\ (a_3 + b_3) (s-s_0) &= \lambda k_3 \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

ここで h, k は整数である。従って $h_1, h_2, h_3, k_1, k_2, k_3$ の6つのラウエの指数に対応するところで回折が顕著になる。

さて回折が表われる面間隔 d と指数の関係は a_1^*, a_2^*, a_3^* および b_1^*, b_2^*, b_3^* を逆格子ベクトルとすると,

$$\bar{h} = h_1 a_1^* + h_2 a_2^* + h_3 (a_3^* + b_3^*) + k_1 b_1^* + k_2 b_2^* + k_3 (a_3^* + b_3^*) \quad (10)$$

$$d = \frac{1}{|\bar{h}|} \quad (11)$$

§ 3 フローチャート

§ 2 で求めた計算式に従ってプログラミングを実行すればよいわけだが、例えば、積分 F_a, F_b の部分はブラックボックスのまま説明を省いた。これは、次の理由による。この部分は、従来の構造解析のプログラムをそのまま用いることが可能なので、それをサブルーチンとして用いることにした。また結晶構造解析のプログラムはUNICSの結晶構造解析プログラムとして完成しており誰でも自由に使用できる。このプログラムの説明は「X線結晶解析」桜井敏雄著裳華房発行に詳しいので説明を省略させていただいた。

3-1 入 力

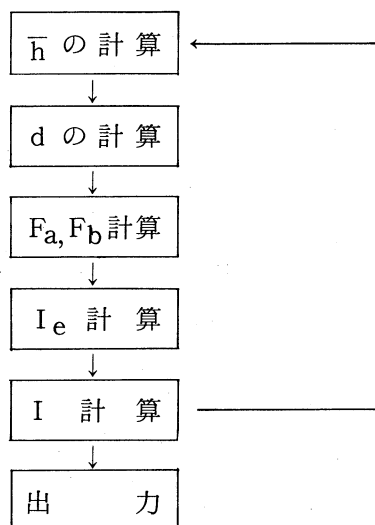
原子座標, 原子散乱因子表, 対称操作マトリックス, 多重度, 回折強度データ (指数, 強度)
格子定数, X線波長, 積層モード設定

上記のうちアンダーライン部が今回の積層不整の計算に用いる部分である。

3-2 出 力

ラウエ指数, 回折強度計算値, 回折強度実験値, 誤差, $\sin\theta/\lambda, d,$

3-3 強度計算



ラウエ指数のデータの組がなくなるまで
繰返す。

3-4 積層モードの選択

§ 2 で示した計算式では、A, Bの全く異なる格子が一層ずつ積み重なるという仮定にもとづく計算式を示した。しかしこれ以外に、A, Bの層が任意の数層ずつ積み重なるという仮定でも計算したい場合がある。そのときは、§ 2, (4), (5)式の A_n , B_n を変更すればよい。そしてそれは§ 2(7)式の \sim で示した位相部分に影響を与えるだけであるから、この部分を外部関数にして任意に変更できるようにしておいた。

§ 4 プログラムの実行

現在までに§ 3の3-3の一部までプログラムを作製しているが、まだ全体の完成に至らなかった。今年度も引続きプログラミングを継続して完成にもってゆきたいと考えている。従ってプログラムリストおよび実行例は、本年度の仕事が完成した時点で公表させていただく予定である。

分子軌道法による potential 計算

応用物理学科 中川幸子

イオンビームを固体に照射すると表面だけでなく、固体深部に至るまでその物性が改質される。また一方で、打ち込んだ不純物元素に注目すれば新しい物理的環境を得て、不純物中心として新たな機能を持ち得る。イオンビームはこうした働きによって、標的固体に、素材としての新たな実用性を加味することが多い。注入されるイオンの量が制御し易く、照射効果に付いては、理論的にもまたモデル計算によっても予測がつくと言う背景から、実際にイオンビームは、制御性の良い手段と見なされている。

これまで、シリコンやゲルマニウムといった単原子半導体や、単体金属への原子イオン注入については、個別的なケースを除けば、ほぼ、理論的アプローチもモデル計算も信頼できる段階にある。しかし今後は、標的の固体として、多成分系の半導体や、多元系の合金、更に有機物が対象となり、用いるイオンビームも、一個一個がバラバラのイオン化された原子ではなく、分子もしくはクラスタービームへと、イオン照射の理論が適用される系は、複雑さをまして行く。このように技術革新が進む中で、イオン照射の理論が、単に一般的なもの⁽¹⁾でなく、個別的なものをも含める議論でなければ、今後の複雑な系への理論的予測に正確さを期する事は難しい。

固体内部の改質やイオン注入を実用化に向けて利用しようとする際、用いられるイオンビームのエネルギーと速度は、固体中で、イオンと固体内原子もしくは固体内原子同士の弾性的な2体衝突が、エネルギー散逸の主たる素過程であるとみられる⁽²⁾範囲にある。こうした2体衝突は、中心力場による弾性散乱の問題として、その場（原子間ポテンシャル）が正確に記述されるかどうかにか成り果がかかっている。

これまでGordon-Kimの統計モデル⁽³⁾を用いて、2体衝突のための原子間ポテンシャルを計算し、固体中での多数の原子衝突の結果起こるスパッタリング⁽⁴⁾やイオンミキシング⁽⁵⁾、また注入したイオンの貫入深さ⁽⁶⁾（飛程）等⁽⁷⁾についても適用し、実験と比較した。ところがこうした中で、統計モデルで計算した原子間ポテンシャルでは説明しきれない現象が残っている。

シリコンへのイオン注入は、半導体デバイスの開発に触発されて、基礎的なデータもよく収集されている事象であるが、 Z_1 -range-oscillation⁽⁸⁾と呼ばれて、シリコン中へのイオン注入の飛程が、イオンの個別性によって強い形式的振動を示すと言うものがある。振動と言うのは、平均値に対して±20%のバラツキが有り、その極大、極小の現れ方が、元素の周期性即ち電子構造と、相関が高いという意味で用いられている。原子の殻構造を考慮した電荷密度を使った原子間ポテンシャルでさえ高々±5%までしか追従できなかった。

従来の統計モデルによる原子間ポテンシャルの評価には2つの問題がある。一つは、低エネルギーの原子衝突を扱う場合は衝突断面積が大きくなり、お互いの外殻、即ち価電子ゾーンでの相互作用

が主となる。外殻は相対に電荷密度が低く、統計的平均を議論する意味が薄れる。他の一つは準分子としての結合状態に付いての扱い方である。これまでは一方の原子の電荷密度は安定位置にある固体内原子のそれであり、衝突に於ても終始、相手の原子の持つ静電場による影響は受けない、と仮定してきた。この2点について、統計モデルの弱点を補い、重なり効果をも考慮する分子軌道法⁽⁹⁾を用いて、その影響を評価することを目的とした。そして Z_1 -range-oscillation に分子効果の寄与の可能性が認められ、その結果を報告した⁽¹⁰⁾。

参考文献

1. F. Ziegler, J. P. Biersack, and U. Littmark, Proc. IPAT'83, Kyoto, T. Takagi (Ed) (Inst. Elect. Eng. Jap., Tokyo, 1983), P. 1861.
2. J. Lindhard, V. Nielsen, M. Scharff and P. V. Thomsen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33, No10 (1963). ; J. Lindhard, M. Scharff, and H. E. Schiott, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33, No 14 (1963).
3. R. G. Gordon and Y. S. Kim, J. Chem. Phys. 56, 3122 (1972).
4. Y. Yamamura, S. Nakagawa and S. Enoki, Secondary Ion Mass Spectrometry SIMS IV, A. Benninghoven et al. (Ed) (Springer, New York, 1984), p. 20.
5. S. T. Nakagawa and Y. Yamamura, Nucl. Instrum. Methods B33, 780 (1988).
6. S. T. Nakagawa and Y. Yamamura, Rad. Effects 105, 239 (1988).
7. 中川幸子 日本物理学会, 1988年秋の分科会 3pE3-3 (1988).
8. F. Besenbacher, J. Bottiger, T. Lausen, P. Loftager and W. Moller, Nucl. Instrum. Methods 170, 183 (1980).
9. I. N. Levine, Quantum Chemistry, (All and Bacon, Boston 1983).
10. S. T. Nakagawa, Rad. Eff. Def. Sol., in press (1989). ; 中川幸子 日本物理学会, 第43回年回 1pG2-4 (1988).

Square-Well 流体の動径分布関数

応用化学科 宮野善盛

緒言

一般に高圧平衡物性は状態式を使って推算されている。混合流体については混合物の状態式が必要となるが、それは、混合物を構成する各純物質の状態式を何らかの方法（混合則）で混合物に拡張することにより得られる。従って本質的には、純物質についての状態式の精度が良くなければならないことは言うまでもなく、高精度の状態式を使えば混合物の平衡物性（混合物性）の推算精度も良くなるのが既に報告されている¹⁾。しかしながら混合物性の推算精度は、混合則にも大きく影響されるはずである。そこで本研究では、先ず Percus-Yevick (PY) 積分方程式から得られる動径分布関数 (RDF) を使って Square-Well (SW) 純流体及び 2 成分系混合流体〔 $1(0.2) < \epsilon_2/\epsilon_1 < 20$, $1 < \sigma_2/\sigma_1 < 2.5$, $0 < y < 0.35$ ($y = \pi\rho\sum x_i\sigma_i^3/6$), $\kappa T/\epsilon_2$ (or $\kappa T/\epsilon_1) = 2$ 〕の内部エネルギーを求め、次にそれらを真値と仮定して SW 混合流体の内部エネルギーを良好に表すような混合則を導出することを試みた（純流体については真値を使用）。

前報では Lennard-Jones ポテンシャル流体について同様の計算を試み良好な結果を得たが、本報ではポテンシャル形の異なる流体に対しても提案した混合則が適用可能かどうかを検討することを目的とした。

内部エネルギーの表式

分子の配置に基づく内部エネルギーは次式で表される。

$$U^0 = U - U^{\text{ideal}} = \frac{2\pi}{V} \sum \sum N_i N_j \int_0^\infty u_{ij}(r) g_{ij}(r) r^2 dr \quad (1)$$

