

I S S N 1341—6839

情報処理センター
研 究 報 告

The Bulletin of the Information Processing Center

第 20 号

(1999.3)

岡山理科大学

Okayama University of Science

岡山市理大町 1 — 1

Tel (086) 252—3012 (直)

目 次

1. 自動並列化コンパイラの開発

工学部・情報工学科 小 畑 正 貴 1

2. X線回折パターンの解析による吸着層構造の研究

理学部・化学科 森 重 國 光 7

3. 並列処理におけるタイリング手法の検討

工学研究科・電子工学専攻 橋本禮治・奥野博之 15

4. 遺伝的アルゴリズムと反復局所探索法を融合した進化的解法

工学部・情報工学科 片山謙吾・成久洋之 21

5. Final-state hyperon-nucleon interaction in the inclusive K^+ photoproduction from the deuteron

理学部・応用物理学科 K. Miyagawa 29

6. 注入イオン分布の分散比の質量比・速度依存性

理学研究科・応用物理学専攻 波田恭宏・中川幸子 33

7. 分子軌道法を用いた環状過酸化物の反応性考察

理学部・化学科 若 松 寛 39

8. JAVAによる遺伝的アルゴリズムの研究

情報処理センター 岩 崎 彰 典 45

自動並列化コンパイラの開発

工学部・情報工学科 小畑正貴

1. はじめに

多くの計算資源を必要とする大規模な数値計算では常により優れた計算機を必要としているため、従来の単一の CPU を用いる計算機より、さらに大きな計算能力を提供できる並列計算機に対しての期待は大きい。だが、一般に並列計算機向きのプログラムを記述することは一般の研究者には困難であるため、従来の一台の計算機のみを対象として記述されたプログラムを自動的に並列化する自動並列化コンパイラの実現が求められている。

本研究では、並列性が一番わかりやすい形で現れることが経験的にわかっているループの解析を行ない並列化を行なう自動並列化コンパイラの開発と、その評価を行なった。この並列化コンパイラは C 言語で書かれたプログラムを対象とし、出力ファイルは実行時にデータ分割などの通信処理を受け持つ専用の通信ライブラリを使用する C 言語のプログラムである。また専用ライブラリ内では標準的なメッセージ通信ライブラリである MPI (Message-Passing Interface) を使用している。

本研究のコンパイラの特徴は、実行時にデータの配置を決定する動的なデータ管理機構を用いる点であり、コンパイル時にはタスクの分割を優先して並列化を行い、データ分散の詳細までは決定しない。これにより低レベルの通信関数は隠蔽され、並列化後のプログラムには直接含まれない。データの分散管理のために必要な通信は、実行時にライブラリによって動的に行われる。

また、このようなデータ管理機構を設けることによって、入力コードと出力コードの対応が容易に判別でき、実行時に詳細な内部情報を簡単に得られるなど、並列後プログラムのデバッグを容易にしている。

実験環境として、Intel 社の Paragon (分散メモリ型並列計算機) を選んだが、本研究で開発したコンパイラの出力は C 言語のプログラムであり、並列化のためのライブラリとして MPI を用いているため、C 言語と MPI が動作する環境では問題無く動作する。

2. システムの概要

本研究で開発した自動並列化コンパイラは図 1 の構造であり、図 1 の中で太い線で示されているのがプログラムの変換されていく流れである。ライブラリ内のデータ配置解決モジュールが通信を受け持っていることからわかるように、本研究で開発した自動並列化コンパイラは直

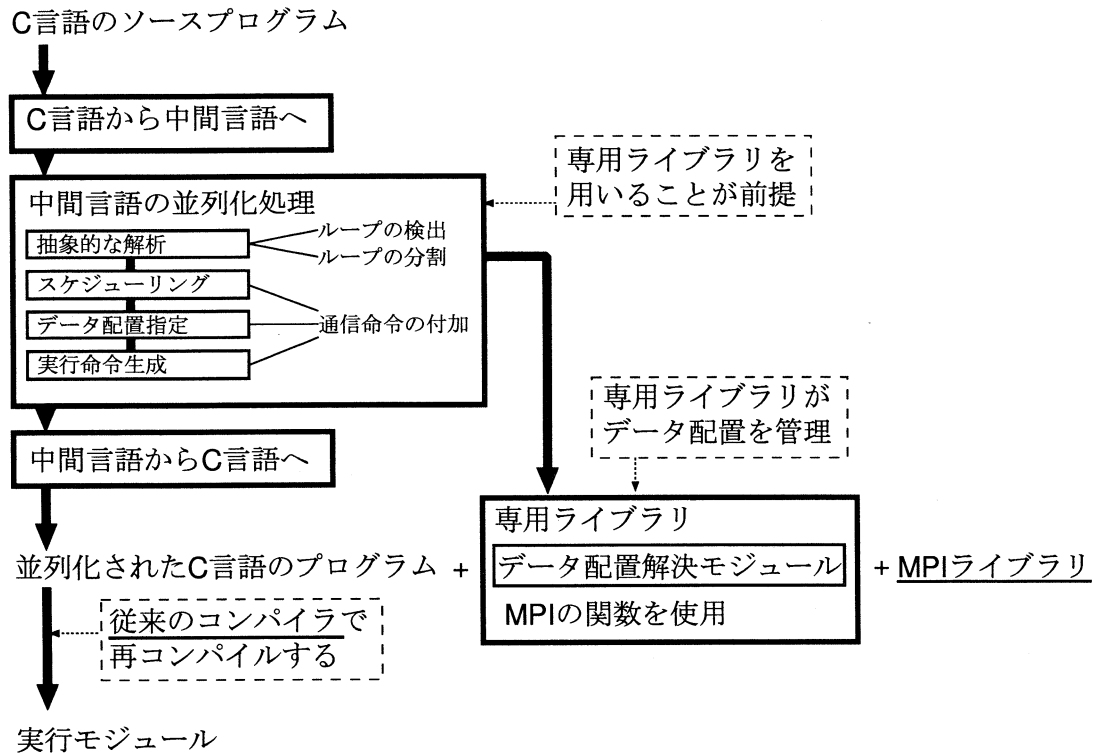


図 1 コンパイラの構成

に MPI の通信命令を埋め込んだコードを生成せず、データ通信については実行時の判断によって動的に通信方式が決定される。

以下に各プログラムとそれに含まれるモジュールについて説明する。

- C 言語から中間言語へコンパイルするプログラム
以後の処理を容易にするために C 言語を一度簡単な形式に変換する。
- 中間言語の並列化処理を行なうプログラム
並列化された中間言語の命令列を生成する。並列化の判断と専用ライブラリの付加はここで行なう。
 - － 抽象的な解析モジュール
ループの反復回数や、変数の依存解析、データの操作範囲の解析、並列化できるループかどうかの判定、など並列化のために必要な情報の抽出を行なう。
 - － スケジューリングモジュール
抽象的な解析モジュールからの情報を得てどのループを並列化するか判定を行なう。またデータの分散の方向や分散のための命令の選定などを行なう。
 - － データ配置指定モジュール
スケジューリングモジュールから得られた命令を通信の量や分布を考えた最適化を

したり、プログラム中からのさらに詳細な情報の抜き出しを行なう。

– 実行命令生成モジュール

データ配置指定モジュールから得られた具体的な並列化のための情報に従って新規の並列化されたプログラムを生成する。ただし直に転送命令を書き込むことはしない。

● 中間言語から C 言語へ変換するプログラム

通常のコンパイラで出力コードをコンパイルできるように中間言語を C 言語に逆変換する。

● 専用ライブラリ

プログラム中のデータの流れを管理する。実行中の各時点でデータがどのような配置であるべきかをコンパイラが示し、ライブラリは自動的にその形式にデータの配置を変換する機能を提供する。

– データ配置解決モジュール

配列の情報を管理し、実行時のデータの領域の確保、分割操作並びに、他のノードとの通信を受け持つ。

3. 並列化の手法

3.1 ループ並列化

コンパイラはループの並列化の判断を図 1 の「抽象的な解析」の段階で行ない、これは以下の 2 段階の処理で構成されている。

- (1) 後に行なう抽象的な解析を容易に行なうためのデータフロー的な解析とそれを用いたプログラムの組換え、並列化できるループの候補の選定。
- (2) 前段階で得られた情報を利用しての、そのループの並列化可能かの判断を行なう知識ベースの解析と、その間違いを防ぐための後処理。

両段階は、帰納変数、開始値、増分、反復回数からなるループのパラメータの解析に成功したループの中から、並列化の処理を行なえないループを削っていくことによって最終的な並列化できるループを選び出す。

データフロー的な解析では主にポインタの再利用などによってプログラムが並列化するには複雑になりすぎてないかを判断しループの並列化可能かの判断を行なう。また再帰的に自己への代入を繰り返しているような集合演算に置き換えれる命令の検出を行なう。

3.2 データ管理

多くのコンパイラは、直接プログラム中に MPI などの通信命令を配置することでデータの管理を行なってきた。たとえば PARADIGM ではプログラム内に直接に転送命令を書き込む。

本コンパイラでは変換後のプログラムに低レベルの通信まで含めないのので

- (1) 変換後のプログラムが理解しやすく、人手による最適化も可能。
- (2) 計算機の通信性能に依存する部分を隠蔽できる。

といった利点がある。

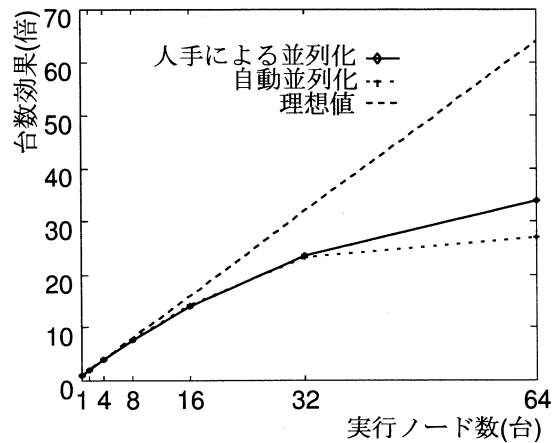


図 2 人手の並列化との比較 (台数効果)

コンパイル時点でのデータの配置などの指定は抽象的なものととどめて、実際にどのようなデータ配置になるのかは実行時にライブラリが決める。これは、従来の通信ライブラリの層が実際の個別の通信を受け持つ一層のみに限られていたのに対し、その上に抽象的な一層を加えて二層の通信ライブラリを構築したことを示している。

4. 性能評価

本研究で開発した自動並列化コンパイラの評価として、従来のCで書かれたプログラムに対して実際に自動並列化を行ないその効果を確認した。実行にはIntel社製、分散メモリ型並列計算機 Paragon を用いた。実行形式の生成のためのコンパイラには、Paragon 用のCコンパイラである icc/Paragon Sun4 Version R5.0.3 を用いている。

4.1 人手との比較

本研究では比較のために共役傾斜法の並列化を行なった。図 2 は並列化による台数効果を示す。並列化する前のプログラムの実行時間は、617 秒である。32 ノード程度までは人手との台数効果の差は小さいが、64 ノードでは大きく差が出ている。これはノード数が増えるとそれに比例してライブラリの処理時間が増えるためと考えられる。ライブラリの処理時間が増えるのは、現状では MPLAlltoallv を用いているからである。

比較対象となる人手によって並列化されたプログラムは高速化のためにプログラムの組みかえを行なっている。これによってノード数が一台の状態でも元のプログラムより高速である。並列化後のプログラムにはオーバーヘッドもあることを念頭において考えれば、複数のノードで実行した場合のライブラリの負荷は小さい。

	問題規模	データ型	反復回数
行列積	512x512	double	-
共役傾斜法	1024x1024	double	1024
クラウト法	1024x1024	float	-
Gauss-Seidel 法	1024x1024	double	1024
SOR 法	1024x1024	double	100

(表 1) 評価に用いたプログラム

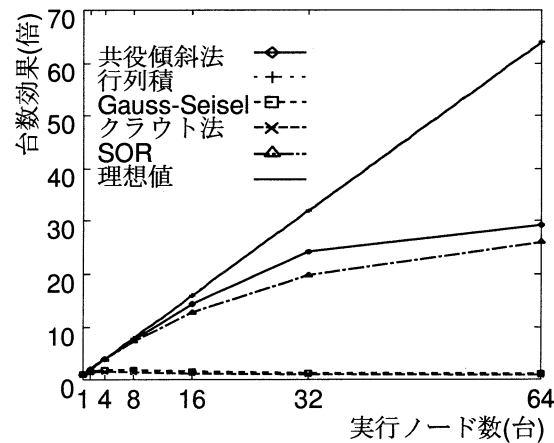


図 3 並列化による速度向上

4.2 コンパイラの評価

評価対象として行列の積を求めるプログラムと、連立一次方程式の解を共役傾斜法と、LU 分解の手法であるクラウト法と、Gauss-Seidel 法と、SOR 法でそれぞれ求めるプログラムを選んだ。条件については表 1 で示す。

図 3 からは、台数効果が三個のグループに分れていることが分かる。理想的なもの（行列積）、良好な結果が得られたもの（共役傾斜法、SOR 法）、良い効果は得られなかったもの（クラウト法、Gauss-Seidel 法）である。良好な結果が得られたグループは比較的並列化に向いているとされているものである。また、良い効果は得られなかったグループは問題自体が並列化に向いていないとされているものであるが、ノード数が 2～8 台では、ある程度の効果を得ることができた。

5. まとめ

本研究で開発したコンパイラは実行時にデータの配置を決定する動的なデータ管理機構を用いるため、コンパイル時にはタスクの分割を優先して並列化を行い、データ分散のための処理はライブラリが動的に行なう。

複数の数値計算のプログラムを並列化して評価した結果、問題によっては人の手による並列化にも匹敵する良好な台数効果を得られた。今のところ C 言語の文法全てに対応していないなどの低機能なところが多いが、現在の開発段階でもテスト対象にしたプログラムを正常にコンパイルでき、またいくつかのプログラムでは高い効果が得られた。

実行時にプログラムの実行状況に合わせて仕事の分割とデータの分割を行なうことにより、計算機自体の性能や MPI の機能を十分に引き出せるようにすることができるという特徴を持っているが、現状でのライブラリはまだ低機能であり、計算機に適した最適化をライブラリに加えていくことによってさらに効果を向上できると考えられる。

X線回折パターンの解析による吸着層構造の研究

化学科 森重國光

The structures and phase transitions of monolayers of isobutane adsorbed on the basal plane of graphite have been examined by means of x-ray diffraction. The diffraction patterns obtained were analyzed on the basis of line shape expected for two-dimensional powdered samples. The monolayers showed an orientationally ordered-disordered phase transition inherent to two-dimensional systems.