ここで V は体積、 N_i は i 成分の分子数、 r は分子間距離で、 $u_{ij}(r)$ は分子間ポテンシャルであり、本研究では次の SW 流体について検討した。

$$\begin{aligned} u_{ij}(r) &= \infty & \text{at} & \quad r \leq \sigma_{ij} \\ &= -\epsilon_{ij} & \text{at} & \quad \sigma_{ij} \leq r \leq 1.5\sigma_{ij} \\ &= 0 & \text{at} & \quad r \geq 1.5\sigma_{ij} \end{aligned} \quad (2)$$

$g_{ij}(r)$ は $i-j$ ペアの RDF であり、温度・密度及び $u_{ij}(r)$ が既知であれば求められるが、本研究では Throop ら²⁾ の方法を使って PY 積分方程式を数値的に解いて求めた。

前報³⁾では剛体球 (HS) 混合流体の RDF についての近似法を提案したが、SW 流体の分子配置に及ぼす分子サイズの影響は HS 流体の場合と同程度と仮定すると次式で近似される。

$$g_{ij}(r) = g_{ij}^{\text{pure}}(r) + \delta_{ij} \left[g_{ij}^{\text{pure}}(r) - \frac{\lim_{\rho \rightarrow 0} g_{ij}^{\text{pure}}(r)}{1-y} \right] \quad (3)$$

$$\delta_{ij} = (1 - cy) \ln [\sqrt{\sigma_i \sigma_j} \eta / y]$$

$$c = 1.1, \quad \eta = \pi \rho \sum x_i \sigma_i^2 / 6$$

(3)式の右辺第2項は分子サイズの影響を表す項であり、分子サイズの等しい系では次式となる。

$$g_{ij}^{\text{pure}}(r) = g_{ij}^{\text{pure}}(r) \quad (4)$$

次に ϵ_2/ϵ_1 の分子配置に及ぼす影響を見積る必要があるが、本研究では最も簡単に、混合物中の $i-j$ ペアの RDF は純 i 成分の RDF で近似できるとした。従って(3)式中の $g_{ij}(r)$ は平均密度 y 、無次元温度 $\kappa T/\epsilon_{ij}$ における仮想純流体の RDF で近似される。

$$g_{ij}^{\text{pure}}(r) = g_{ij}^{\text{pure}}(\kappa T/\epsilon_{ij}, y, r) \quad (5)$$

異種分子ペアのポテンシャルパラメータについては次式を仮定した。

$$\sigma_{12} = (\sigma_1 + \sigma_2) / 2$$

$$\epsilon_{12} = \epsilon_1^2 - \alpha \epsilon_2^{\alpha-1}$$

$$= \epsilon_1 (\alpha=1) = \epsilon_2 (\alpha=2) = \sqrt{\epsilon_1 \epsilon_2} (\alpha=1.5)$$

結果と考察

図に内部エネルギーの混合量（過剰量）と組成の関係を示す。

$$\frac{\Delta U}{N \kappa T} = \frac{U^c}{N \kappa T} - \frac{\sum x_i U_i^c}{N \kappa T} \quad (= \frac{U^{\text{excess}}}{N \kappa T})$$

Fig1-4に $\sigma_1/\sigma_2 = 0.6$, $\epsilon_1/\epsilon_2 = 1$ の場合について密度を低密度から高密度まで変化させたときの結果を示すが、ほぼ実線で示した本研究で提案した混合則を使った結果は○印で示したPY結果とよく一致しているのがわかる。Fig5-7には、その他の種々の混合系についての結果を示すがほぼ良好な結果が得られ、本研究で提案した混合則は Lennard-Jones 流体のみならずポテンシャル形の異なる SW流体に対しても適用できることがわかった。

引用文献

- (1) Fukuzato et al., J. Chem. Eng. Jpn., 15, 167 (1982)
- (2) Throop & Bearman, J. Chem. Phys., 44, 1423 (1966)
- (3) Miyano & Masuoka, J. Chem. Eng. Jpn., 18, 53 (1985)

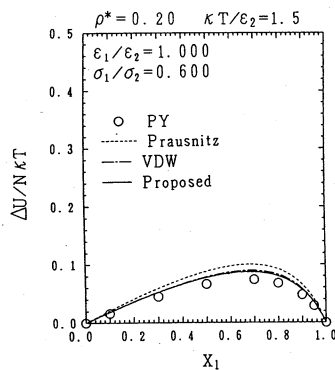


Fig.1 Excess internal energy of mixing. $\epsilon_1/\epsilon_2=1$, $\sigma_1/\sigma_2=0.6$

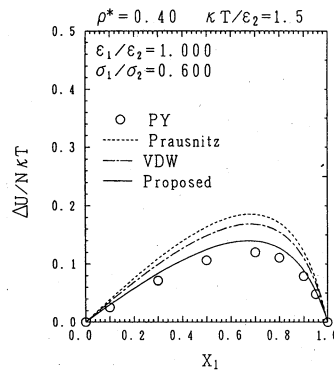


Fig.2 Excess internal energy of mixing. $\epsilon_1/\epsilon_2=1$, $\sigma_1/\sigma_2=0.6$

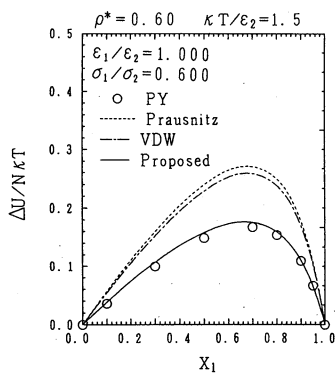


Fig. 3 Excess internal energy of mixing. $\epsilon_1/\epsilon_2=1$, $\sigma_1/\sigma_2=0.6$

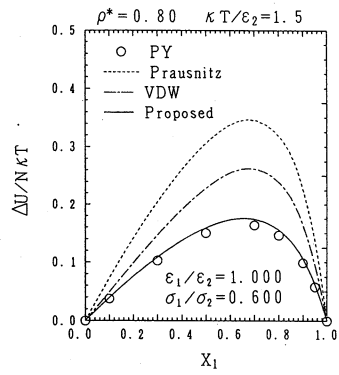


Fig. 4 Excess internal energy of mixing. $\epsilon_1/\epsilon_2=1$, $\sigma_1/\sigma_2=0.6$

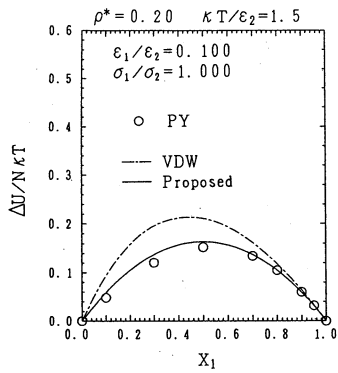


Fig. 5 Excess internal energy of mixing. $\epsilon_1/\epsilon_2=0.1$, $\sigma_1/\sigma_2=1$

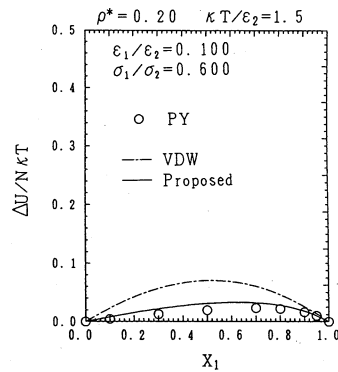


Fig. 6 Excess internal energy of mixing. $\epsilon_1/\epsilon_2=0.1$, $\sigma_1/\sigma_2=0.6$

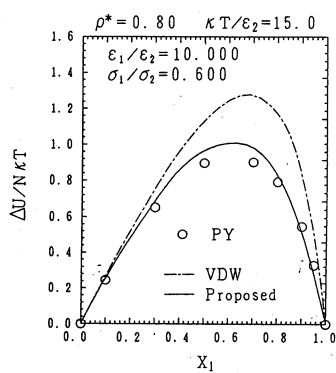


Fig. 7 Excess internal energy of mixing. $\epsilon_1/\epsilon_2=10$, $\sigma_1/\sigma_2=0.6$

多重辞書類似度法の辞書作成のためのカテゴリ内クラスタリング実験

On the Intra-category Clustering
to make Multidictionary Patterns
for Multidictionary Templet Matching Method.

工学部電子工学科 教授 塩野 充
システム科学専攻 D2 大倉 充

〔1〕まえがき

近年、文字認識の最も基本的な手法である重ね合せの手法の手書き文字認識への応用が活発化している。その手法の一つとして、手書きによる著しい変形にも対処できる様に各カテゴリに複数個の辞書パターン（多重辞書パターンと呼ぶ）を用意する方法が提案されている⁽¹⁾。しかし、多重辞書パターンの最適な作成方法は明確化されていない。本研究では、最適な多重辞書パターンを作成するために種々のクラスタリング手法を用いてカテゴリ内クラスタリングを行い、分散比⁽²⁾を用いてその性能評価を行った。その結果得られた最も適したクラスタリング手法を採用して多重辞書パターンを作成し、多重辞書類似度法⁽¹⁾による手書き漢字認識実験を行った。多重辞書類似度法とは、各カテゴリに対して多重辞書パターンを用意し、入力サンプルとの間で類似度を計算し、最大の類似度を与える辞書パターンの所属するカテゴリを決定カテゴリとする方法である。

〔2〕クラスタリング手法

本実験では、各クラスタを近いもの同士から逐次集めていく過程で、クラスタ間でサンプルの入れ替えが生じず、常に同じ結果の得られる階層的手法⁽³⁾を用いた。表1に今回用いたクラスタリングアルゴリズムとサンプル間の近さの尺度を示す。

（2-1）クラスタリングアルゴリズム

- (1) 最長距離法（最遠隣法）⁽³⁾：クラスタを代表させるサンプルを、併合せようとする2つのクラスタの間で最も遠くにある2つのサンプルとし、その2サンプル間の距離をクラスタ間の距離とするものである。
- (2) 群平均法（群間平均法）⁽³⁾：一つのクラスタについての代表点を1点で置き換えるのではなく、クラスタ間の距離を、一方のクラスタ中の全サンプルともう一方のクラスタ中の全サンプルとの間の全ての距離の平均値をもって定義するものである。
- (3) Ward法⁽³⁾：クラスタC⁽¹⁾に属する全てのサンプルについてのクラスタ平均値（重心）か

らの偏差 2 乗和 $I^{(i)}$ を情報損失量と定義し、クラスタ $C^{(i)}$ と $C^{(j)}$ が併合してクラスタ $C^{(ij)}$ となる時の情報損失量の増加量 $\Delta I^{(ij)}$

$$\Delta I^{(ij)} = I^{(ij)} - I^{(i)} - I^{(j)} \quad (1)$$

をクラスタ $C^{(i)}$, $C^{(j)}$ 間の距離とするものである。

表1 クラスタリング手法の種類

クラスタリング アルゴリズム	サンプル間の 近さの尺度
(1) 最長距離法	(a) ユークリッド距離 (b) 類似度 (c) 点相関係数
(2) 群平均法	(a) ユークリッド距離 (b) 類似度 (c) 点相関係数
(3) Ward 法	(a) ユークリッド距離

(2-2) サンプル間の近さの尺度

本研究では近さの尺度として、ユークリッド距離、類似度、点相関係数⁽³⁾の3種類を用いた。点相関係数とは、表2に示す四分表 (X_i , X_j は、それぞれ i 番目と j 番目のサンプルを表す) の各値 (a, b, c, d, p は個数で、例えば a は、画素値 1 と 1 の組合せが現れる箇所の数を示す) をピアソンの積率相関係数⁽³⁾にあてはめたものであり、次式の S_{ij} で定義される。

$$S_{ij} = \frac{ad - bc}{\sqrt{(a+b)(a+c)(b+d)(c+d)}} \quad (-1 \leq S_{ij} \leq 1) \quad (2)$$

表2 点相関係数の四分表

		X j		合計
		1	0	
X i	1	a	b	a + b
	0	c	d	c + d
合計		a + c	b + d	p

(2-3) クラスタリング手法の性能評価

本実験では、手書き漢字パターンに対するクラスタリング手法の性能評価を、通常、領域分

割のための最適なしきい値を定める場合に用いられる分散比⁽²⁾を用いて行った。分散比 λ は、式(3)で定義される。

$$\lambda = \sigma b^2 / \sigma w^2 \quad (3)$$

式(3)で、 σb はクラスタ間分散、 σw はクラスタ内分散と呼ばれ、本実験では、それぞれ式(4)、(5)で定義した。

$$\sigma b^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{nc} N_i \| \bar{X}^{(i)} - \bar{X} \|^2 \quad (4)$$

$$\sigma w^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{nc} \sum_{j=1}^{n_i} \| X_j^{(i)} - \bar{X}^{(i)} \|^2 \quad (5)$$

ここで、各変数は、次の意味を持つ。

N : 全サンプル数

N_0 : クラスタの個数

N_i : クラスタ $C^{(i)}$ に含まれるサンプル数

($i = 1, 2, \dots, N_c$)

$X_j^{(i)}$: $C^{(i)}$ に含まれる j 番目のサンプル

($j = 1, 2, \dots, N_i$)

\bar{X} : 全サンプルの平均ベクトル

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{nc} \sum_{j=1}^{n_i} X_j^{(i)} \quad (6)$$

$\bar{X}^{(i)}$: $C^{(i)}$ に含まれるサンプルの平均ベクトル

$$\bar{X}^{(i)} = \frac{1}{N_i} \sum_{j=1}^{n_i} X_j^{(i)} \quad (7)$$

〔3〕 クラスタリング及び認識実験結果

〔3-1〕 実験データ

本実験に用いたデータは、電総研 J I S 第 1 水準手書き漢字データベース E T L - 9 (B 2)⁽⁴⁾である。本実験では、1 カテゴリー 200 サンプルがデータセット番号の順に連続して並ぶ様に編集し直しており、前半の 100 個のサンプルを多重辞書パターン作成 (学習) サンプル、後半の 100 個のサンプルを未知サンプルとして用いた。全カテゴリー数 K は、 $K = 100$ とした。漢字 J I S コードの先頭からの 100 カテゴリーで、画面次数は、 63×64 である。

〔3-2〕 実験結果

図 1 に各クラスタリング手法によって得られた、各カテゴリー当り 2 ~ 10 個までのクラスタの数に対する正規化された平均分散比を示す。正規化された平均分散比とは、カテゴリーごとに得られた最大の分散比 (クラスタ数 N_c が 10 の場合で、100 カテゴリー中 99 カテゴリーまで Ward 法

のときが最大となった)で、そのカテゴリに対して得られた全ての分散比を正規化した後、100カテゴリ全体で平均したものである。この結果より、Ward法によって得られたクラスタ内のサンプルを各クラスタごとに加え合わせた濃度値を持つ辞書パターンを作成し(1カテゴリに対する辞書パターン数は10個とした)認識実験を行った。表3に得られた1位から10位までの各位における平均累積認識率を示す。認識時間は、FACOM/M380(FORTRAN77)で2.79秒/字である。

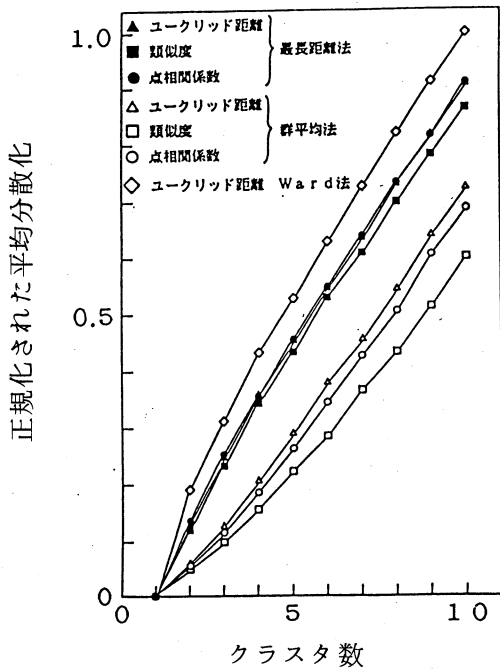


図1 正規化された平均分散比とクラスタ数の関係

表3 平均累積認識率(%)

サンプル 順位	学習サンプル	未知サンプル
1位	99.31	88.19
1~3位	99.75	95.05
1~5位	99.82	96.49
1~10位	99.90	97.89

[4] む す び

手書き漢字パターンのカテゴリ内クラスタリングには、Ward法が適していることがわかった。Ward法により作成された多重辞書パターンを用いての認識実験の結果、学習サンプルに対して99.31%、未知サンプルに対して88.19%の認識率を得た。今後は、カテゴリ数や学習サンプルを増加させた場合の認識率の変化の調査をしたいと考える。

参考文献

- (1) 塩野 充：多重辞書類似法による手書き漢字識別の基礎実験，情報処理学会論文誌，27，9，pp・853-859，1986-09
- (2) 手塚，北橋，小川：デジタル画像処理工学，日刊工業新聞社，東京（1985）
- (3) 柳井，高木（編著）：多変量解析ハンドブック，現代数学社，京都（1986）
- (4) 斉藤，山田，山本：手書文字データベースの解析（Ⅷ），電子技術総合研究所彙報，Vo1. 49，No. 7（1985）

部分線形パラメータをもつ放物・ 楕円形偏微分方程式の数値解

電子工学科 塚本幸雄

非線形確率微分方程式

$$dx(t) = [Ax(t) + bu(t) + f(x(t))] dt + Gdw(t) \quad (1)$$

で記述される制御系を考える。このとき、 D_1 を R^2 での有界領域とし、 S を目標到達領域とする。このとき $D = D_1 - S$ 領域として、その内部およびその外部の境界を Γ_1 、 Γ_2 とする。このとき、 Γ_2 に到達することなく Γ_1 に到達する確率を最大および最小時間で目標体 Γ_1 に到達するように、制御パラメータ $\theta(t)$ を決定する最適問題を考察する。ここで、 $\theta(t)$ は $|\theta(t)| = 1$ と拘束されているものとする。これらの問題に対して定常過程においては、

$$[Ax(t) + f(x(t))] \frac{\partial P}{\partial x} + b \left| \frac{\partial P}{\partial x} \right| + \frac{1}{2} \text{tr} [GG' \frac{\partial}{\partial x} (\frac{\partial}{\partial x}) P] = 0 \quad (2)$$

および、

$$[Ax(t) + f(x(t))] \frac{\partial P}{\partial x} + b \left| \frac{\partial P}{\partial x} \right| + \frac{1}{2} \text{tr} [GG' \frac{\partial}{\partial x} (\frac{\partial}{\partial x}) P] = -1 \quad (3)$$

なる偏微分方程式を

$$P(x_1, x_2) = \begin{cases} 1, & P(x_1, x_2) \in \Gamma_1 \\ 0, & P(x_1, x_2) \in \Gamma_2 \end{cases} \quad (4)$$

なる境界値問題を解析することとなる。

(2), (3)式を四角形領域および円領域で差分化すると、

$$\begin{aligned} U(i, j) = & \left\{ \frac{b}{k} |U(i, j+1) - U(i, j-1)| + \left(\frac{x_{2j}}{h} + \frac{\sigma_{11}}{h^2} \right) U(i+1, j) \right. \\ & \left. + \left(-\frac{x_{2j}}{h} + \frac{\sigma_{11}}{h^2} \right) U(i-1, j) + \left[-\frac{1}{k} (\alpha x_{1i} + \beta x_{2j} + f(x_{1i}, x_{2j})) + \frac{\sigma_{22}}{k^2} \right] \right. \\ & \left. \times U(i, j+1) + \left[\frac{1}{k} (\alpha x_{1i} + \beta x_{2j} + f(x_{1i}, x_{2j})) + \frac{\sigma_{22}}{k^2} \right] U(i, j-1) + 2\delta \right\} / Q_P \end{aligned}$$

$$Q_P = 2 \left(\frac{\sigma_{11}}{h^2} + \frac{\sigma_{22}}{k^2} \right) \quad (5)$$