1.はじめに

グラファイトの劈開面のような平坦で一様な表面上に物理吸着された気体分子の単分子層は、温度、表面被覆率や吸着分子と固体表面の性質に従って、さまざまな相を生じる。これらのなかには、バルク相に類似したものもあるが、バルク相では見られないものもある。固体表面上の物理吸着層では分子が一平面上に束縛されるため、特に分子形状が表面配列構造や相転移に大きな影響を及ぼすと考えられる。固体イソブタン(トリメチルメタン), $(\text{CH}_3)_3\text{CH}$, は固相転移を示さず 113.74 K で融解する秩序固体である。しかし、この分子の形状の特異性から、固体表面に吸着した二次元結晶中で、分子全体が回転することによる order-disorder 転移が出現することが予想される。すなわち、バルク相では見られない、二次元相に固有なプラスチック結晶の出現が期待される。そこで、グラファイト表面に吸着したイソブタン単分子層の構造と相転移を X 線回折測定によって調べた。

2.実験

X線回折用のグラファイトとして U.C.C. 社製の厚さ 0.4 mm のシート状の Grafoil を 17.7 × 33.5 mm に切り出した。このシート 1 枚 (0.25357 g) を 350°C で 5 時間加熱排気した後、測定試料とした。グラファイトの比表面積は 20.0 m²/g であった。イソブタンは高千穂化学工業製の純度 99.5% のものをそのまま測定に用いた。

X線回折測定は、リガク RINT2500 自動 X 線回折装置を用いて、対称透過法により行った。¹⁾ この回折計は 18 kW の回転対陰極の X 線発生源とペルチエ冷却型の半導体検出器を備えている。Cu ターゲットは 50 kV, 240 mA で作動させた。加熱排気したグラファイトを閉鎖循環型の冷凍機(岩谷, クライオミニ)のコールドヘッドに取り付け、In リングでもって Be 窓をもつ試料セル内に密閉した。試料温度は銅製の試料ホルダーに取りつけた Au-Fe 熱電対により測定した。温度はリガク PTC-20C 温度コントローラーにより ±0.1 K 以内に所定温度に制御した。気体の圧力は 100 Torr フルスケールのキャパシタンスマノメータ (Baratron, type 627) で測定した。

3. 結果と考察

図 1 に 187K で測定したイソブタンの吸着等温線を示す。等温線の形から、少なくとも 2 層目までは層状に吸着が進行することがわかる。B 点法により単分子層吸着量として 2.4ml(STP)/g (3.23 分子/ nm^2) という値が得られた。この値を基準にして表面における吸着分子の被覆率(θ)を決めた。

$\theta=0.72$ と 1.23 の 2 つの被覆率における X 線回折パターンの温度変化をそれぞれ図 2 および 3 に示す。回折パターンは二次元結晶に特有な高角側にすそを引いた形をしており、吸着イソブタンがグラファイト表面上で規則正しく配列していることがわかる。50K では、 $2\theta=17^\circ$ 付近の主ピークに加えて、 $2\theta=30^\circ$ 付近に小さなサブピークが見られる。サブピークは $\theta=1.23$ よりも $\theta=0.72$ の方が明瞭である。100K に昇温すると、いずれの被覆率においてもサブピークは消失し、主ピークのみになる。さらに 150K に昇温すると、 $\theta=0.72$ の場合には主ピークもブロードになり、二次元結晶の融解が生じたことがわかる。 $\theta=1.23$ では、150K でも主ピークはシャープなままであり、二次元結晶の融点が被覆率の増大に伴って上昇していることが示される。

回折パターンの変化から、低温において分子配向の秩序状態が達成されていると考えられるので、いろいろな配向モデルについて回折パターンのシミュレーションを行った。その結果、図 4 に示す構造において実測パターンと計算パターンの間により一致が見られた。このときの計算パターンを図 2 および 3 の 50K の実測パターン中に実線で示してある。計算パターンは粉末平均化したガウス曲線を用いて得た。²⁾

図 4 の低温秩序相は、六方格子構造の平面群 $p31m$ に属する。分子はその一般等価位置 $(x,y;-y,x-y;y-x,-x;y,x;-x,y-x;x-y,-y)$ を占める。そして、分子重心の C 原子はその特殊点 1 a (点対称 $3m$) にある。結晶構造因子は、

$$\begin{aligned} A &= 2\{\cos \pi (h-k)(x-y) \cos \pi (h+k)(x+y) + \cos \pi (h+2k)(x-y) \cos \pi h(x+y) \\ &\quad + \cos \pi (2h+k)(x-y) \cos \pi k(x+y)\} \\ B &= 2\{\cos \pi (h-k)(x-y) \sin \pi (h+k)(x+y) - \cos \pi (h+2k)(x-y) \sin \pi h(x+y) \\ &\quad - \cos \pi (2h+k)(x-y) \sin \pi k(x+y)\} \end{aligned}$$

(International Table for X-ray Crystallography, vol.1) の関係を用い、座標の重複度も考慮して計算した。強度計算に水素原子は含めなかった。 $\theta=0.72$ で 50K のとき、格子定数 $a=0.6079\text{nm}$, メチル基 C 原子の原子座標 $x=0.0, y=0.199 \pm 0.005$, 温度因子 $B=4\text{\AA}^2$ であった。ただし、観測される回折ピークはただ 2 本だけであったので、温度因子はフィッティングパラメータに含めなかった。メチル基炭素の位置を変えると、サブピーク強度が増したり、別の位置に余分なピークが生じたりした。この座標でもっともサブピークが小さくなる。従って、温度因子をもっと大きくすると、メチル基の座標も変化する。 $\theta=1.23, 50\text{K}$ では $a=0.5879\text{nm}$, メチル基 C の原子座標 $x=0.0, y=0.190$ であった。この構造より計算した表面密度はそれぞれ $3.12, 3.34$ 分子/ nm^2 となり、吸着等温線より求めたものとよく一致した。原子座標より、分子を表面上に投影したときの C-C 結合距離は $0.121 \pm 0.003, 0.112\text{nm}$

となる。分子が3つのCH₃基を表面に接触させて吸着されており、完全に静止しているとした場合のC-C結合の表面への射影は分子構造³⁾より0.146nmと求まるので、50Kにおいても分子全体の熱運動はかなり激しいものと思われる。

C₃軸のまわりの分子全体の回転運動として、2種類のを考えた。C₃軸のまわりの自由回転モデルによる結晶構造因子は次の式で与えられる。⁴⁾

$$|F(hk)|^2 = [fc + 3fc \times J_0(x)]^2$$

$$x = 4\pi \rho \sin \theta / \lambda$$

ここで、 ρ はC-C結合の表面への射影であり、 $J_0(x)$ は0次のベッセル関数である。図5に見られるように、このモデルによる計算パターンは実測パターンとまったく合わなかった。次に、図4の構造の分子が、二次元結晶全体で60°回転して、別の配向をとるといふ運動を激しく繰り返すというモデルを考えた。これは、図6のように2つの等価な分子方位が熱運動によって統計的に達成されていることに相当する。

この場合、平面群は統計的にp6mmになる。分子は一般等価位置(x,y;-y,x-y;y-x,-x,y,x;-x,y-x;x-y,-y;-x,-y;y,y-x;x-y,x;-y,-x;x,x-y;y-x,y)を占める。分子重心のC原子は特殊点1a(点対称6mm)にある。この場合の結晶構造因子は、

$$A = 4\{\cos \pi(h-k)(x-y)\cos \pi(h+k)(x+y) + \cos \pi(h+2k)(x-y)\cos \pi h(x+y) \\ + \cos \pi(2h+k)(x-y)\cos \pi k(x+y)\}$$

$$B = 0$$

の関係をを用いて求めた。 $\theta = 0.72$, $T = 100\text{K}$ において $a = 0.6120\text{nm}$, メチル基Cの原子座標 $x = 0.0, y = 0.225$, 温度因子 $B = 4\text{\AA}^2$, $\theta = 1.23$, 100K では $a = 0.5888\text{nm}$, メチル基Cの原子座標 $x = 0.0, y = 0.248$ となった。そして、図2および3の100Kの回折パターン中の実線で示されるように、計算パターンと実測パターンの間でよい一致が得られた。C₃軸のまわりの分子の回転運動が生じることによって $2\theta = 30^\circ$ 付近のサブピークが消失することが推定される。

熱測定の結果から示されるように、 $\theta = 1.23$ においても基本的には同様な分子方位のorder-disorder転移が生じるものと思われる。高被覆率においては、分子配向の秩序化が生じる速度が遅く、そのため50Kの回折パターン中でサブピークが弱く出ているものと考えられる。

分子配向のorder-disorder転移を調べるため、 $\theta = 0.69$ において $2\theta = 30^\circ$ 付近の(11)サブピークの温度依存性を調べた。図7に見られるように、サブピーク強度は温度上昇に伴って次第に減少していった。回折プロファイルに粉末平均化したローレンツ曲線²⁾の当てはめを行い、ピーク強度の温度依存性をプロットしたところ、図8のようになった。回折データの統計変動が大きいので、当てはめに際して半値幅を固定して行ったため、高温側で明らかにピークが消失している場合にも人工的なピークが残った。その点を考慮すると、50~55Kでサブピーク強度が少し減少した後、70K付近でサブピークが消失していることがわかる。これは、熱測定により検出された75Kでの二次元固相間転移によく対応してい

る。

最後に、単分子層の等温圧縮率、熱膨張率および融点を調べるため、(10)主ピークのみを被覆率および温度の関数として測定した。 $\theta=0.80$ のときの主ピークの温度依存性を図9に示す。また、回折プロファイルへの粉末平均化したローレンツ曲線の当てはめを行い、ピークの幅、および位置の温度依存性をプロットしたものをそれぞれ図10と11に示す。ピーク位置は、サブモノレイヤーでは温度上昇によって大きく低角側にシフトしている。 $\theta \geq 1$ のモノレイヤーでは、吸着量の増大に伴って、ピーク位置が高角側にシフトした。また温度上昇によってピーク位置は最初低角側にシフトし、80 K付近で高角側にシフトし、そしてその後、再び熱膨張による低角側へのシフトを示した。これらのことから、どのような被覆率においても、イソブタン単分子層は不整合相であることがわかる。 $\theta \leq 0.8$ のサブモノレイヤーでは、熱膨張が大きく、124 K付近で三重点融解している。 $\theta \geq 0.8$ のモノレイヤーでは、吸着量の増大とともに単分子層の収縮が生じている。80 K付近で見られる熱収縮は熱測定によって見出された85 Kのモノレイヤー内での order-disorder 転移の出現とよく対応しているように思われる。モノレイヤーは152 K付近で融解する。

参考文献

1. K.Morishige,K.Inoue,and K.Imai,Langmuir 12,4889(1996)
2. H.P.Schildberg and H.J.Lauter,Surf.Sci. 208,507(1989)
3. M.D.Harmony,V.W.Laurie,R.L.kuczkowski,R.H.Schwendeman,D.A.Ramsay,
F.J.Lovas,W.J.lafferty,and A.G.Maki,J.Phys. Chem.Ref.Data 8,619(1979)
- 4.J.M.Bijvoet and J.A.A.Ketelaar,J.Am.Chem.Soc. 54,625(1932)

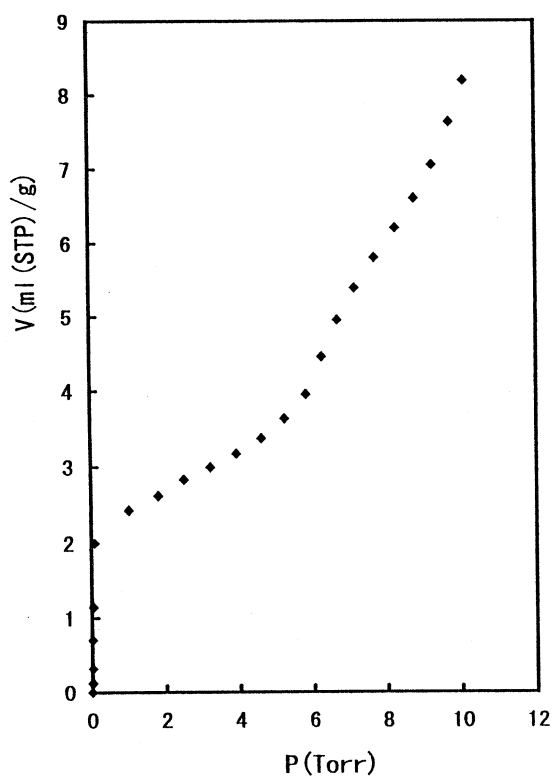


Fig.1 Adsorption isotherm of isobutane on graphite at 187 K.

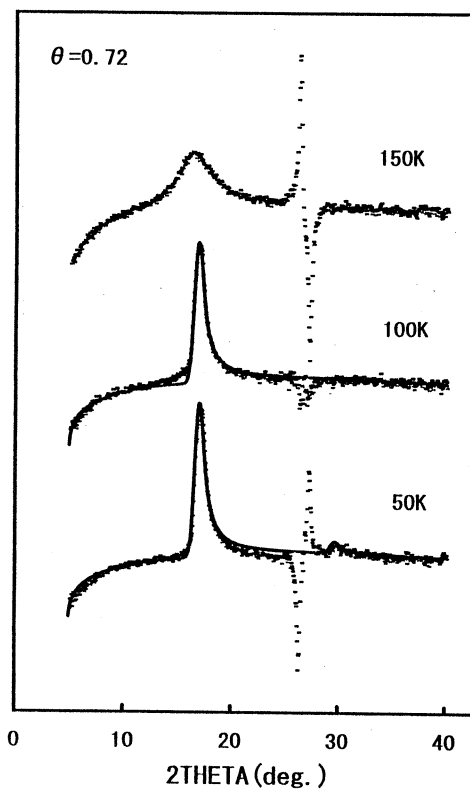


Fig.2 X-ray diffraction patterns of isobutane adsorbed on graphite as a function of temperature.

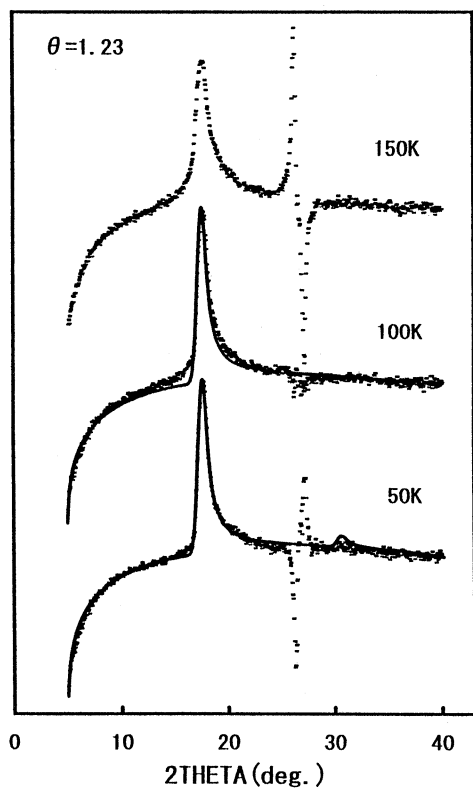


Fig.3 X-ray diffraction patterns of isobutane adsorbed on graphite as a function of temperature.

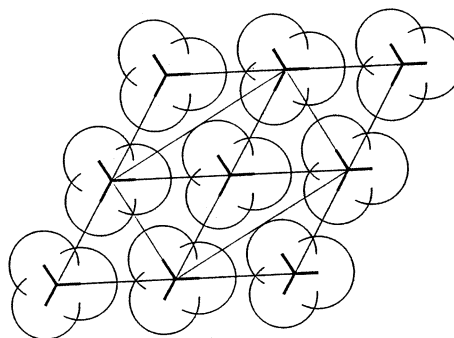


Fig.4 Structure of an isobutane monolayer film on graphite at low temperatures.

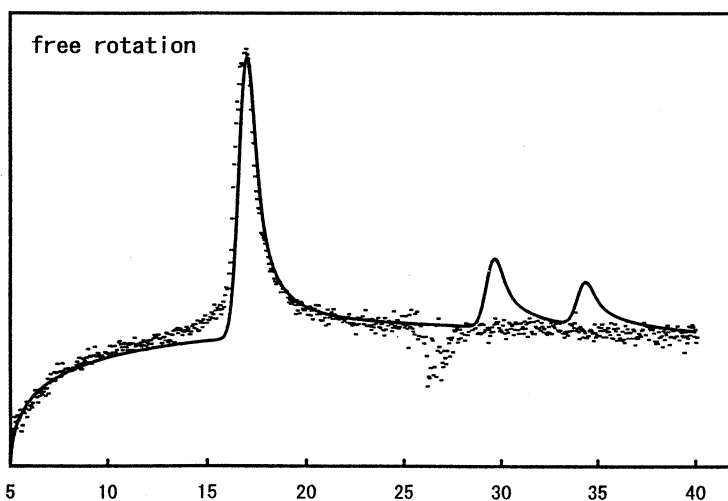


Fig.5 Calculated diffraction pattern of an isobutane monolayer film due to a free rotation model.

Fig.6 Structure of an isobutane monolayer film on graphite at higher temperatures.

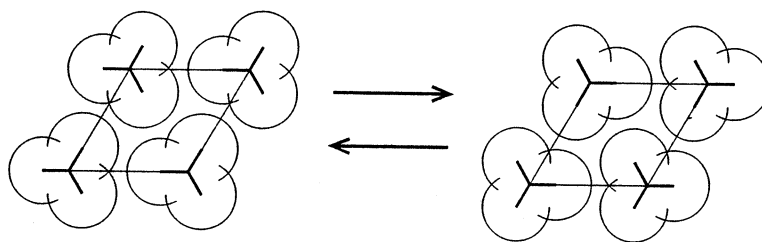
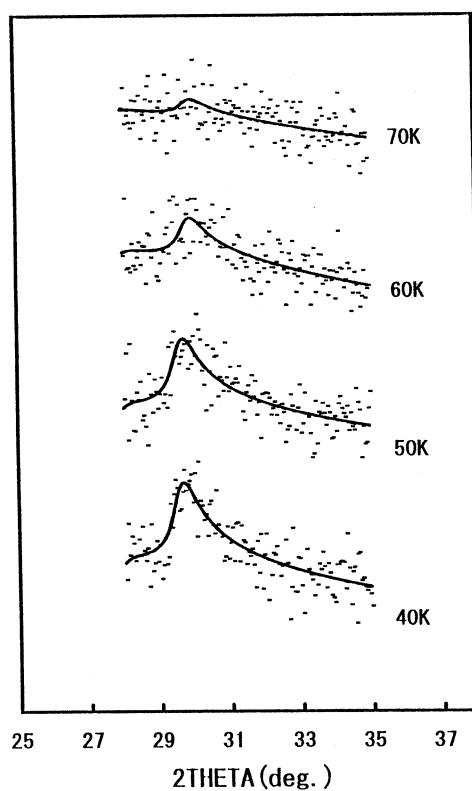


Fig.7 Sub-peak profiles of isobutane adsorbed on graphite as a function of temperature.



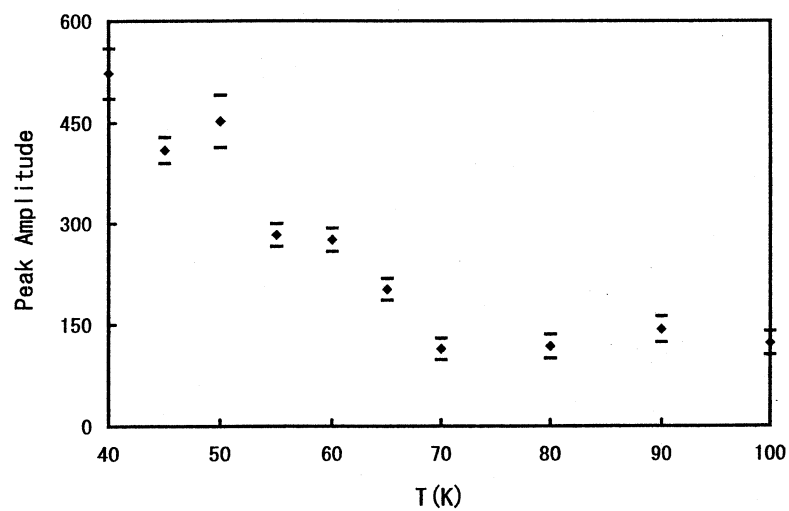


Fig.8 Peak amplitude of sub-peak vs. temperature.

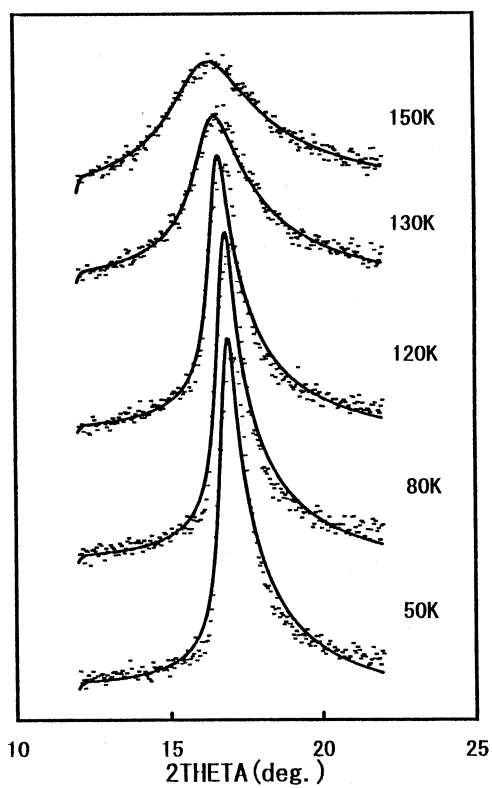


Fig.9 Main-peak profiles of isobutane adsorbed on graphite as a function of temperature.

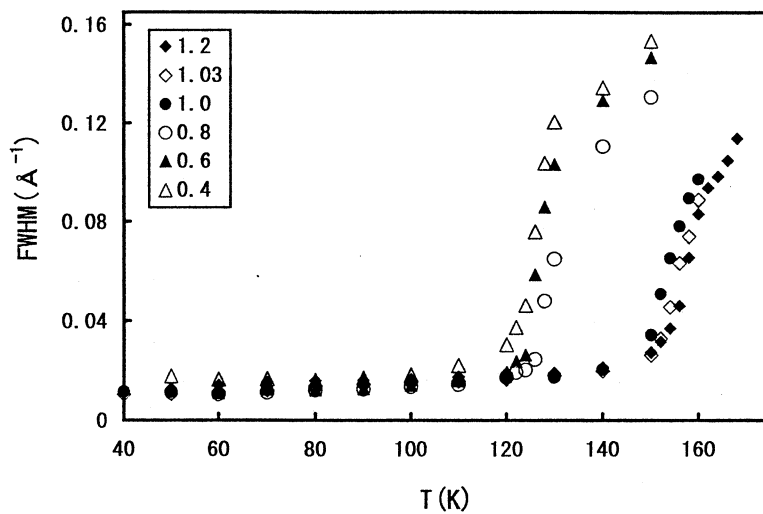


Fig.10 Peak widths vs. temperature at various coverages.

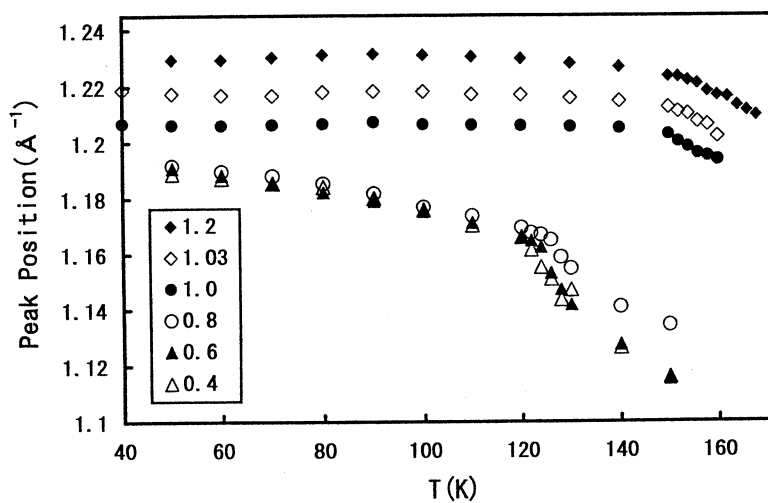


Fig.11 Peak positions vs. temperature at various coverages.