となる。ただし、 $U(x_{1i}, x_{2j})$ は $P(x_1, x_2)$ の離散化近似解であり、 $\sigma_{ii} = (GG')_{ii}$ 、および

δ は,

$$\delta = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

なる値をとり、確率最大問題に対しては0の値をとる。また、放物形方程式に対しては、

$$\begin{aligned} U(i, j) = & \left\{ \frac{b}{k} |U(i, j+1) - U(i, j-1)| + \frac{2}{h} |x_{2j}| U(i + \text{sgn}(x_{2j}), j) \right. \\ & + \left[\frac{\sigma_{22}}{k^2} - (\alpha x_1 i + \beta x_2 j + f(x_1 i, x_2 j)) / k \right] U(i, j+1) \\ & \left. + \left[\frac{\sigma_{22}}{k^2} + (\alpha x_1 i + \beta x_2 j + f(x_1 i, x_2 j)) / k \right] U(i, j-1) + 2\delta \right\} / Q_p \end{aligned} \quad (6)$$

$$Q_p = 2 \left(\frac{|x_{2j}|}{h} + \frac{\sigma_{22}}{k^2} \right), \quad h = \Delta x, \quad k = \Delta x_2$$

であり、境界が円の場合には、

$$\begin{aligned} U(i, j) = & \left\{ (a_{i, j/k^2} + e_{i, j/2k} \pm \frac{\sin(\varphi i)}{2k}) U(i, j+1) \right. \\ & + (a_{i, j/k^2} + e_{i, j/2k} \mp \frac{\sin(\varphi i)}{2k}) U(i, j-1) \\ & + (b_{i, j/h^2} + d_{i, j/2h} \pm \cos(\varphi i) / (2hr)) U(i+1, j) \\ & + (b_{i, j/h^2} + d_{i, j/2h} \mp \cos(\varphi i) / (2hr)) U(i-1, j) \\ & + c_{i, j/(4hr)} U(i+1, j+1) - c_{i, j/(4hr)} U(i+1, j-1) \\ & \left. + c_{i, j/(4hr)} U(i-1, j-1) - c_{i, j/(4hr)} U(i-1, j+1) + 2\delta \right\} / Q_p \end{aligned} \quad (7)$$

$$Q_p = 2 (a_{i, j/k^2} + b_{i, j/h^2})$$

となる。ここに、 $a_{i, j}$, $b_{i, j}$, $c_{i, j}$ および $e_{i, j}$ は α , β , $f(x_1 i, x_2 j)$ の関数である。

(5), (6) および (7) 式は任意の切換え曲線に対して、

$$AU = B, \quad A = (a_{ij}) \quad (i, j = 1, 2, \dots, N) \quad (8)$$

なる代数方程式となり、これを Gauss-Seidel 法により解く。このときシステムに含まれる非線形特性は、

$$a_{ii} > 0 \quad a_{ij} < 0 \quad i \neq j$$

$$a_{ii} \geq \sum_{j=1, j \neq i}^N |a_{ij}|$$

なる条件を満たすように選択する。

また、(8) 式の U は最適性の条件を満たさないから、 $U(i, j) = V(\ell)$ とおいて、(5), (6) および (7) 式を、

$$V(l) = \max_{|\theta_l|=1} \left\{ \sum_{j=1}^N \alpha_{lj}(\theta_l) V(j) + K_l(\theta_l) \right\} \quad l=1, 2, \dots, N \quad (9)$$

と表わし,

$$\max\{\theta_l [U(i, j+1) - U(i, j-1)]\} = |U(i, j+1) - U(i, j-1)| \quad (10)$$

を満足するように $\alpha_{lj}(\theta_l)$ を置換して(8)式を解き, 逐次修正を施して最適解を導出する。図1~3はその1例を示したものである。終りに, 本プログラムの作製に協力を得た, 大学院生杉山誠君に深謝する。

参考文献

- (1) AMES, W. F., 1969, Numerical Methods for partial Differential Equations (London: Nelson).
- (2) EATON, J. H., and ZADEH, L. A., 1962, J. basic Engng., 84D, 23.

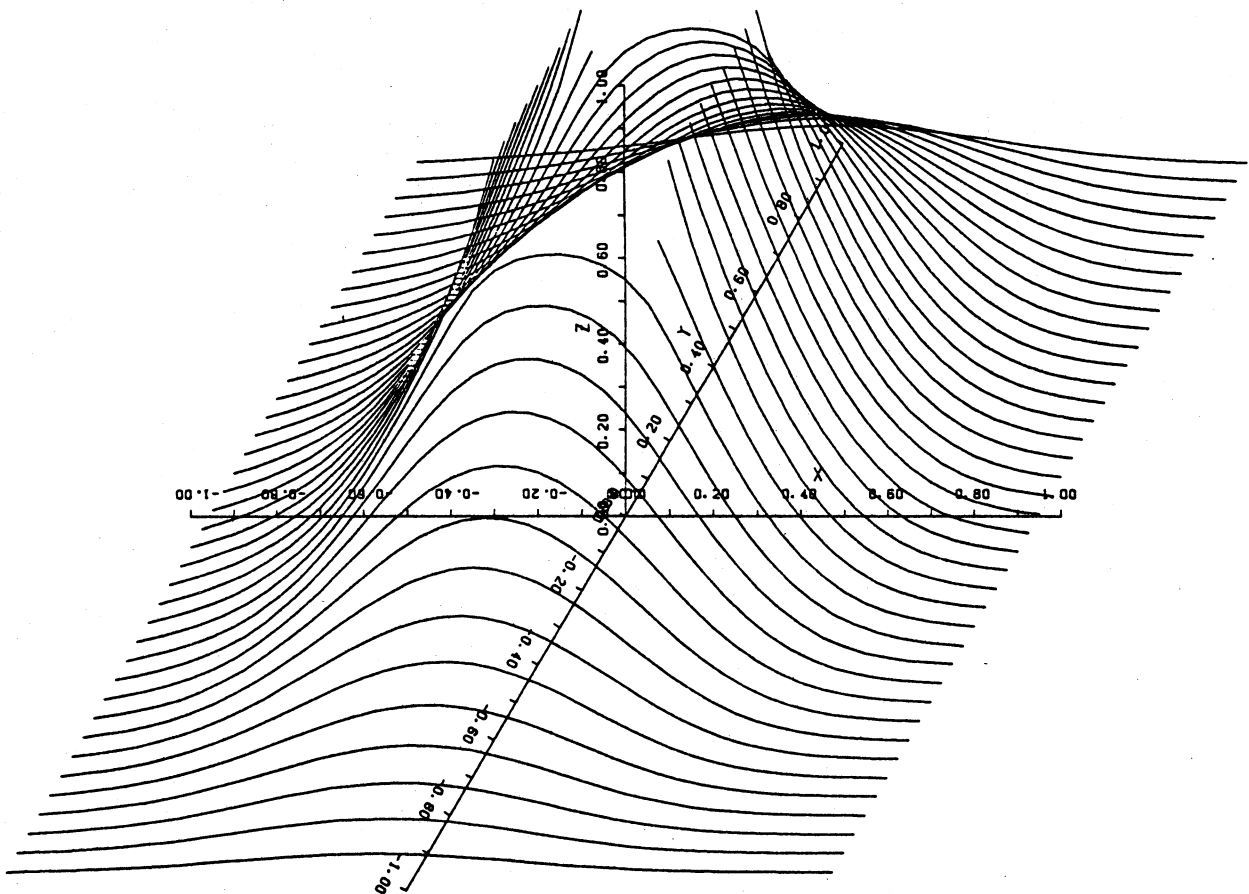


Fig.1 Probability Surface for the Elliptic equations ($\alpha = \beta = 0$)

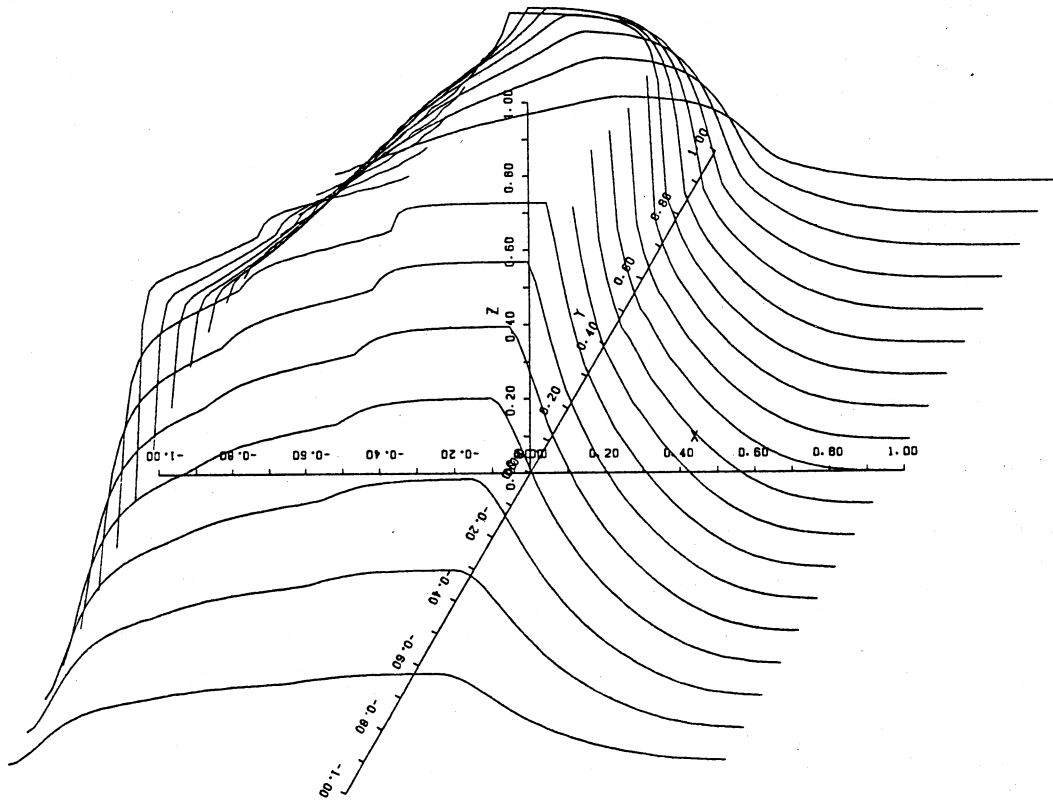


Fig. 2a Probability Surface for the Parabolic equations ($\alpha = \beta = 0$)

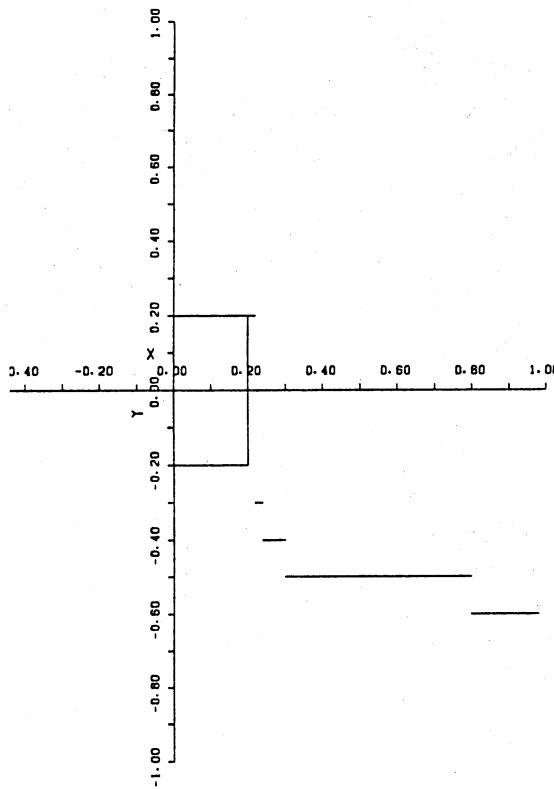


Fig. 2b Optimal Switching Curves.

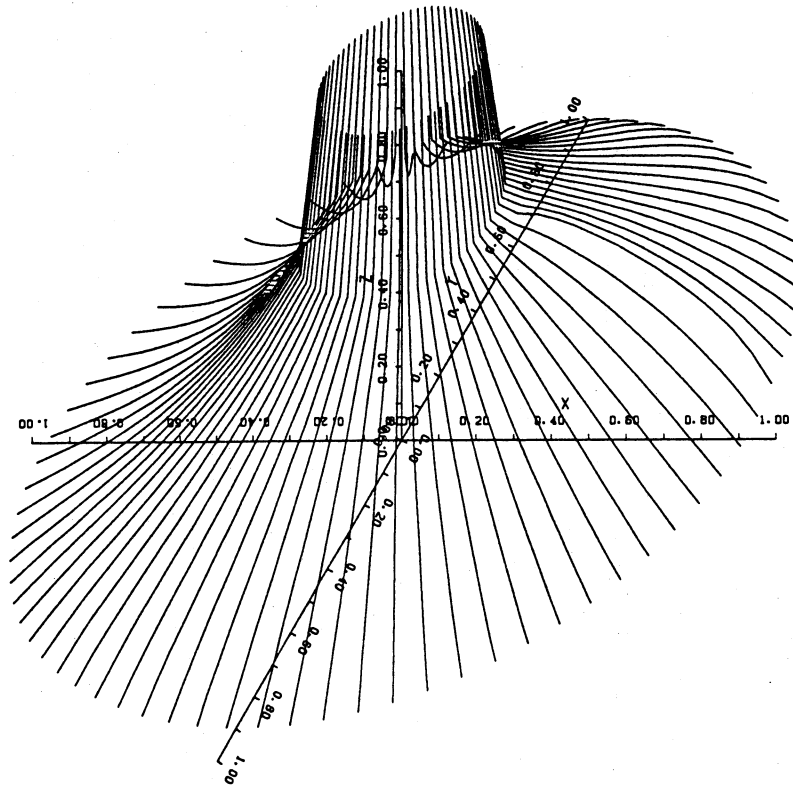


Fig. 3a Probability Surface in the circular region D

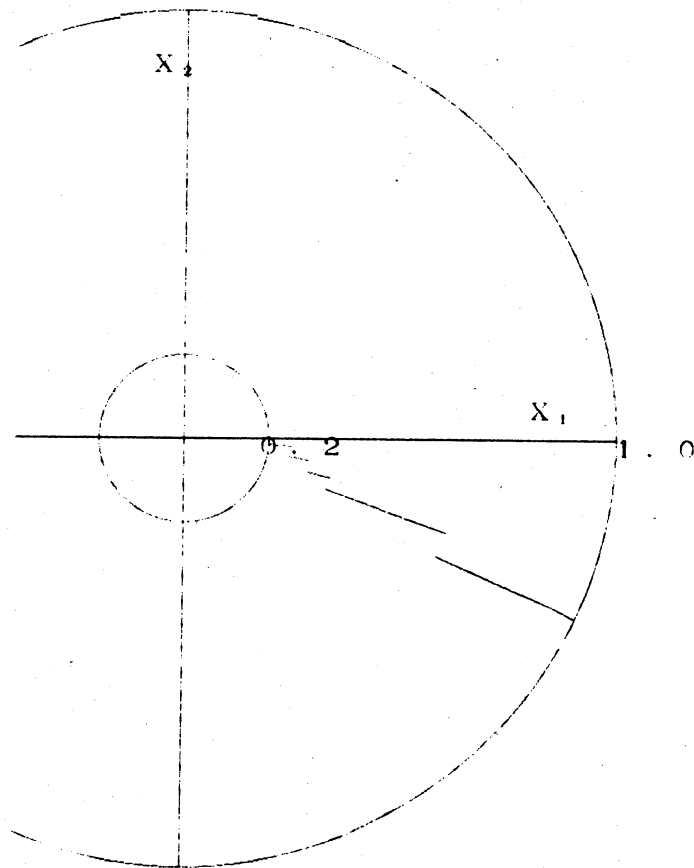
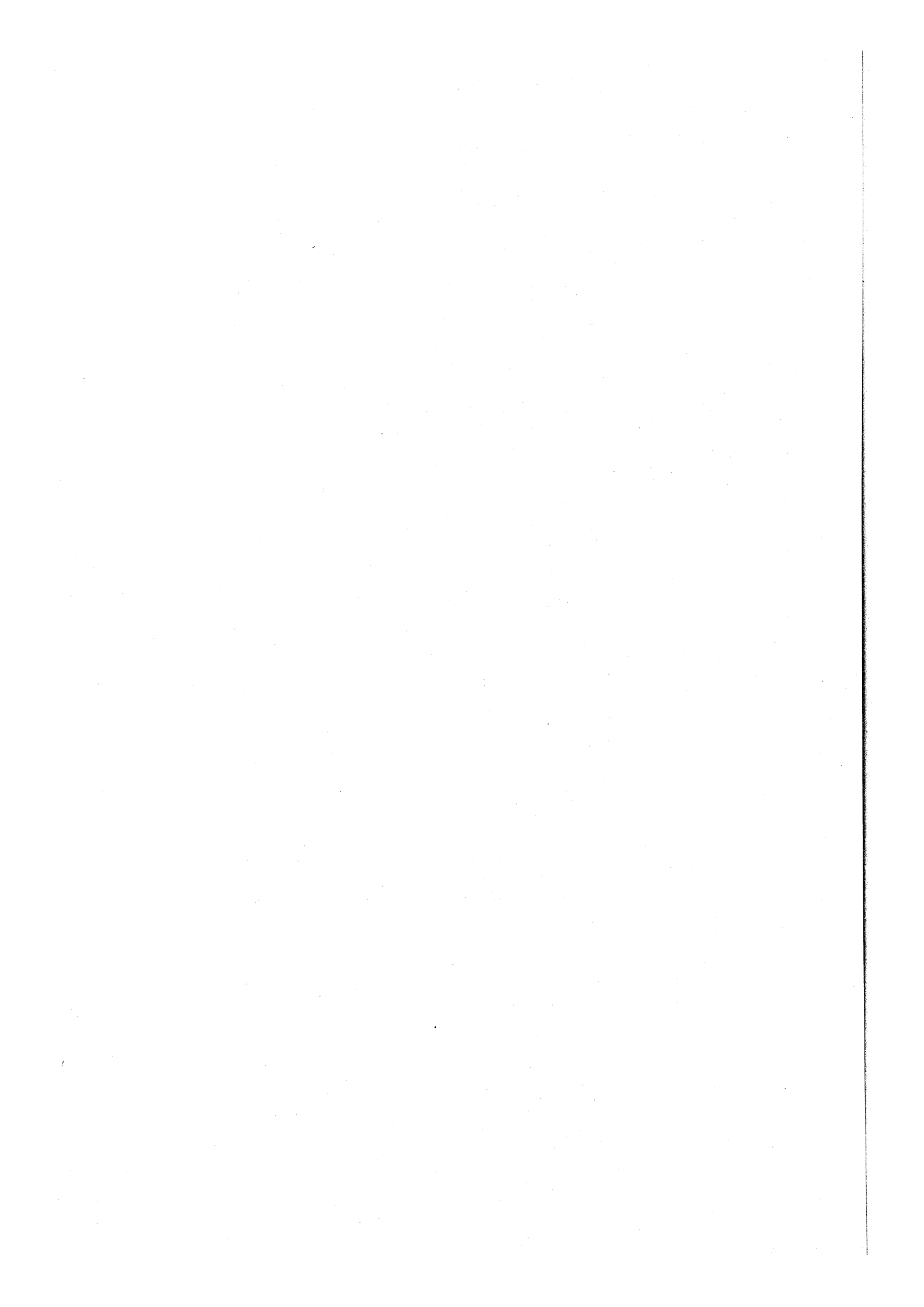


Fig. 3b Optimal Switching Curves.