並列処理におけるタイリング手法の検討

橋本 禮治 奥野 博之

岡山理科大学大学院工学研究科電子工学専攻

並列処理技術は、従来より気象予報、CFD(Computational Fluid Dynamics:流体解析)、QCD(Quantum Chromodynamics:量子色力学)、構造解析、電子回路シミュレーション、原子炉安全性解析、核融合シミュレーション、ニューラルネットシミュレーション、画像処理など多くの分野でその利用が注目されている。また、並列処理技術はスーパーコンピュータのような超高速コンピュータの開発、価格性能比の優れたコンピュータシステムの開発、信頼性の高いコンピュータシステムの開発などに対しても有効で、半導体技術の限界にともない今後ますます重要性を増すものと思われる [1]。

並列処理システムの一形態である分散メモリ型並列処理システムは、一般に計算を各ノードに分割して処理させるため、他ノードのデータが必要な場合データ通信を行う必要がある。データ通信を行うとデータを送信（受信）するまで各ノードのCPUに待ち時間が発生し処理能力低下の原因となる。本論文は並列処理において通信による各ノードの待ち時間を省き、並列処理の欠点である通信時間を最小限にする手法としてタイリングを検討するものである。

1 はじめに

分散メモリ型並列処理システムは共有メモリ型並列処理システムと比較して、必要なノード間でのみデータ通信を行うため、通信データを待たされるノードが少なくなり実行ノード数に対する速度向上率が良く大規模数値計算に適している。しかし他のノードのデータが必要な場合、データを送受信するルーチンが必要となりプログラムが複雑になる。よって、一般にデータ集計部分やブロードキャスト部分などはグループ通信に頼る傾向がある。グループ通信とは1回のルーチンコールで複数のノードがデータのやりとりを一斉に行う処理である。グループ通信は全ノードが同期した後データの送受信のみを行うため、各ノードのCPUに無駄な待ち時間が生じる。

一般に分散メモリ型並列処理システムでの、並列化による性能向上のために留意すべき点として、以下の点があげられる [2]。

- 逐次処理部分のオーバーヘッドを小さくする：アルゴリズムやライブラリレベルで、並列部分の割合が大きくなるようにアルゴリズムを工夫する。
- 負荷のばらつきを考えデータを分割する：各ノードに処理を均等に割り当てる。
- 通信、同期のオーバーヘッドを小さくする：極力通信を行わないようアルゴリズムを工夫する。通信と演算のオーバーラップにより処理を行う。

以上3点の中で、本研究では特に3つ目の通信と“演算のオーバーラップ”処理に着目し検討を行っている。並列処理において通信・同期を行う際、一般にグループ通信に頼る傾向があるため“通信・同期のオーバーヘッド”が並列処理の処理能力低下の主な原因と考えられる。そこで、グループ通信と同様の処理を通信と演算のオーバーラップにより処理することができれば、並列処理の処理能力低下の原因である“通信・同期のオーバーヘッド”を克服しその計算機のピーク性能に近い値を出すことができる。本研究では通信と演算のオーバーラップにより処理する方式をタイリングと呼ぶこととする。

本研究を行うにあたり本学に導入されているintel社の分散メモリ型並列コンピュータ“Paragon XP/S”を使用した。

2 タイリング

分散メモリ型並列システムでの並列化による性能向上のために留意すべき点のうち、一般に“通信・同期のオーバーヘッド”が並列処理の処理能力低下の主な原因と考えられる。これは通信・同期を

行う際、グループ通信に頼る傾向があるためである。そこで、グループ通信と同様の処理をタイリングを用いてプログラミングすることができれば、並列処理の処理能力低下の原因である“通信・同期のオーバーヘッド”を克服しその計算機のピーク性能に近い値を出すことが予想される。

図1は並列処理においてグループ通信とタイリングを比較したときの図である。上段にグループ通信、下段にタイリングによる処理を表し横軸に時間をとっている。グループ通信の場合、“task1”が終了すると全てのノードで同期をとり通信“com1”が行われる。このため、処理“task1”が早く終了したノードは他のノードの処理“task1”が終了するまで待たなければならない。また、通信の間計算等の処理を行うことはできない。このため、全ノードのCPUに無駄な待ち時間を与える。通信“com1”が終了すると、次の処理“task2”が行われる。このようにグループ通信では、計算と通信は独立して動作していない。タイリングとはこの欠点を克服するために、データを要求するノードに対し一対一非同期通信を用いることにより、計算と通信を並行して処理させ処理能力の向上を計る手法である。非同期通信は、別に送受信完了呼び出しが必要になるが、データを送信（受信）し終えなくとも次の処理に進むことができる[3]。このため、計算と通信を並行して処理することが可能である。図1で説明すると、タイリングによる処理は“task1”が終了したノードから順にデータを必要とするノードに対しデータを送受信（“com1”）し、同時に次の処理“task2”を行う。このため、各ノードのCPUに待ち時間を与えることなく処理を行えるので、グループ通信による並列処理よりも早く処理することができる。タイリングは送受信が完了し終えなくとも次の処理を行うため、使用するデータが未受信のときなどにデータの整合性のため送受信完了の呼び出しが必要となる。送受信完了呼び出しを使用すると、ノードはデータが受信されるまで待つ。このように、タイリングによる処理は送受信完了呼び出しを使用するタイミングが重要となる。なお、今回の研究では一対一非同期通信に“MPI_ISEND”、“MPI_IRECV”、“MPI_WAIT”[6, 7]の3つのルーチンを使用した。これらはそれぞれ、データを送信し終えなくとも次のプロセスに進むことのできるルーチン、データを受信し終えなくとも次のプロセスに進むことのできるルーチン、データの送受信を終了させるためのルーチンである。今回の検討ではタイリング手法を用い、一例として共役傾斜法におけるタイリングの有効性を確かめる。

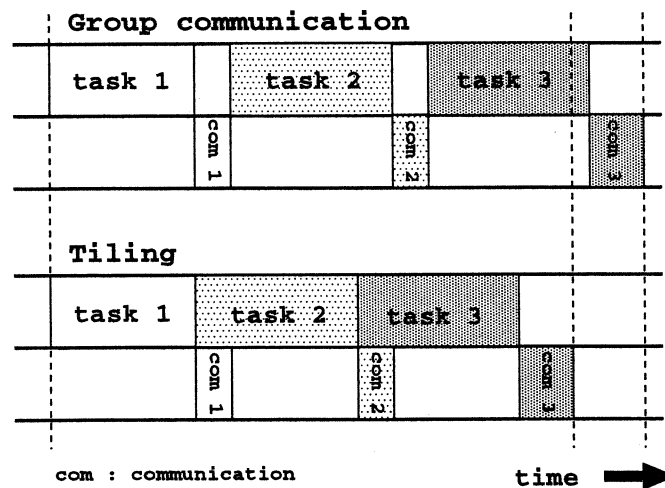


図 1: グループ通信とタイリングの比較

3 共役傾斜法

共役傾斜法 [4] は、電磁気学や流体力学などに欠かすことのできない大規模連立方程式を解く反復法の1つである。現在の半導体技術では、100万項を越えるような大規模連立方程式を解くために最

速のベクトル演算器を用いたとしても、処理速度に限界があるため並列化に期待が集まっている [5]。
行列 A が正定値対称行列の場合、係数行列 A 、定数項 b 、解ベクトル x をそれぞれ、

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

とすると、連立一次方程式は

$$Ax = b$$

と表すことができる。

次に、第 k 近似解 x_k 、第 k 回の修正方向ベクトル q_k 、第 k 回の残差ベクトル r_k を

$$x_k = \begin{bmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ \vdots \\ x_n^{(k)} \end{bmatrix}, \quad q_k = \begin{bmatrix} q_1^{(k)} \\ q_2^{(k)} \\ \vdots \\ q_n^{(k)} \end{bmatrix}, \quad r_k = \begin{bmatrix} r_1^{(k)} \\ r_2^{(k)} \\ \vdots \\ r_n^{(k)} \end{bmatrix}$$

として考える。

以下に共役傾斜法のアルゴリズムを示す。

1. 初期想定値 $x^{(0)}$ を定め、 $k = 0$ として次の値を求める。

$$q^{(0)} = r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$$

2. $s = Aq^{(k)}$ とし、第 k 回の修正係数 $\alpha^{(k)}$ をもとめ、第 $k+1$ 近似値 $x^{(k+1)}$ をもとめる。

$$\alpha^{(k)} = \frac{\eta}{\xi}, \quad \text{ただし} \quad \eta = \sum_{i=1}^n q_i^{(k)} r_i^{(k)}, \quad \xi = \sum_{i=1}^n q_i^{(k)} s_i$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} q^{(k)} \quad (1)$$

3. 第 $k+1$ 近似値の残差 $r^{(k+1)}$ をもとめる。

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha^{(k)} s \quad (= b - Ax^{(k+1)}) \quad (2)$$

$$\beta^{(k)} = \frac{\zeta}{\xi}, \quad \text{ただし} \quad \zeta = \sum_{i=1}^n r_i^{(k+1)} s_i$$

$$q^{(k+1)} = r^{(k+1)} - \beta^{(k)} q^{(k)} \quad (3)$$

を計算する。

4. すべての $i (1 \leq i \leq n)$ について、 $|r_i^{(k+1)}| < \varepsilon$ ならば、6. へ移る。
 $k < n-1$ ならば、 $k = k+1$ として 2. へもどる。
5. $x^{(0)} = x^{(n)}$ として 1. へもどる。
6. $x^{(k+1)}$ を解とする。

4 実験

以下に、今回行った実験の内容を記す。

4.1 タイリングの有効性

タイリングの有効性を確かめるために、あるデータを1つのノードに集める簡単な比較実験を行った。実験は全てのノードの送信バッファから1つの宛先ノードの受信バッファにメッセージを送信するグループ通信“MPI_GATHER”[6, 7]一回分と、それと同様の処理を行うルーチンを一対一非同期通信を用いて記述し比較する。タイリングによる処理の方が処理時間が短ければ、タイリングの有効性を証明できる。なお、この実験は各ノードのデータの大きさを8Mbyteにしている。

4.2 共役傾斜法の並列化

共役傾斜法の並列化を行うにあたり、 A, b, x, r をブロック分割する。共役傾斜法のアルゴリズムにおいて並列化の妨げとなっている部分は、 q, η, ξ, ζ である。これは、計算を行う際、全ノードのデータが必要となるためである。式(1)の $\alpha^{(k)} q^{(k)}$ を計算する際、1次元配列 q すべての要素が各ノードで必要となる。よって、式(1)の前に各ノードが通信を行い、1次元配列 q のすべての要素を知る必要がある。また、式(2)の α 、式(3)の β を求める際必要となる η, ξ, ζ も各ノードのデータを集め、そのデータの和を求める処理が必要となる。グループ通信による共役傾斜法では、前者の処理をグループ通信“MPI_ALLGATHER”[6, 7]（全ノードの送信バッファから、全ノードの受信バッファに互いにデータを送受信するルーチン）後者の処理をグループ通信“MPI_ALLREDUCE”[6, 7]（全ノードの送信バッファのデータが、通信しながら演算され、結果が全ノードの受信バッファに入るルーチン）を用い並列化を行った。また、タイリングによる共役傾斜法では、一対一非同期通信を使用し、並列化を行った。

5 結果・考察

タイリングの有効性を確かめる比較実験の結果を表1に記す。各データは10回計測し平均を求めたものである。この実験結果より4ノードのときを除いてタイリングの効果が見られる。

表 1: タイリングの有効性

ノード数 (個)	グループ通信 (sec)	タイリング (sec)	速度向上率 (倍)
4	0.032753	0.035825	0.914
16	0.062223	0.037093	1.677
36	0.077736	0.046413	1.675
64	0.078696	0.059186	1.330
100	0.085045	0.057753	1.473
144	0.104264	0.065109	1.601
196	0.115154	0.083981	1.371
256	0.153100	0.096857	1.581

次に、共役傾斜法（メッシュサイズ 1024×1024 ）をグループ通信、タイリングによる方法で解いた結果を表2に記す。各データは10回計測し平均を求めたものである。共役傾斜法をグループ通信およびタイリングにより処理した結果、実行ノード数が2ノードから32ノードのときタイリングによる効果が見られた。

表 2: グループ通信、タイリングによる共役傾斜法の結果

ノード数 (個)	グループ通信 (sec)	タイリング (sec)	速度向上率 (倍)
2	309.36	301.66	1.026
4	156.52	153.63	1.019
8	80.82	79.64	1.015
16	43.48	42.95	1.012
32	26.10	25.61	1.019
64	17.28	21.16	0.817
128	14.21	26.89	0.528

32 ノードを越えると速度向上率が低下した原因は、データを送信（受信）する際使用される（一対一非同期通信使用時）データの識別子（“request ID”）の占有確率が高くなったためと思われる。今回使用した並列コンピュータ “Paragon XP/S” は各ノードに送信（受信）したデータを識別するための識別子が 64 個あり多ノードでプログラムを実行すると、この識別子の占有確率が高くなり、識別子の順番待ちが生じたのだと考えられる。つまり、実行ノード 32 ノードでタイリング（MPI_ALLGATHER[6, 7] に変わるタイリングによる処理）を 1 回実行しても、送信命令 31 回、受信命令 31 回で一度に使用される識別子は 62 個となり識別子の順番待ちは発生しない。しかし、実行ノード数が 32 ノードを越えると全ての識別子が同時に占有される確率が高くなり、識別子の順番待ちが発生する。このため 32 ノードを越えると速度向上率が低下したのだと考えられる。