多重辞書方式による文学認識に関する研究

橋本 礼治

王 曉文

1. まえがき

文字認識の手法は大別すると

- (1) 構造解析的手法
- (2) 重ね合せ的手法

の二つになる。手書き文字のような変形の大きい文字には前者が適しているように思われたが、実際に適用してみるとストロークの抽出が安定に行われず、期待されたほどの性能が得られていない。そこで重ね合せ的手法が再検討される傾向にある。

しかし乍ら、重ね合せの手法を手書き文字に適用するためには、何らかの対策が必要である。対策は大別すると次の2つとなる。

- (1) 多重辞書パターンの使用
- (2) 文字の変形、正規化

本報告書は、多重辞書方式の一つと考えられる最近傍法において、処理時間を短縮するために最近傍点を得るための走査量を減少させる2つの方式を提案し、電総研作成の手書き漢字データベースETL-8(B)を用いてそれらの方式の有効性を検討した結果について述べたものである。

2. チェックポイント方式

文字平面上にいくつかのチェックポイントを設け、それらの値により辞書パターンをクラスタに分割しておく。認識時には、入力文字に、上と同じチェックポイントの値によりクラスタを決定し、それに属する辞書パターンのみで最近傍点を決定する。

実際結果を表にしたのが表1である。ここで、

$$id_t = \sum_{i=0}^{f-1} T_{f-i} * 2^i \quad (1)$$

であり、この id_t がクラスタを指定する。ただし、

$$T_i = i \text{ 番目のチェックポイントの値} \quad (2)$$

$$f = \text{チェックポイントの個数}$$

である。また、

$$DF = bit(|id_t - id_1|) \quad (3)$$

である。ここで、 id は辞書パターンのクラスタを指定する値である。

表 1 実験結果

DF	f	平均走査量%		近 傍 一致率	正解存在率 R ₃ %	
		実験 1	実験 2		実験 1	実験 2
0	5	3.27	3.33	25.4	94.2	93.9
	8	0.78	0.98	12.1	71.8	68.8
	10	0.29	0.49	4.8	45.0	51.6
1	5	20.47	11.9	62.8	100	99.9
	8	5.59	4.38	38.8	97.8	96.9
	10	2.44	2.31	20.6	88.4	88.0
2	5	47.97	21.41	88.0	100	100
	8	18.96	10.43	69.1	100	99.9
	10	9.76	6.42	56.5	99.6	99.0
3	5	63.74	26.49	97.6	100	100
	8	38.17	17.47	88.4	100	100
	10	24.66	11.93	72.3	100	99.9

3. 辞書パターン空間分割方式

k -最近傍則に対する走査量低減化の試みは種々存在するが、一番効率がよいとされているのは Yunk の方式である。この方式では、辞書パターンの各次元の値は連続量である。そこで、文字パターンを 2 次元フーリエ変換し、値を連続化する。いま、2 次元の空間周波数を順序づけ、その i 番目の値を A_i とする。辞書パターンについて、これら A_i の値をソートし、順序づけたものを $Q_i(u)$ とする。 u は、 u 番目の値を意味する。

以上のもとで、走査すべき辞書パターンは次のように決定される。いま、入力文字のフーリエ変換値の i 番目の値を t_i とする。このとき、各 i について区間

$$(t_i - l_i \cdot h, t_i + l_i \cdot h)$$

を設ける。ただし、 l_i は各カテゴリの辞書パターンを i 番目の軸へプロジェクトしたときの最大値と最小値の差の、全カテゴリに関する最大値である。

次に、2 分法を用いて、上記区間に属する辞書パターンの最小値および最大値を持つ辞書パターン番号を求める。それらを P_{1i} 、 P_{2i} とすると、 $Q_i(P_{1i})$ から $Q_i(P_{2i})$ までの各値 j について、カウンタ $C(j)$ を 1 増加する。カウンタの値が空間周波数の次元数と一致した j の辞書パターンが走査の対象となる。

以上の方法を、1. と同じデータに適用した結果の一部を図 1 に示す。

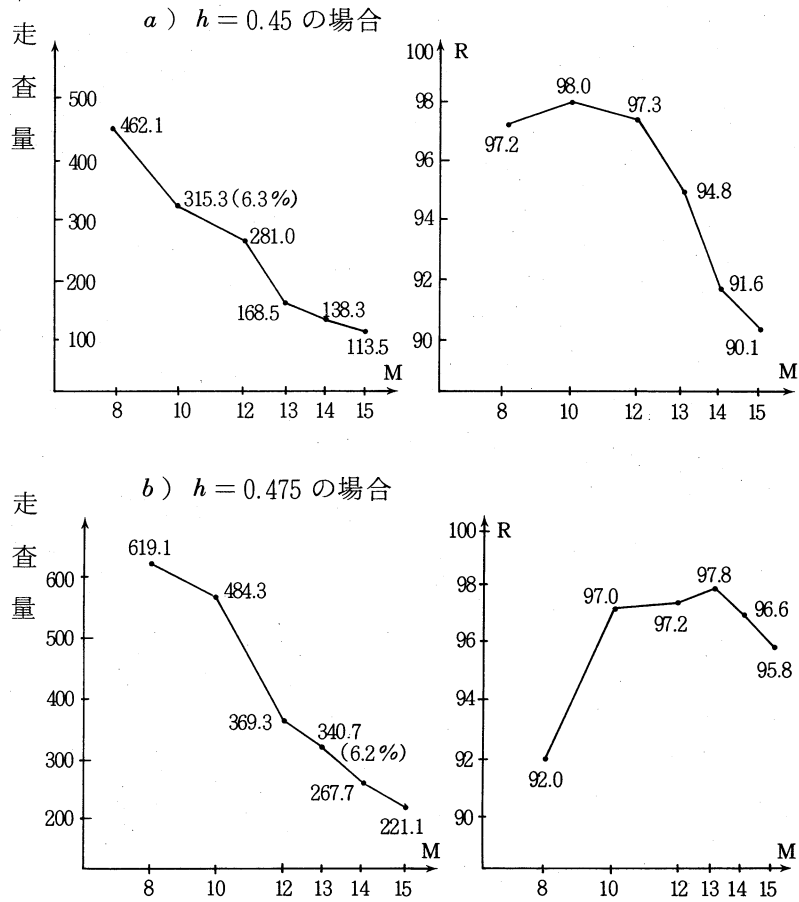


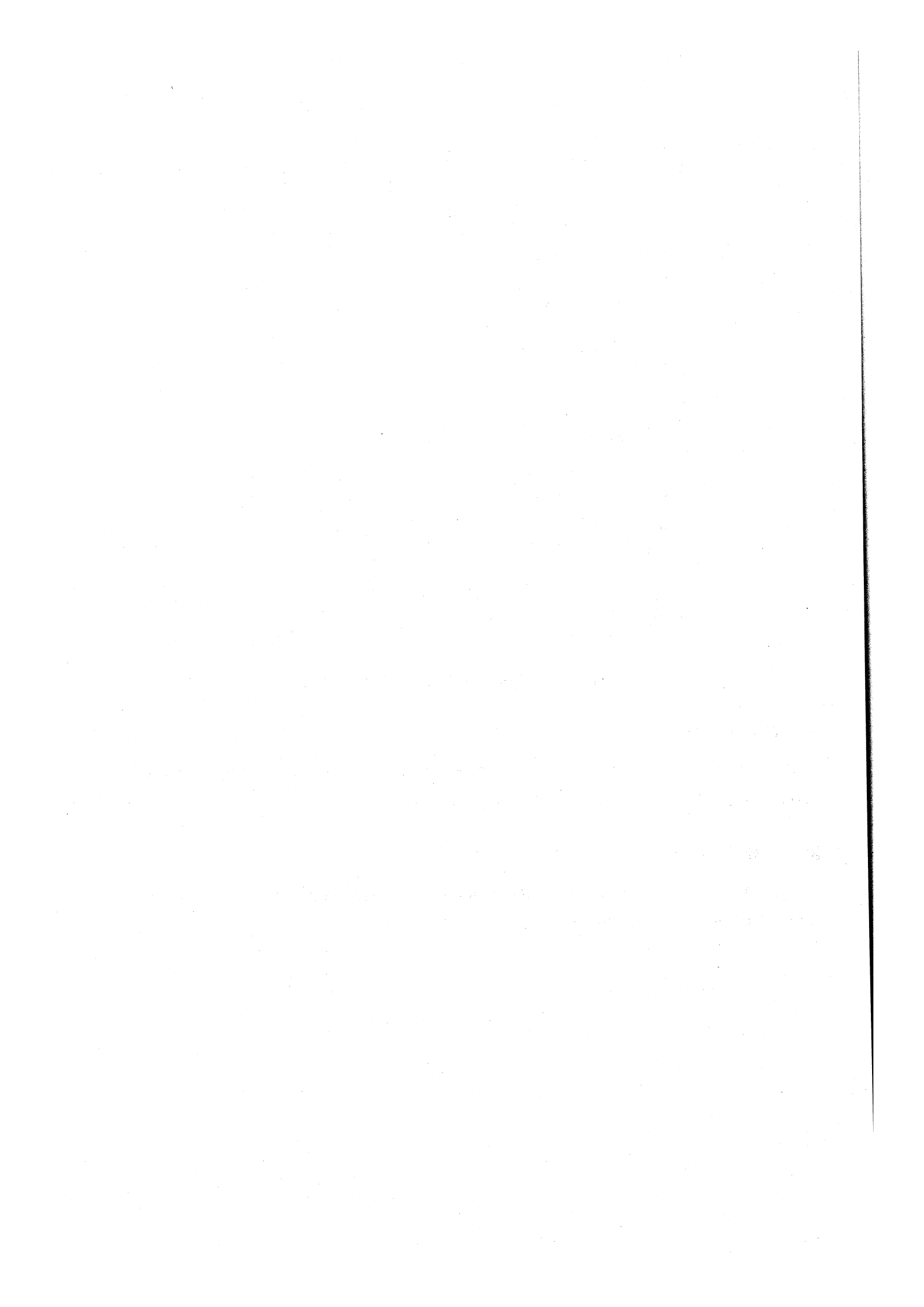
図1 実験結果 (Rは正解存在率)