また、他に処理能力が低下した原因として以下の 2 点が考えられる。

- ・ 実行ノード数が多ノードになると送受信完了ルーチンの実行回数が増加し送受信完了ルーチンのタイミングにずれが生じ処理能力が低下したのだと考えられる。
- ・ 1 回の送受信完了ルーチンに処理時間がかかりすぎている。これは、今回使用した送受信完了ルーチンの内部で、タイリングに不必要な処理（送受信されるデータの大きさを調べる等）を行っていたためである。

6 結言

二つの実験を行った結果、タイリングの有効性を確認することができた。しかし、タイリングによる処理を繰り返し行くと、データ識別子の使いすぎ、送受信完了ルーチンのタイミングのずれなどにより処理能力の低下が見られるので今後の課題として以下の 3 点の検討が必要であると考えられる。

- ・ 実行ノード数の倍のデータ識別子を持つハードウェアが必要
- ・ 送受信においてデータ識別子を極力使用しないアルゴリズムの検討
- ・ 送受信完了ルーチンを行うタイミングの検討
- ・ タイリングに必要な処理を省いた簡易版の送受信完了ルーチンが必要

また、タイリングに適したアルゴリズムが必要であると考えられる。今回検討したアルゴリズムは、グループ通信の結果と比較するために、グループ通信用に考えられたものであり、タイリングの使用に必ずしも適しているとはいえない。すなわち、タイリングを有効にする通信中の計算を行わせるアルゴリズムが考慮されていない。グループ通信による処理と比較したタイリングの処理は、グループ通信に使用したアルゴリズムのグループ通信で記述されている部分をタイリングに変更しており、通信中に計算を行っていない部分があるからである。

参考文献

- [1] 笠原博徳,「並列処理技術」,(株式会社コロナ社),1977.
- [2] 湯浅太一,安村通晃,中田登志之,「はじめての並列プログラミング」,(共立出版株式会社),1998.
- [3] 青山幸也,「RS/6000 SP 並列プログラミング虎の巻 MPI 版」,(日本アイ・ビー・エム株式会社),1996.
- [4] 高田勝,春海佳三郎,「数値計算の手順と実際」,(株式会社コロナ社),1984.
- [5] 三浦隆志,「修士論文 共役傾斜法による行列計算の並列化に関する研究」,(岡山理科大学大学院),1998.
- [6] Marc Snir,Steve Otto,Steven Huss-Lederman,David Walker,Jack Dongarra 「MPI -The Complete Reference Volume1,The MPI Core second edition」,(The MIT Press),1998.
- [7] William Gropp,Steven Huss-Lederman,Andrew Lumsdaine,Ewing Lusk,Bill Nitzberg, William Saphir,Marc Snir 「MPI -The Complete Reference Volume2,The MPI Extensions」,(The MIT Press),1998.

遺伝的アルゴリズムと反復局所探索法を融合した進化的解法

岡山理科大学 工学部 情報工学科 片山 謙吾
岡山理科大学 工学部 情報工学科 成久 洋之

要 約 — 組合せ最適化問題を代表する巡回セールスマン問題 (TSP) に対して、従来からさまざまな近似解法が提案されている。その代表的な解法として、TSP 専用の局所探索法である 2-Opt, 3-Opt, Lin-Kernighan 法がある。更にこれらの探索法をアルゴリズム内部に含むことで実現される、焼き鈍し法、遺伝的アルゴリズム、タブサーチ、反復局所探索法などは、より効率的に良好な解を算出可能なアプローチとして知られている。本論文では、TSP に対して最も効率的な解法の一つである反復局所探索法に、遺伝的アルゴリズムの交叉法的な技法を導入した新しい進化的解法について紹介すると共に、他の組合せ最適化問題に適用する際の注意点について考察する。

1 まえがき

組合せ最適化問題は、工学、理学、経営学、オペレーションズリサーチなどのさまざまな分野に登場し、効率的に最適解を導くことは極めて困難であることが知られている。問題の特性上、組み合わせで生じる解の数は指数的な爆発を起し、多項式時間内に最適解を見つけることは不可能であることが一般的な見方である。従って、そのような組合せ最適化問題に対しては、効率的に良好な解を算出する解法の重要性が増している。つまり、現実的側面において、扱われる組合せ最適化問題のサイズは今後ますます大規模化すると考えられており、実用的な許容時間内に最適解に近い解 (近似解) を算出する解法の必要性が高まっているのである。

組合せ最適化問題に対する解法はさまざま存在するが、一般に“厳密解法”と“近似解法”に大きく区分される。厳密解法を利用する場合は最適解を算出することを目的とするが、大規模な問題に対しては膨大な計算時間を必要とするため現実的でないことが知られている。また、近似解法を利用する場合は比較的短時間に良質な解を算出可能であるが、最適解を保証するものではない。

一般に、近似解法の研究においては多種多様なアプローチが試みられている。そのような近似解法における最も基本的な戦略は、局所探索法 (Local Search) がベースに置かれている。局所探索法は、与えられた解 x に対して、ある近傍操作を加えることでその近傍 $N(x)$ から新しい解 x' を生成し、その生成された解 x' が以前与えられていた解 x よりも良い評価値を有すれば (つまり、 $f(x') < f(x)$ の場合)、その解 x' を x とみなし、再び近傍操作を施すことで近傍 $N(x)$ から新しい解を生成および評価する改善処理を繰り返すものである。この局所探索法によって最終的に得られる解 x は、 $N(x)$ の中に改善解が存在しなくなった時とされ、この x は近傍 N のもとで局所的に最適解 (局所解) となる。この局所解の質は、局所探索法で使用される近傍操作に大きく依存するものの、そこで使用される近傍 N のもとでは、これ以上に評価値の良い解は存在しないことを意味する。そのようなことから、この局所探索法によって得られる解は、しばしば満足のゆく上質な解ではないことがある。それは最適解の算出を保証する方法ではないため、最適解から離れ過ぎる解を算出してしまいう傾向が否定できないからである。そこで、この局所探索法を用いてより良好な解を得るための最も簡単な方法としては、局所探索法を与えられた時間内、繰り返し実行する方法がある。この方法の実装は極めて簡潔でありながら、比較的満足のいく解が得られ、実用上有効なアプローチの一つとされている。一般に、この方法は“ランダム多点局所探索法” (Random Multi-start Local Search, MSLS) [15, 20] と呼ばれる。MSLS はランダムな解

から探索が行なわれ、局所解を得たならば、再びランダムな解を生成し、局所探索法を繰り返し実行する方法で、ある与えられた時間、または前もって設定した繰り返し回数に到達した時を処理の終了条件とする。最終的に、複数回の実行によって得られた解の中で最良の解を算出するものである。

MSLS よりも更に進んだアイデアを導入した、“反復局所探索法” (Iterated Local Search, ILS) [1, 2, 6, 7, 9, 14, 15, 16, 17] がある。ILS の基本的な戦略は、「比較的良好な解の近くには、更に良好な解があるかも知れない」 [8] という経験的な推測をベースに置いている。つまり、MSLS のようにランダムな解を用いて、再び局所解を探索するのではなく、得られた局所解から局所探索法で使用された近傍操作とは異なる近傍操作を利用して局所解からの脱出を図り、再び探索を繰り返し行なうものである。巡回セールスマン問題においては、ある近傍操作を用いて、局所解からの脱出を行ない、再び、2-Opt 近傍や 3-Opt 近傍、Lin-Kernighan の近傍などを利用した局所探索法（これらを 2-Opt 法、3-Opt 法、LK 法 [5] と呼ぶ）を繰り返すもので、1990 年代初期以来、最も強力な一アプローチとして君臨している [1, 2, 6]。この ILS において、局所解から脱出するための近傍操作としては“double-bridge 技法”があり、その有効性が数多く報告されている。

本論文では、巡回セールスマン問題に対する ILS で使用される double-bridge 技法の代わりに、遺伝的アルゴリズムの交叉法的な技法を導入した、“遺伝的反復局所探索法” (Genetic Iterated Local Search, GILS) について記述する [14, 15, 16, 17]。この GILS は以前我々によって提案され、巡回セールスマン問題に対して極めて良好な近似解が得られることを報告した。本論文では、TSP に対する優れた解法および GILS の枠組みを紹介すると共に、他の組合せ最適化問題に適用する場合の注意点およびその特徴などについて考察する。

2 TSP に対する有効なアプローチとその周辺

巡回セールスマン問題 (Traveling Salesman Problem, TSP) とは、与えられた n 個の点を有する無向完全グラフにおいて、各点間の距離が与えられた時、必ず一度だけ各点を通る Hamilton 閉路でその総距離が最小になるものを求める問題である [1]。

TSP を解くための代表的な解法として、ランダム多点局所探索法、simulated annealing, tabu search, ant colony, neural networks などの多種多様なアプローチが今までに提案されてきた。特に優れたものとして、ここでは反復局所探索法 (ILS) および遺伝的アルゴリズム (GA) を基本にした解法について最近の動向をそれぞれ記述する。まず ILS の基本形を以下に示す。

Standard Iterated Local Search

- 1 Generate an initial solution S (improved by a local search from a random solution).
- 2 Do the following for a given number of iterations.
 - 2.1 Perform an “escape technique” on S , obtaining S' .
 - 2.2 Run a “local search” on S' , obtaining S'' .
 - 2.3 If $Cost(S'') < Cost(S)$, then set $S = S''$.
- 3 Return S .

ILS では、Step 2.1 で使用する局所探索法と Step 2.3 の局所解脱出技法によって、ILS 自身の近似解算出性能に大きな相違が現われる [7]。TSP で代表的な ILS として、Johnson は局所探索法に LK 法 [5] を使用し、局所解脱出技法として 4 つの枝をランダムに入れ替える double-bridge 技法を用いた。この ILS は Iterated Lin-Kernighan (ILK) 法と呼ばれ、優れた結果を報告している [2, 1]。更に Martin らも同様に double-bridge 技法を利用し、Large-Step Markov Chain と呼ば

れる解法を提案した [6]. これは simulated annealing のアイデアを導入した ILS で, ILK と同様に優れた解法として知られている. また, この Large-Step Markov Chain の改良版を Hong らは提案している [9]. 更に Hong らは, 有効な局所解脱出技法は 4 つの枝を入れ替える double-bridge 技法ではなく, ILS において使用する局所探索法および与えられる問題のタイプによって, 入れ替えるべき最良な枝数が存在することに関して報告した. そこでは, 入れ替える枝数 k を 2 から 50 までの k -change について, TSP で頻繁に利用される局所探索法に組み込み検討している. その結果, 2-Opt や 3-Opt 法では 3-change から 8-change が有効であり, LK 法に対しては更に多くの枝数 (8-change から 50-change) を使用した方が優れた結果を得られると報告している. また, Codenotti らは従来の 4-change double-bridge 技法と, 彼らの提案する ϵ -move および k -move と呼ばれる技法を, TSP の 2-Opt, 3-Opt, LK 法の局所探索法にそれぞれ組み込むことでそれらの性能を比較検討した [7]. その結果, 彼らの提案した技法は, 従来の double-bridge 技法よりも優れた性能を示すと報告している.

一方, GA に属する解法として, Mühlenbein は, 局所探索法を組み込んだ GA (genetic local search, GLS, 遺伝的局所探索法) の枠組みを利用し, maximum preservative crossover (MPX) と呼ばれる交叉法を提案した [18]. この MPX を利用した GLS の有効性を確認するために, Ulder らは GLS の局所探索法に Lin-Kernighan アルゴリズムを組み込むことで, simulated annealing などの解法よりも優れた解が得られることを示した [21]. 更に Gorges-Schleuter は, MPX と局所探索法を施した GLS の並列処理を検討した [19]. この並列 GLS は, 以前提案されていた Asparagos の改良版で Asparagos96 と呼ばれ, 突然変異に double-bridge 技法が使用されている. Asparagos96 の性能はあまり強力ではない局所探索法を使用しているにもかかわらず, 比較的良好な結果が得られている.

更に GA に関する最近の研究報告から, Freisleben と Merz は, 交叉法に distance preserving crossover (DPX), 局所探索法に LK 法を有した GLS の枠組みを利用し, 突然変異に double-bridge 技法を導入することで, 今までに報告されていた TSP に対する他のアプローチ性能を上回る極めて優れた結果を報告した [3, 4]. なお, 彼らの GLS は, 交叉確率を 0, 突然変異確率を 1 にする場合には, ILK とほぼ同等の実装になることも言及されている. つまり, 彼らの GLS で得られた結果は, 使用した DPX が大きな効果をもたらしたと解釈できる. 同様に, Nagata と Kobayashi も優れた結果を報告した [10]. 彼らは GA のみの枠組みを利用し, 強力な交叉法として, edge assembly crossover (EAX) を提案した. EAX ではヒューリスティックな方法を導入しているが, 得られる解は Freisleben らの GLS で算出される解とほぼ同程度であり, 大規模な問題例に対しても高い頻度で最適解を算出可能である.