4. むすび

提案した2つの方式ともに、ほぼ同程度の結果が得られた。すなわち、全辞書走査方式の場合の正解存在率を低下させることなく、平均走査量を約1/10にすることができた。

謝 辞

手書き漢字データベースの使用を許可頂いた電総研の関係各位ならびに計算に当って種々便宜を頂いた情報処理センター市田義明技官に感謝する。



熱ルミネッセンスカロリメータ中 の電磁カスケードシャワーの計算

工学部電子工学科 山本 勲

1. はじめに

昨年度までに、熱ルミネッセンスカロリメータ〔TLC〕¹⁾に電子シンクロトロン・ビーム(600 MeV)を照射して電磁カスケードシャワーを熱ルミネッセンス〔TL〕シートから読み取る実験²⁾を行い、またこの実験に対応する計算機シミュレーションをEGS3(Electron Gamma Shower Ver.3) CODE SYSTEM³⁾を用いて行った。今年度はシミュレートする電子のエネルギーをkeVのオーダーまで引き下げるために、EGS4 CODE SYSTEM⁴⁾のテスト的な導入を試みたので、EGS4 CODE SYSTEMの紹介と、TLC用に作成したUser Codeについて説明する。

2. EGS4 CODE の紹介

EGS4 CODE SYSTEMは1960年代前半からSLAC(Stanford Linear Accelerator Center)において開発されてきた「電磁カスケード」をシミュレーションするモンテカルロプログラムである。1978年に、EGS3がマニュアル(SLAC-210)³⁾とともに解放されてからは様々な分野において利用され、それにともないシミュレートできるエネルギーの下限も低くなってきた。EGS4では、電子及び陽電子の運動エネルギーの下限は10 keVまでシミュレートできるように改良された。

EGS4で扱っている物理現象は次の通りである。ガンマ線については、

- ① Pair Production,
- ② Compton Scattering,
- ③ Photoelectric Effect,
- ④ Rayleigh Scattering (in Option),

であり、電子及び陽電子については、

- ⑤ Bremsstrahlung,
- ⑥ Moller Scattering (electron),
- ⑦ Bhabha Scattering (positron),
- ⑧ Two Photon-Electron Annihilation in Flight and at Rest,
- ⑨ Continuous Energy Loss,
- ⑩ Multiple Scattering

である。これらの物理現象をシミュレートするのに必要なデータは後述のPEGS4(Processor

for EGS) であらかじめ計算しておき, EGS 4 では入力データとして読みこまれる。シミュレートする粒子は, Stack Number (NP) で識別され, 粒子の種類は IQI で表されている。追跡中の粒子は, (1) エネルギーがカットオフエネルギー以下になった場合, (2) 測定器外に出た場合に, その追跡を中止する。EGS 4 を使って鉛中の電磁シャワーのシミュレーションした例を図 1 に示す。

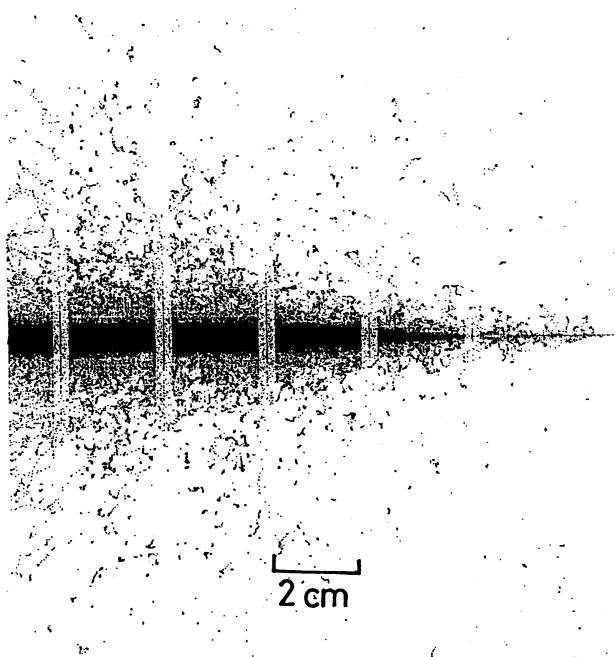


図 1. 乗鞍岳山頂に設置した TLC (Norikura TLC-I) に 100 GeV の電子を 1 個垂直に入射させた場合に EGS 4 がシミュレーションした結果である。図中の黒点は全ての二次電子 (陽電子) の軌跡を, 入射方向に平行な面への投影図として表している。

この図は 100 GeV の一つの電子を Norikura TLC に垂直に入射させた場合に EGS 4 がシミュレーションする電子 (陽電子) の全の軌跡を表している。

EGS 4 を使かって電磁カスケードシャワーを追跡するには, 次の三つの User Code を作る必要がある。

〔A〕 MAIN

〔B〕 HOWFAR (追跡粒子の位置する領域を決定する SUBROUTINE)

〔C〕 AUSGAB (EGS からの情報をユーザが取り出す SUBROUTINE)

EGS では HOWFAR で使用される測定器の幾何構造の設定や, AUSGAB でのユーザが取り出す情報の記録の方法は, ユーザに完全にまかされている。MAIN Program では PEGS 4 で作られた Media Data (TLC を構成する物質の Cross Section Table 等) を読み取り, EGS 4 で使用できるようにする SUBROUTINE HATCH を CALL した後に, 入射粒子の初期条件を設定して, SHWNER GENERATER である SUBROUTINE SHOWER を CALL する。粒子の追跡中は, 測定器の幾何構造に対するチェックが必要になる度に SUBROUTINE HOWFAR

がCALLされる。またSUBROUTINE AUSGABは、24種類のFLAGをユーザがセットすることによりEGS4で扱っている全ての物理現象の前後でCALLすることができる。

PEGS4は任意の物質についてEGS4に必要な全ての物理量を計算するプログラムである。計算する物質について、単一物質 (Element), 化合物 (Compound), 混合物 (Mixture) の三種類に分類し、追跡する粒子 (電子, 陽電子, γ 線) のエネルギーの上限と下限を設定する。さらにCompoundの場合は要素の数, 密度, 原子の比を, 又Mixtureの場合には原子の比或いは重量比を設定する。計算された各データは, EGS4の実行時の計算時間を短縮するために, 線形フィッティングのパラメータ群として出力される。フィッティングはデータの値によりlog-log, linear-log 或いはlinear-linearで行われている。

3. User Code

EGS4は「MORTRAN」とよばれるプログラム言語で書かれているので, 東京大学原子核研究所中央計算機センターでFORTRANにコンパイルしたソースプログラムを用いた。MAIN Programで設定したTLCは鉛の厚さにして, 0, 2, 6, 10, 14, 20, 24, 30, 40, 50, 60, 70の12層にTLシートが挿入されている。全体のサイズは10 cm \times 10 cm \times 7.4 cmである。

PEGS4による入力データの作成は次のような条件で行った。

エネルギー: 電子 0.521 MeV \sim 1.2 GeV

陽電子 0.521 MeV \sim 1.2 GeV

ガンマ線 5 KeV \sim 1.2 GeV

物質: TLシート, 鉛, 鉄, アルミニウム, 空気 (1気圧)

EGS4を実際に実行させる場合のジョブ制御プログラムのリストをAppendixに示す。プログラムはEGS4.FORTに, 入力データはEGS4.DATAにある。入力パラメータはREAD (5) から乱数の初期値, 入射粒子数, 粒子の種類 (-1, 電子), 入射エネルギー (E_0), 追跡停止エネルギー (E_e, cut), 及びCPU TIMEの上限等を読みこむ。

ESビームをTLCに照射して電磁カスケードシャワーをTLシートから読み取る実験に対応するシミュレーションを行うためには, ESビームのプロファイルの電子密度分布をなめらかに再現するように入射位置のサンプリングを行う事が望ましい。しかしながら E_e, cut を1.5 MeVから0.561 MeV (運動エネルギーは50 KeV) に引き下げることによりCPU TIMEが大巾に増加してしまう。従ってTLCの中心部に100個の電子 (600 MeV)が入射した時のカスケードシャワーカーブの計算を行った。

4. 結果と考察

シミュレーションの結果を図2に示す。EGS3でのシミュレーションの結果も図中に点線で示す。シャワーマキシマムよりも深いところで, EGS3よりもEGS4の方が減衰のしかたが緩やかであることが判る。鉛中での深さで8 cmでは20%, 12 cmでは40%の電子数の増加が見られる。この電子数

の増加の傾向は、TLシートが1.5MeV以下の低エネルギー電子に対して高感度である²⁾ことと矛盾しない。TLシートの解析から得られたシャワーカーブと比較するためには、ESビームのビームプロファイルを考慮し、更に長時間の本計算を行う必要がある。

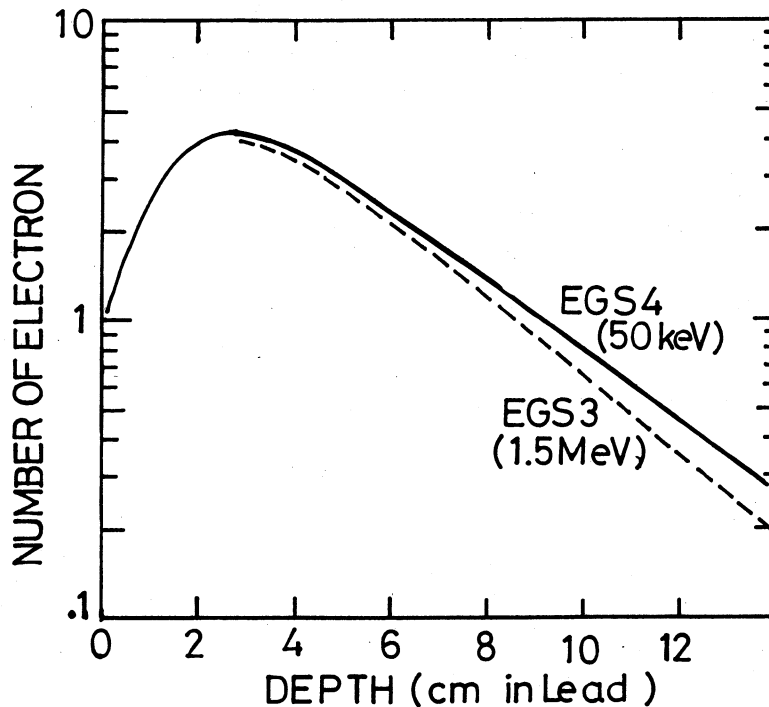


図2. ESビーム実験に用いたTLCの中心に600MeVの電子を100個垂直に入射させた場合のシャワーカーブのEGS3とEGS4の比較。

またCPU TIMEの比較からは、EGS3で二次粒子の追跡エネルギーが1.5MeVの場合に比べて、EGS4で0.551MeV(運動エネルギー50KeV)の場合の方がおよそ50倍のCPU TIMEを必要とする。更に、0.531MeVまで引き下げると150倍となる。このエネルギーの時に要するCPU TIMEはシャワー1例当り15秒となる。これはEGS4で用いている一様乱数を正常に発生させるために、Appendixにあるとうりジョブ制御プログラムのFacom O S IFのFORTRN77コンパイラのオプションで最適化レベルをOPT(O)にセットしなければならないためである。EGS4の中の数十箇所直接書き込まれている乱数発生部分を他の発生法に書換える事ができればCPU TIMEを数分の一に低減できることが期待される。