TSP に対するこれらの解法のほとんどは, 極めて優れた解を算出することに成功している. これは, TSP に対して優れた局所探索法を使用すると共に, TSP と TSP を解くための局所探索法に関して, 実験的または経験的に得られた知識をアルゴリズム中に取り入れているためと考えられる. Mühlenbein は, GLS において, 2-Opt 法で導かれた良好な解に存在する各点の枝は, 2-Opt 法で導かれた他の良好な解に存在する枝に類似した枝が多く含まれることを観測した. つまり, これらの二つの解を組み合わせることで, 更に良い解を得る可能性が増大することを示唆している. 従って, 彼の提案した交叉法 MPX は, この種の観測を利用して子孫を生成するので, GLS においてうまく動作すると文献 [18] において結んでいる. また, Boese らは TSP の局所解に関する観測を行なった (詳細については文献 [8, 20] を参照).

3 GILS : 遺伝的反復局所探索法

従来の ILS では、局所探索法によって得られた局所解からの脱出法として、double-bridge 技法を利用した。一方、GILS (遺伝的反復局所探索法) では交叉法に類似した方法を利用している。この方法を遺伝的変換 (Genetic Transformation, GT) と呼ぶ。

GILS では、さまざまな交叉法を利用することは本質的に可能である。しかしながら、一点交叉や二点交叉などといった交叉法を使用する場合には、ランダム探索的な ILS しか実現できないと考えられる。つまり、交叉法を利用する前提には、Mühlenbein [18] や Boese [8] が報告した知識を何らかの形で利用した交叉法の使用が賢明であると考ええる。従って、GILS で利用される GT では、更に高性能な処理を施す必要がある。その処理について考察する。二つの近似解が与えられた時、その解は子孫に遺伝すべき何らかの情報を含んでいる。TSP では、共通の枝やサブツアに相当する。これらを利用した交叉法は、TSP に対して良好な結果が得られている。

Freisleben と Merz によって開発された “distance preserving crossover” (DPX) [3] は、片山らによって提案された、complete subtour exchange crossover (CSEX) [12, 13] に類似している。DPX と CSEX の最も大きな類似点は、方向性の全く同じサブツア (完全サブツア [13]) を利用して子孫を生成する点である。文献 [12, 13] によれば、CSEX を使用する場合、利用する完全サブツアの数に関して注意が必要であると言及されている。つまり、CSEX では二つの解を利用して子孫を生成するが、その二つの解が全く異なる場合 (つまり、ランダムに生成された解)、または非常に良く似た解の場合には、完全サブツアが全く存在しないか、または、その数が極めて少なくなるということを報告している。また、DPX を開発した Freisleben らも、片山らと類似の見解を簡単に記述している [3]。従って、我々はこの完全サブツアをベースに GT を構築する。また、確実に完全サブツアの数を確認するため、二つの解 (現在までに算出された最良解と局所探索法によって算出された現在の解) の片方の解に対してランダムに 4 つの枝を入れ替える、ランダム 4-change を適用する。

次に GILS の流れを示す。

Genetic Iterated Local Search

- 1 Generate two different solutions S and T (locally optimized by a local search algorithm).
- 2 Do the following for a given number of iterations.
 - 2.1 Perform $GT(S, T)$, obtaining T' .
 - 2.2 Run a local search on T' , obtaining T'' .
 - 2.3 If $Cost(T'') < Cost(T)$, then set $T = T''$, and set $S = T''$.
- 3 Return T .

次に GILS の Step 2.1 における GT 関数の流れを示す。

Function $GT(S, T)$

- 1 Perform a random 4-change move on S , obtaining S' .
- 2 Enumerate all complete subtours on two solutions, S' and T .
- 3 Choose a starting city i randomly from the city on either side of each subtour or other cities not contained in these subtours.
- 4 Do the following until a new different solution T' is generated.
 - 4.1 Make a candidate-list except for used cities and subtours.
 - 4.2 Find the nearest candidate city j to i .

表 1: Best, average, and worst percentage excess over the optimal tour distance for the random multi-start local search (MSLS) with 2-Opt heuristic after 100, 500, and 1000 iterations, respectively.

MSLS	100			500			1000		
	best	avg. (s.d.)	worst	best	avg. (s.d.)	worst	best	avg. (s.d.)	worst
kroA100	1.081	1.788 (0.604)	2.871	0.474	1.259 (0.357)	1.874	0.474	1.009 (0.367)	1.564
lin318	4.684	5.962 (0.604)	6.679	4.684	5.162 (0.420)	6.024	4.487	4.886 (0.354)	5.677
att532	6.249	7.404 (0.626)	8.578	6.231	6.791 (0.427)	7.448	6.231	6.582 (0.245)	7.050

表 2: Best, average, and worst percentage excess over the optimal tour distance for the iterated local search (ILS) with 2-Opt heuristic after 100, 500, and 1000 iterations, respectively.

ILS	100			500			1000		
	best	avg. (s.d.)	worst	best	avg. (s.d.)	worst	best	avg. (s.d.)	worst
kroA100	0.066	0.863 (0.644)	2.481	0.000	0.155 (0.146)	0.348	0.000	0.119 (0.148)	0.348
lin318	3.103	4.434 (0.782)	5.663	1.359	2.318 (0.654)	3.766	0.959	1.804 (0.494)	2.470
att532	4.562	5.107 (0.434)	5.764	3.424	4.094 (0.652)	5.764	2.810	3.424 (0.522)	4.533

4.3 Connect city j to i , and set $i = j$. (if city j is from either side of a subtour, connect the subtour to i , and set $i =$ the city on the other side of the subtour.)

5 Return T' .

GT 関数の Step 1 において、文献 [13] で示された $O(n)$ 時間で二つの解に含まれる完全サブツアを列挙するアルゴリズムを利用する。Step 2 では、ランダムにある点を選び、Step 3 からは Step 1 で列挙された完全サブツアと列挙されなかった他の点とを貪欲的につなぎ合わせ、実行可能な解（子孫）を生成する。

4 実験結果

GILS の有効性を明らかにするために、TSP のベンチマーク問題集 TSPLIB95 [11] の問題例に対して数値実験を行なう。GILS 内部で使用する局所探索法は 2-Opt 法と LK 法とし、両法を使用する GILS の結果をそれぞれ示す。

まず、TSP において最も古典的な局所探索法である 2-Opt 法を GILS に施した。GILS の有効性を示すために、ランダム多点局所探索法 (MSLS) と従来の ILS との比較を行なう。表 1, 表 2, 表 3 は、各問題例に対して 10 回の試行を行った、MSLS, ILS, GILS の結果である [15]。これらの表では、2-Opt 法の繰り返し回数が 100 回、500 回、1000 回の時点での結果をそれぞれ示している。なお、2-Opt 法をベースにした遺伝的アルゴリズムや simulated annealing 法との比較において、我々の 2-Opt 法ベースの GILS は短時間に良好な解が算出可能であることを確認している [15]。

次に、LK 法を有した GILS の結果を表 4 に示す。この表では更に大規模な問題例までを対象にした。なお、結果として示す繰り返し回数は、Johnson らの実施要領 [1] を参考に、 $n/10$, $n/10^{0.5}$, 問題サイズ分 n までとし、試行回数はそれぞれの問題例に対して 10 回行った。計算時間は平均値 (秒) を示した。この結果から 2-Opt 法を有した GILS より少ない繰り返し回数で更に良好な解が算出可能であることが確認された。よって、GILS によって得られる解の質は、GILS に使用する局所探索法の性能によって大きく依存することが明らかになった。

表 3: Best, average, and worst percentage excess over the optimal tour distance for the genetic iterated local search (GILS) with 2-Opt heuristic after 100, 500, and 1000 iterations, respectively.

GILS	100			500			1000		
	best	avg. (s.d.)	worst	best	avg. (s.d.)	worst	best	avg. (s.d.)	worst
kroA100	0.000	0.519 (0.350)	1.386	0.000	0.053 (0.112)	0.348	0.000	0.005 (0.014)	0.047
lin318	1.575	2.799 (0.557)	3.738	0.838	1.572 (0.532)	2.524	0.638	1.261 (0.373)	1.844
att532	1.614	3.182 (0.801)	4.331	1.144	1.776 (0.340)	2.362	1.073	1.549 (0.405)	2.362

表 4: Best and average percentage excess over the optimal tour length for LK GILS after $n/10$, $n/10^{0.5}$, and n iterations.

kroA200 $n = 200$ Opt/10runs: 10				rat783 $n = 783$ Opt/10runs: 3			
iterations	best	average	time(s)	iterations	best	average	time(s)
$n/10$	0.000 (29368)	0.164 (29416.2)	1	$n/10$	0.045 (8810)	0.153 (8819.5)	13
$n/10^{0.5}$	0.000 (29368)	0.000 (29368.0)	4	$n/10^{0.5}$	0.023 (8808)	0.073 (8812.4)	37
n	0.000 (29368)	0.000 (29368.0)	10	n	0.000 (8806)	0.022 (8807.9)	103
lin318 $n = 318$ Opt/10runs: 8				pr2392 $n = 2392$ Opt/10runs: 3			
iterations	best	average	time(s)	iterations	best	average	time(s)
$n/10$	0.128 (42083)	0.410 (42201.4)	6	$n/10$	0.011 (378074)	0.051 (378226.0)	177
$n/10^{0.5}$	0.000 (42029)	0.162 (42096.9)	17	$n/10^{0.5}$	0.000 (378033)	0.016 (378093.9)	551
n	0.000 (42029)	0.057 (42053.0)	47	n	0.000 (378032)	0.006 (378054.1)	1635
att532 $n = 532$ Opt/10runs: 2				f13795 $n = 3795$ Opt/10runs: 0			
iterations	best	average	time(s)	iterations	best	average	time(s)
$n/10$	0.072 (27706)	0.223 (27747.6)	13	$n/10$	0.129 (28809)	0.341 (28870.1)	2658
$n/10^{0.5}$	0.025 (27693)	0.092 (27711.6)	40	$n/10^{0.5}$	0.028 (28780)	0.189 (28826.4)	8933
n	0.000 (27686)	0.056 (27701.5)	113	n	0.021 (28778)	0.091 (28798.2)	26958

近年の極めて強力な解法との比較を行なう。まず, Johnson らの iterated LK(ILK) は, 1990 年代前半以来, TSP に対して最も強力な一解法として知られる近似解法である [2]。文献 [1] での ILK の結果から, 我々の GILS の方が更に良好な解を算出していることが確認できる。しかしながら, 計算時間の比較では Johnson らの ILK の方が若干高速に処理されている。また, 高性能な遺伝的アルゴリズムとの比較として, Nagata らのアプローチを取り上げる [10]。彼らの提案した edge assembly crossover (EAX) を有する GA は, 極めて良好な結果が得られており, 大規模な問題例に対しても高い頻度で最適解を算出可能である。しかしながら, 計算時間の面では我々の GILS や Johnson らの ILK の方が高速である。また, LK 法と DPX を有した Freisleben らの遺伝的局所探索法との比較において, GILS は得られる解で若干劣るものの, 中規模程度の問題例までに対しては計算時間の面で高速に処理可能であった。次に, Möbius らは, Iterative partial transcription(IPT) を提案している [24]。彼らのアプローチは Brady の交叉法 [22] (類似法として Yamamura らの subtour exchange crossover [23] がある) を利用し, 局所探索法で得られた解に対して繰り返し適用するものである。TSP に対して報告されている結果によれば, Drilling タイプの問題例 (例えば f1 問題など) に対して特に高い頻度で最適解を算出可能である。なお, GILS の場合では, pr2392 などの問題例に対して, Möbius らのアプローチより極めて良好な結果が得られている。

以上の比較結果より, GILS は TSP に対して極めて強力なアプローチと十分に肩を並べられる有効な近似解法であることが確認された。

5 他の組合せ最適化問題への適用に関して

TSPに対する従来のILSでは、局所探索法の近傍操作に関する特性を考慮しているため、そのような近傍操作では実現不可能なdouble-bridge技法が採用された。一方、GILSの大きな特徴は遺伝的変換技法の利用にある。これは、double-bridge技法と同じ立場の操作であるが、問題固有の知識を利用した局所解からの脱出技法と考えられる。

遺伝的変換技法は、現時点で算出された一つの近似解 S_a と、今までに算出されていた最良の近似解（局所解） S_b を用いて、最良の局所解から変換された一つの新しい近似解を算出する。遺伝的変換技法の基本的な方針は、有望な探索空間への移動を考慮しつつ次の経験的推測によって成されている。

- S_a と S_b は、互いに共通する“部分情報”を含んでいる。
- S_a と S_b で共通する部分情報は、最適解を構成する部分情報と類似している。
- “問題固有の基本方針”を用いて、 S_a と S_b で共通する部分情報とそれを除く部分を再構成することが望ましい。

ここで言う、“問題固有の基本方針”とは、各最適化問題独自の目的関数を最大化もしくは最小化にする方針またはその操作を意味する。（つまり、TSPでは各都市の距離を最短化する方針。）さまざまな最適化問題に対するGTを実現するために、上述した“部分情報”と“問題特有の基本方針”を適切に決定することが重要であると考えられる。適用する問題、また解を表現するためのコーディング方法によって、上述した経験的推測が成り立たない場合があることも考慮する必要がある。なおGTでは、膨大な空間の探索を試みるのではなく、有望な領域のみをくまなく探索するために、現在の最良解のまわりに位置する解を生成する方針が取られるべきである。

よって、本論文で示した結果から、GTでは有望な探索空間の領域へと新たに生成された解が移動しているものと考えられることができる。つまり、その解をもとにして局所探索法を適用し更に良好な解を算出することが重要であることから、より良好な解が局所探索法によって算出されるかもしれない、探索空間に解を移動させるには、どのようにその解を再構成することが適切であるかを考慮する必要がある。これは、極めて困難な課題であると思われるが、GTはその一方向を示す解変換技法であることが確認できたと考えられる。従って、この課題は今後の最適化アプローチにおいて大変興味深い一方向であり、この課題を解決するためには、各最適化問題に対する深い洞察と知識が必要であることは言うまでもない。

6 むすび

本論文では、巡回セールスマン問題(TSP)に対して極めて有効とされるいくつかのアプローチを紹介すると共に、我々が以前提案した遺伝的反復局所探索法(GILS)に関して記述した。我々の実験結果から、遺伝的変換(GT)を局所解脱出技法として有したGILSアプローチは、他の優れた解法と同程度もしくはそれ以上の性能を有することを紹介した。今後は、他の組合せ最適化問題に対してGILSの適用を試みる予定である。

参考文献

- [1] D.S. Johnson and L.A. McGeoch, “The traveling salesman problem: A case study,” Local Search in Combinatorial Optimization, Wiley-Interscience Series in Discrete Mathematics and Optimization,

- pp.215–310, 1997.
- [2] D.S. Johnson, “Local optimization and the traveling salesman problem,” Proc. 17th. Colloquium on Automata, Languages, and Programming, pp.446–461, 1990.
 - [3] B. Freisleben and P. Merz, “New genetic local search operators for the traveling salesman problem,” Parallel Problem Solving from Nature IV, pp.890–899, 1996.
 - [4] P. Merz and B. Freisleben, “Genetic local search for the TSP: New results,” Proc. 1997 IEEE Int. Conf. on Evolutionary Computation, IEEE Press, pp.159–164, 1997.
 - [5] S. Lin and B.W. Kernighan, “An effective heuristic algorithm for the traveling salesman problem,” Operations Research, vol.21, pp.498–516, 1973.
 - [6] O. Martin, S.W. Otto, and W. Felten, “Large-step markov chains for the TSP incorporating local search heuristics,” Operations Research Letters, vol.11, pp.219–224, 1992.
 - [7] B. Codenotti, G. Manzini, L. Margara, and G. Resta, “Perturbation: An efficient technique for the solution of very large instances of the Euclidean TSP,” Technical Report TR-93-035, International Computer Science Institute, University of California at Berkeley, 1993.
 - [8] K.D. Boese, “Cost versus Distance in the traveling salesman problem,” Technical Report TR-950018, UCLA CS Department, 1995.
 - [9] I. Hong, A.B. Kahng, and B.-R. Moon, “Improved large-step markov chain variants for the symmetric TSP,” Journal of Heuristics, vol.3, no.1, pp.63–81, 1997.
 - [10] Y. Nagata and S. Kobayashi, “Edge assembly crossover : A high-power genetic algorithm for the traveling salesman problem,” Proc. 7th ICGA, pp.450–457, 1997.
 - [11] G. Reinelt, <http://www.iwr.uni-heidelberg/iwr/comopt/soft/TSPLIB95>
 - [12] K. Katayama, H. Sakamoto, and H. Narihisa, “An efficiency of hybrid mutation genetic algorithm for traveling salesman problem,” Proc. 2nd Australia-Japan Workshop on Stochastic Models in Engineering, Technique & Management, Gold Coast, Australia, pp.294–301, 1996.
 - [13] K. Katayama, H. Hirabayashi, and H. Narihisa, “Performance analysis of a new genetic crossover for the traveling salesman problem,” IEICE Trans. Fundamentals, vol.E81-A, no.5, pp.738–750, 1998.
 - [14] K. Katayama and H. Narihisa, “An iterated local search algorithm using genetic crossover,” 1998 Chugoku Sec. Conv. Rec. IEICE, Okayama, Japan, 1998.
 - [15] K. Katayama and H. Narihisa, “A new iterated local search algorithm using genetic crossover for the traveling salesman problem,” Proc. 1999 ACM Symp. on Applied Computing, San Antonio, USA, Feb.28 – Mar. 2, pp.302–306, 1999.
 - [16] K. Katayama and H. Narihisa, “New iterated local search algorithms using genetic transformation for the traveling salesman problem,” Tech. Rep. of IEICE, COMP98-80, 1999.
 - [17] K. Katayama and H. Narihisa, “Iterated local search approach using genetic transformation to the traveling salesman problem,” Proc. of the 1999 Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO-99), Jul.13–17, Orlando, Florida, USA, pp.321–328, 1999.
 - [18] H. Mühlenbein, “Evolution in time and space – the parallel genetic algorithm,” Foundations of Genetic Algorithms, (G. Rawlins, ed.), Morgan-Kaufmann, pp.316–337, 1991.
 - [19] M. Gorges-Schleuter, “Asparagos96 and the traveling salesman problem,” Proc. 4th International Conference on Evolutionary Computation, pp.171–174, 1997.
 - [20] K.D. Boese, A.B. Kahng, and S. Muddu, “A new adaptive multi-start technique for combinatorial global optimizations,” Operations Research Letters, vol.16, pp.101–113, 1994.
 - [21] N.L.J. Ulder, E.H.L. Aarts, H.J. Bandelt, P.J.M. Laarhoven and E. Pesch, “Genetic local search algorithms for the traveling salesman problem,” Parallel Problem Solving from Nature, (H. Schwefel and R. Männer, eds.), pp.109–116, 1990.
 - [22] R.M. Brady, “Optimization strategies gleaned from biological evolution,” Nature, vol.317, pp.804–806, 1985.
 - [23] M. Yamamura, I. Ono, and S. Kobayashi, “Emergent search on double circle TSPs using subtour exchange crossover,” Proc. 96 IEEE Int. Conf. on Evolutionary Computation, Nagoya, Japan, pp.535–540, 1996.
 - [24] A. Möbius, B. Freisleben, P. Merz and M. Schreiber, “Combinatorial optimization by iterative partial transcription,” taken from WWW page of third author, P. Merz, 1998.

Final-state hyperon-nucleon interaction in the inclusive K^+ photoproduction from the deuteron

K. Miyagawa

Department of Applied Physics

We calculate $d(\gamma, K^+)$ inclusive cross sections with the full inclusion of the final $\Lambda N - \Sigma N$ interaction. Modern hyperon-nucleon forces and a recently updated production operator for the $\gamma + N \rightarrow K^+ + Y$ process are used. Significant effects of the hyperon-nucleon final-state interaction have been found especially around the $K^+\Sigma N$ threshold.

1. INTRODUCTION

Recent analyses of few-baryon systems with strangeness have fairly clarified the property of the S wave $\Lambda N - \Sigma N$ interaction. Reference [1] shows the Nijmegen soft-core potential(NSC89)binds the hypertriton with the correct binding energy. One of the authors (K.M.) has found the recent soft-core model of the same group, NSC97f [2] also binds this system. One of the important features of these meson-theoretical interactions in the hypertriton is that the expectation values of $^1S_0 V_{\Lambda N, \Lambda N}$ and $^3S_1 - ^3D_1 V_{\Lambda N, \Sigma N}$, which dominate the V_{YN} value, are comparable, and hence the coupling to the Σ states is not negligible. The strengths of the 1S_0 and 3S_1 YN forces are restricted by both of the ΛN elastic total cross section data and the hypertriton binding energy. The scattering lengths of these potentials are thus within the values $-2.6 \sim -2.4$ fm for 1S_0 , and $-1.7 \sim -1.3$ fm for 3S_1 . We consider it is highly important to fix these values, which would have influence on hypernuclear bound states.

What is also significant for clarifying the YN interaction is to study the $\Lambda N - \Sigma N$ coupling around the Σ threshold, effects of which would emerge sharply. Miyagawa and Yamamura[3] have searched S -matrix poles for various ΛN - ΣN force models and have found a $^3S_1 - ^3D_1$ pole close to the ΣN threshold which is located at different unphysical sheets of the Riemann energy surface depending on the potentials used. This pole is expected to influence on various observables around the threshold, and thus theoretical and experimental efforts for detecting the effects are highly desirable.

The study of the reaction $\gamma + d \rightarrow K^+ + Y + N$ fits to these challenges mentioned above. The interactions of the photon and of the K^+ meson are comparatively weak, and it enables us to extract the feature of the YN interaction. Until now this reaction has been analyzed mainly to obtain the information of the elementary processes, and it has been done under the conditions where the final-state YN interaction is insignificant. Although we can find some pioneering work on the final-state interaction, they still remained using simplified YN forces.

We aim to examine recently developed meson-theoretical YN forces with the full inclusion of them in the final states around the $K^+\Lambda N$ and $K^+\Sigma N$ thresholds. We have finished the calculations for the $d(\gamma, K^+)$ inclusive reaction and present the results in this paper. We use the NSC97f and NSC89 YN potentials, and for the elementary processes $\gamma + p \rightarrow K^+ + \Lambda(\Sigma^0)$ and $\gamma + n \rightarrow K^+ + \Sigma^-$, the operator which has recently been updated

by Bennhold and Mart[4].

2. INCLUSIVE CROSS SECTION

The inclusive cross section for the process $\gamma + d \rightarrow K^+ + Y + N$ is given as

$$d\sigma = \frac{1}{6} \sum_Y \sum_{\mu_d \varepsilon \mu_Y \mu_N \nu_Y \nu_N} \frac{(2\pi)^3}{4E_K E_\gamma} \int \frac{d\mathbf{p}_K}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_Y}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{p}_N}{(2\pi)^3} \times \left| \sqrt{2} < \Psi_{\mathbf{q}_Y \mu_Y \nu_Y \mu_N \nu_N}^{(-)} | t_{\gamma K}(1) | \Psi_d \mu_d > \right|^2 \times (2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_d + Q - P_Y - P_N) \quad (1)$$

where the μ 's and ν 's are spin and isospin magnetic quantum numbers and ε denotes the two photon polarizations. The states Ψ refer to the two baryons only and $\mathbf{q}_Y$ is the (nonrelativistic) relative momentum of the final hyperon and nucleon. The sum over Y refers to Λ and Σ channels. The dependencies on the K^+ and photon parameters aside from the normalization factors explicitly shown are absorbed into the elementary operator $t_{\gamma K}$ which describes the $\gamma + p \rightarrow K^+ + \Lambda(\Sigma^0)$ and $\gamma + n \rightarrow K^+ + \Sigma^-$ processes. We also introduce the momentum transfer $Q = p_\gamma - p_K$. The factor $\sqrt{2}$ comes from proper antisymmetrization and the argument 1 in $t_{\gamma K}$ indicates that it acts only on particle 1, which in the final state is the hyperon. This form (1) can be easily derived via Feynman rules but using (inconsistently) nonrelativistic two-baryon wavefunctions.

The elementary operator is kept in a relativistic form. We also like to treat the kinematics relativistically, and supply the expression (1) with the factor $\frac{M_Y}{E_Y} \frac{M_N}{E_N}$ which guarantees the invariance of the volume elements but was missing in Eq. (1) because of the nonrelativistic approximation. Though this is inconsistent in relation to the nonrelativistic wave functions it might be a step in the right direction.

We work throughout in the total momentum zero frame of the final two baryons, and then the integrations in Eq. (1) can be easily carried out with the result

$$\frac{d\sigma}{dp_K d\Omega_K} = \frac{p_K^2 M_Y M_N}{4E_\gamma E_K W (2\pi)^2} \sum_Y |\mathbf{q}_Y| \times \frac{1}{6} \sum_{\mu_d \varepsilon \mu_Y \mu_N \nu_Y \nu_N} \int d\hat{q}_Y \left| \sqrt{2} < \Psi_{\mathbf{q}_Y \mu_Y \nu_Y \mu_N \nu_N}^{(-)} | t_{\gamma K}(1) | \Psi_d \mu_d > \right|^2 \quad (2)$$

where $W^2 = (P_d + Q)^2$. The nuclear matrix element can be rewritten conveniently by applying the Möller wave operator generating the final scattering state to the right. One obtains

$$\begin{aligned} < \Psi_{\mathbf{q}_Y \mu_Y \nu_Y \mu_N \nu_N}^{(-)} | t_{\gamma K}(1) | \Phi_d \mu_d > &= < \mathbf{q}_Y \mu_Y \nu_Y \mu_N \nu_N | (1 + tG_0) t_{\gamma K}(1) | \Psi_d \mu_d > \\ &\equiv < \mathbf{q}_Y \mu_Y \nu_Y \mu_N \nu_N | T | \Psi_d \mu_d > \end{aligned} \quad (3)$$

Since we allow for $\Lambda - \Sigma$ conversion the state $< \Psi_{\mathbf{q}_Y \mu_Y \nu_Y \mu_N \nu_N}^{(-)} |$ is a row with a Λ and a Σ component. Similarly the free state $< \mathbf{q}_Y \mu_Y \nu_Y \mu_N \nu_N |$ has two components ($< \mathbf{q}_\Lambda \mu_\Lambda \nu_\Lambda \mu_N \nu_N |$, 0) for $Y = \Lambda$ and (0, $< \mathbf{q}_\Sigma \mu_\Sigma \nu_\Sigma \mu_N \nu_N |$) for $Y = \Sigma$. The operators t and G_0 occurring in Eq. (3) are 2×2 matrices acting on Λ and Σ components. The operators $t_{\gamma K}$ and T convert a nucleon into a hyperon and are therefore two-component columns in Λ and Σ space.