5. 謝 辞

この計算は、岡山理科大学情報処理センターのFacom-M380及び東京大学原子核研究所中央計算機室のFacom-M780を用いて行った。両センター及び計算機室のスタッフの皆様に感謝致します。また、EGSの一般的な使用方法に関して、EGS3については中村市郎氏に、EGS4については東京大学宇宙線研究所助教授須田英博(現在神戸大学教授)氏に指導して戴いた。ここに感謝致します。

6. 参考文献

- 1) I. Yamamoto et al., Nucl. Instr. and Meth. A 256 (1987) 567.
- 2) N. Takahashi, Nucl. Instr. and Meth. A 270 (1988) 347.
- 3) R. L. Ford and W. R. Nelson, SLAC Report No. 210 (1978).
- 4) W. R. Nelson et al., SLAC Report No. 265 (1985).

Appendix

EGS4を実際に行わせるためのジョブ制御プログラムについて説明する。EGS4のソースプログラムは区分データセットEGS4.FORTにあり。このうちメンバーNOTOUCHがSLACから公開されているCODEであり、メンバーTL4とAHPCB4は作成したUSER CODEである。それぞれTL4はMAINプログラムに、AHPCB4はAUSGAB, HOWFAR, PLAINE, CHGTR, BLOCK DATAにそれぞれ対応している。

PEGS4で計算されたCross Section TableはREAD(12)から読みこまれる。このDataは区分データセットEGS4.DATAにあり、鉄、鉛、アルミニウム、空気(1気圧)及びTLシートについて荷電粒子は0.521MeVから1.2GeVまで、ガンマ線は5KeVから1.2GeVまで用意されている。

計算結果はWRITE(30)から順データセット#OUTAAA.DATAに一旦書き込まれ、以下に続くFORTRANプログラムで、前回までに計算された結果STOCK.DATAと加算され再びSTOCK.DATAに蓄積される。

```
00010 //XXXXXXXX# JOB CLASS=E,MSGCLASS=H,REGION=4000K,TIME=(200,00)
00020 /*JOBPARM L=100
00030 /*-----
00040 // EXEC ALLOC,UID=XXXXXXXX,NAME=#OUTAAA,DIS=DATA,SP1=50,SP2=5,
00050 //      DCB='(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3120)'
00060 /*-----
00070 // EXEC FORT7C,PARM.FORT='OPT(0),LINECOUNT(52),GOSTMT,NOPRINT'
00080 //FORT.SYSLIN DD SPACE=(TRK,(50,30))
00090 //FORT.SYSIN DD DSN=XXXXXXXX.EGS4.FORT(NOTOUCH),DIS=SHR
00100 // EXEC FORT7CLG,PARM.FORT='OPT(0),LINECOUNT(52),GOSTMT,NOPRINT'
00110 //      PRVLIB='SYS1.PSPLIB'
00120 /*JOBPARM L=100
00130 //FORT.SYSIN DD DSN=XXXXXXXX.EGS4.FORT(TL4),DIS=SHR
00140 //      DD DSN=XXXXXXXX.EGS4.FORT(AHPCB4),DIS=SHR
00150 //LKED.SYSLMOD DD SPACE=(TRK,(50,30,1))
00160 //GO.FT05F001 DD *
00170      1323775483  2003778001          2100          10800
00180      -1      6.0000D+02      0.5610E+00      0.5610E+00
00190 /*
00200 //GO.FT06F001 DD SYSOUT=A
00210 //GO.FT08F001 DD DUMMY
00220 //GO.FT09F001 DD DUMMY
00230 /*
00240 /*=== 0.521MEV - 1.2GEV (CHARGED PARTICLE) * PHOTON 5KEV - 1.2GEV ===
00250 //GO.FT12F001 DD DSN=XXXXXXXX.EGS4.DATA(FE1200),DIS=SHR
00260 //      DD DSN=XXXXXXXX.EGS4.DATA(PB1200),DIS=SHR
00270 //      DD DSN=XXXXXXXX.EGS4.DATA(AL1200),DIS=SHR
00280 //      DD DSN=XXXXXXXX.EGS4.DATA(AIR1200),DIS=SHR
00290 //      DD DSN=XXXXXXXX.EGS4.DATA(TLS1200),DIS=SHR
00300 //GO.FT30F001 DD DSN=XXXXXXXX.#OUTAAA.DATA,DIS=OLD
```

```

00310 /*-----
00320 // EXEC ALLOC,UID=XXXXXXX,NAME=#SUMAAA,DIS=DATA,SP1=50,SP2=5,
00330 //      DCB='(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3120)'
00340 /*-----
00350 // EXEC FORT7CLG,PARM.FORT='OPT(3),LINECOUNT(52),GOSTMT,NOPRINT'
00360 //FORT.SYSIN DD *
00370      DIMENSION IA(200,200,12),IB(200,200,12)
00380      DOUBLE PRECISION EIA,EIB
00390      READ (40)  NA,ICLKA,IQA,EIA,ECUTA,PCUTA
00400      WRITE(6,*) NA,ICLKA,IQA,EIA,ECUTA,PCUTA
00410      READ (40) IA
00420      READ (41)  NB,ICLKB,IQB,EIB,ECUTB,PCUTB
00430      WRITE(6,*) NB,ICLKB,IQB,EIB,ECUTB,PCUTB
00440      READ (41) IB
00450      NA  = NA  + NB
00460      ICLKA = ICLKA + ICLKB
00470      DO 10 K=1,12
00480      DO 10 J=1,200
00490      DO 10 I=1,200
00500      10 IA(I,J,K) = IA(I,J,K) + IB(I,J,K)
00510      WRITE(42) NA,ICLKA,IQA,EIA,ECUTA,PCUTA
00520      WRITE(6,*) NA,ICLKA,IQA,EIA,ECUTA,PCUTA
00530      WRITE(42) IA
00540      IH = ICLKA / 3600
00550      IM = ( ICLKA - IH*3600 ) / 60
00560      IS = ICLKA - IH*3600 - IM*60
00570      WRITE(6,20) IQA,EIA,ECUTA,PCUTA,NA,IH,IM,IS
00580      20 FORMAT(/,'          INCIDENT PARTICLES =',I10,/,
00590      1          '          ENERGY OF INCIDENT PARTICLES =',F15.4,' (MEV)',/,
00600      2          '          CUT OFF ENERGY OF ELECTRONS =',F15.4,' (MEV)',/,
00610      3          '          PHOTONS =',F15.4,' (MEV)',/,
00620      4          'TOTAL NUMBER OF INCIDENT PARTICLES =',I10,/,
00630      5          19X,' TOTAL CPU TIME =',I4,' (H)',I4,' (M)',I4,' (S)',//)
00640      STOP
00650      END
00660 /*
00670 //GO.FT40F001 DD DSN=XXXXXXX.STOCK.DATA,DISP=OLD
00680 //GO.FT41F001 DD DSN=XXXXXXX.#OUTAAA.DATA,DISP=OLD
00690 //GO.FT42F001 DD DSN=XXXXXXX.#SUMAAA.DATA,DISP=OLD
00700 /*-----
00710 // EXEC PGM=JSDGENER
00720 //SYSPRINT DD SYSOUT=*
00730 //SYSUT1 DD DSN=XXXXXXX.#SUMAAA.DATA,DISP=OLD
00740 //SYSUT2 DD DSN=XXXXXXX.STOCK.DATA,DISP=OLD
00750 //SYSIN DD DUMMY
00760 /*-----
00770 //

```

研 究 員 規 則

第1条 岡山理科大学情報処理センター（以下「センター」と呼ぶ）規程第4条および第7条にもとづく研究員の取扱いは、この規則によるものとする。

（目 的）

第2条 センターに設置された計算機システムを利用して行う学術研究および技術開発を促進するために研究員をおく。

（資 格）

第3条 本学教員は、個人または研究グループ単位で申請し、認可されると、研究員の資格を得ることができる。

2. 研究員の資格は、毎年5月1日から翌年3月15日までの期間有効とする。

（活 動）

第4条 研究員は、各テーマごとに認可された範囲内の計算機使用時間と消耗品量が無償で用いて、研究開発活動を行う。但、この範囲を超過する場合は、有償とする。

2. 研究員は、資格を有する期間内に、研究報告書を提出しなければならない。

3. 研究員が、前項の報告書以外に成果を公表する場合は、当センターを利用した旨、明記しなければならない。

4. 研究員は、作成したプログラムを公開し、他の教員が利用できるよう整備しなければならない。

（手 続）

第5条 申請は、毎年1月中に所定の申請書を用いて運営委員会へ提出するものとする。テーマの選択は、センターの計算機システムを用いて行う研究開発に関するものとする。

2. 運営委員会は、提出された申請書に基づき、毎年4月中に認可し予算確定後すみやかに無償で使用できる資源の配分を決定通知する。

3. 研究成果の提出は、運営委員会へ行うものとする。

4. センターは、前年度の研究報告をまとめて公表しなければならない。

5. 計算機システムの使用にあたっては、センターの運用規則に従って行うものとする。

（そ の 他）

第6条 その他必要な事項については、別途運営委員会で審議する。

付則1. この規則は、昭和54年3月14日から施行する。

付則2. この規則は、昭和55年4月16日から施行する。