Obviously the components of T obey the coupled set of integral equations

$$T_Y |\Psi_{d\mu_d}\rangle = t_{\gamma K}^Y(1) |\Psi_{d\mu_d}\rangle + \sum_{Y'} V_{Y,Y'} G_0^{Y'} T_{Y'} |\Psi_{d\mu_d}\rangle \quad (4)$$

We solve this set, Eq. (4), partial wave decomposed in momentum space and on isospin basis. The three elementary processes $\gamma + p \rightarrow K^+ + \Lambda(\Sigma^0)$ and $\gamma + n \rightarrow K^+ + \Sigma^-$ are properly incorporated in the driving terms in Eq. (4). As for the $t_{\gamma K}$ operator, we use the one developed by Bennhold and Mart, for which we refer the readers to [4].

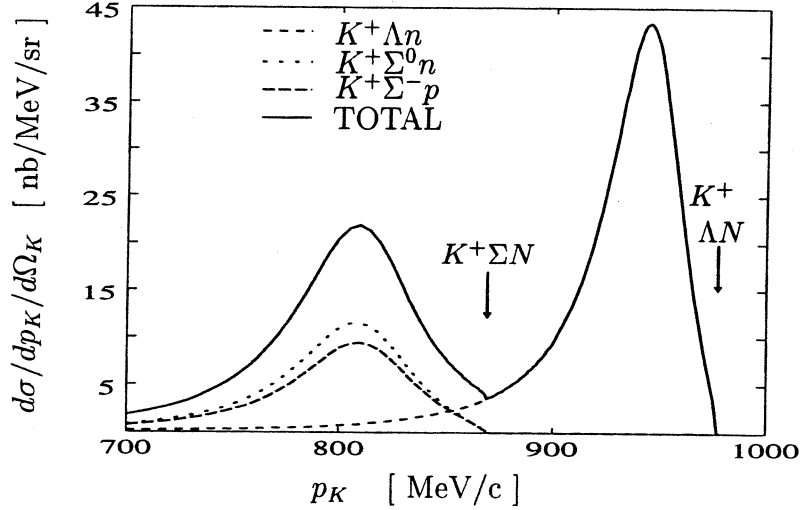


Figure 1. The inclusive $d(\gamma, K^+)$ cross section in the plane wave approximation as a function of lab momentum p_K for $\theta_K = 0^\circ$ and photon lab energy $E_\gamma = 1.3$ GeV. The additive contribution for the $K^+\Lambda n$, $K^+\Sigma^0 n$ and $K^+\Sigma^- p$ processes are shown separately and summed up. The thresholds $K^+\Lambda N$ and $K^+\Sigma N$ are indicated by the arrows.

3. RESULTS

In Fig. 1, first we show the results of the plane wave approximation. The inclusive cross section is formed additively by the contribution of the $K^+\Lambda n$, $K^+\Sigma^0 n$ and $K^+\Sigma^- p$ processes. Above the $K^+\Sigma N$ threshold the Λn contribution rapidly decreases and the two parts of $\Sigma^0 n$ and $\Sigma^- p$ contribute equally. In Fig. 2 the predictions by the two YN forces, NSC89 and NS97f are compared to the plane wave calculation. The deviations from the plane wave result are pronounced around the two threshold as well as on the tops of the two peaks. The final state interaction near the $K^+\Lambda N$ threshold enhances the cross section by up to 70%. Around the $K^+\Sigma N$ threshold the effects are significant. While NSC89 only lifts the cross section, NSC97f leads to a much stronger effect with a prominent cusp-like structure. As worked in [3] this can be traced back to the location of

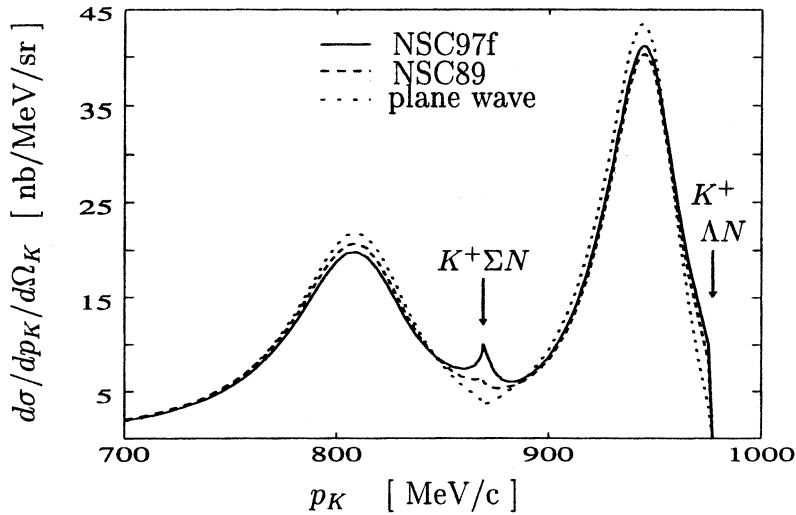


Figure 2. The inclusive $d(\gamma, K^+)$ cross section as a function of lab momentum p_K for $\theta_K = 0^\circ$ and photon lab energy $E_\gamma = 1.3$ GeV. The plane wave result is compared to YN force predictions. The FSI effects are especially pronounced near the $K^+\Lambda N$ and $K^+\Sigma N$ thresholds. The two thresholds $K^+\Lambda N$ and $K^+\Sigma N$ are indicated by the arrows.

a S -matrix pole for the $\Lambda N - \Sigma N$ system around the ΣN threshold. The pole for NSC97f is located in the second quadrant of the complex plane of the ΣN relative momentum and closer to the threshold than the pole for NSC89, which is responsible for this structure.

ACKNOWLEDGEMENT

We would like to thank T.Mart and C.Bennhold for giving us their recently updated operator for the $\gamma + p \rightarrow K^+ + \Lambda(\Sigma^0)$ and $\gamma + n \rightarrow K^+ + \Sigma^-$ processes.

REFERENCES

1. K. Miyagawa, H. Kamada, W. Glöckle and V.Stoks, Phys. Rev. C51 (1995) 2905; W. Glöckle et al., Nucl. Phys. A639 (1998) 297c.
2. Th.A. Rijken, V.G.J. Stoks and Y. Yamamoto, Phys. Rev. C59 (1999) 21.
3. K. Miyagawa and H. Yamamura, submitted for publication.
4. C. Bennhold, T. Mart, D. Kusno *in* N^* Physics, eds. T.-S.H. Lee and W. Roberts (Word Scientific 1997), p166; T.Mart, Ph.D Thesis, Universität Mainz, 1996.

注入イオン分布の分散比の質量比・速度依存性

波田恭宏、中川幸子

Yasuhiro HADA, Sachiko T. NAKAGAWA

岡山理科大学大学院理学研究科応用物理学専攻

Graduate School of Science, Okayama University of Science

Abstract デバイスサイズが小さくなるにつれ、結晶ターゲットへのイオン注入において高線量下での横方向分布を慎重に取り扱わなければならない。マクロな横分散、 ΔR_L 、とマクロな縦分散、 ΔR_p 、の分散比、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ 、は幾何学的には楕円の偏平率に相当していると考えればよい。つまり、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ を予測することによりイオン分布の粗い形状を知ることが出来る。我々は(100)面をもつダイヤモンド構造のターゲット、Si、Ge、Cのケースにおいて、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ を衝突系の質量比、 $\mu(=m_2/m_1)$ 、の関数として得ることが出来た。本研究では省略するが $\Delta R_L/\Delta R_p$ は顕著な入射角依存性を示し、我々は応用的観点からランダム入射の場合を重視する。ランダム入射の場合に得ることができた $\Delta R_L/\Delta R_p$ の関数表現から、 ΔR_L と ΔR_p の相対的な大きさについて議論する。

1.はじめに

最近の電子デバイスの技術の焦点は、より浅い接合(shallow-junction)の製作にある。それに関して、2つの精密な解析が期待されている。1). より精密な横拡がりをどのようにして見積もるか。2). 形成されたチャネルのサイズが小さくなったとき、再分布が起こるのをどのように抑えるかである。ここでは、前者の問題について議論することにする。

普通、3次元のイオン分布は分布の拡がりを与える2種のモーメントで調べられる。それは、縦方向と横方向のレンジパラメーターである。縦方向のレンジパラメーターの決定は信頼できる手法がすでに確定している。例えば、実験的観点から絞ったイオンビームを用いるSIMSとRBSである[1]。理論的観点からLSS[2]、加えて、コンピュータシミュレーションの観点からMARLOWE[3]とTRIM[4]である。しかし、横方向のレンジパラメーターの概算にいたっては、わずかしき測定を行ったものがない[5]。

我々はコンピュータシミュレーションを用い、高線量における結晶ターゲット中のイオン分布を3次元で表わそうとしてきた[6]。3次元のイオン分布を正確に再現するにはミクロな横分散、 $\Delta R_L(z)$ 、は欠くことが出来ない。また、マクロな横分散、 ΔR_L 、も重要である。 $\Delta R_L(z)$ はコンピュータシミュレーションによってのみ決定され、結晶表面に平行に切り出したスラブ内に飛散したイオンの、スラブを通るビームラインを中心とし、そこからのズレで、深さの関数として同定した[7]。線形近似[8]を用いたコンピュータシミュレーションではイオンを固体内に無制限に入れることは可能である。しかし、現実には、固体は不純物濃度の限界値があるため、有限な体積のなかにイオンを無制限に入れることは出来ない。そこで、

TRIDYN[9]の助けを借りてマクロな縦分散、 ΔR_p 、に現れる高線量効果をイオンの入射エネルギー、 E_0 、とイオンの線量、 $\Phi[\text{ions/cm}^2]$ 、の関数として決定し、3次元のイオン分布に重照射効果を取り入れる方法を提案した[10]。TRIDYN自体は深さ方向の1次元情報しか持っていないので、縦方向の情報を横方向の情報へ変換してやる必要がある。変換の過程において、分散比、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ 、の質量比、 $\mu(=m_2/m_1)$ 、依存性と速度、 v 、依存性を慎重に取り扱ってやる必要があった。

$\Delta R_L/\Delta R_p$ はイオンの3次元分布の形状を粗く記述している。結晶ターゲットの場合、イオン分布は E_0 、 μ 、傾角(tilt angle)、 θ 、に依存している。一般にアモルファスタargetの場合、軽イオン($\mu>1$)では、 $\Delta R_L/\Delta R_p>1$ の分布をし、重イオン($\mu<1$)では $\Delta R_L/\Delta R_p<1$ の分布をするといわれている。実際に、中低エネルギーにおいてのLSS理論を用いた石原先生らの予測では[11]、軽イオンでは、 $\Delta R_L/\Delta R_p>1$ の分布をし、重イオンでは $\Delta R_L/\Delta R_p<1$ の分布をしており、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ の値は v とともに増加している。

ところが、現在に至るまで結晶ターゲットの場合、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ の関係は議論されてこなかった。我々は、ダイヤモンド構造で、Si(100)、C(100)、Ge(100)ターゲットの場合の、様々な衝突系について研究を行った。まず、第2章において、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ の μ -依存性と v -依存性について述べ、第3章において ΔR_L と ΔR_p の大小関係を与える v と μ の関係について述べる。第4章において本研究の結果を要約する。

2. $\Delta R_L/\Delta R_p$ の速度依存性と質量比依存性

2.1 シミュレーション条件

シミュレーションでは、ターゲットはダイヤモンド構造で、Si、C、とGeで、それらの(100)面に対してのイオン注入であり、本研究では、ランダム入射($\theta=7^\circ$)の場合のみについて熟考することにした。入射イオンは μ が0.1～10になるように選んだ。面チャネリングを避けるために回転角(twist angle) $\phi=23.5^\circ$ と固定し、 θ を変化させていった[7]。ここで、イオンビームのangular divergenceは 0.01° とし、ターゲットの温度は室温であると仮定している。

2.2 速度の中間領域

速度領域はPRAL[12]の予測を参考にした。それによると、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ のエネルギー依存は3つの領域I、II、IIIに分かれる[13]。この、領域の分割は阻止能の振る舞いに関係している。中間領域では核的阻止能、 S_n 、は最大値から最小値へ向かってただ減少をしていき、電子的阻止能、 S_e 、は最小値から最大値へと向かって増加している。我々は、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ の値が増加の傾向にある、領域IIに焦点をあてることにした。領域IIは v が原子単位(v_B)で0.1～3である。

2.3 衝突系における $\Delta R_L/\Delta R_p$ の速度依存性

ランダム入射の場合、衝突系をかえていったとき、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ は、同じ v において、系の質量比が小さくなるに応じ、その絶対値が一様に落ちてきており、なおかつ、同じ μ において、 v が増加するに連れて、その傾きが大きくなることがわかった。そして、各々の衝突系において $\Delta R_L/\Delta R_p$ を速度に関してのべき関数で纏められることが分かった[14]。

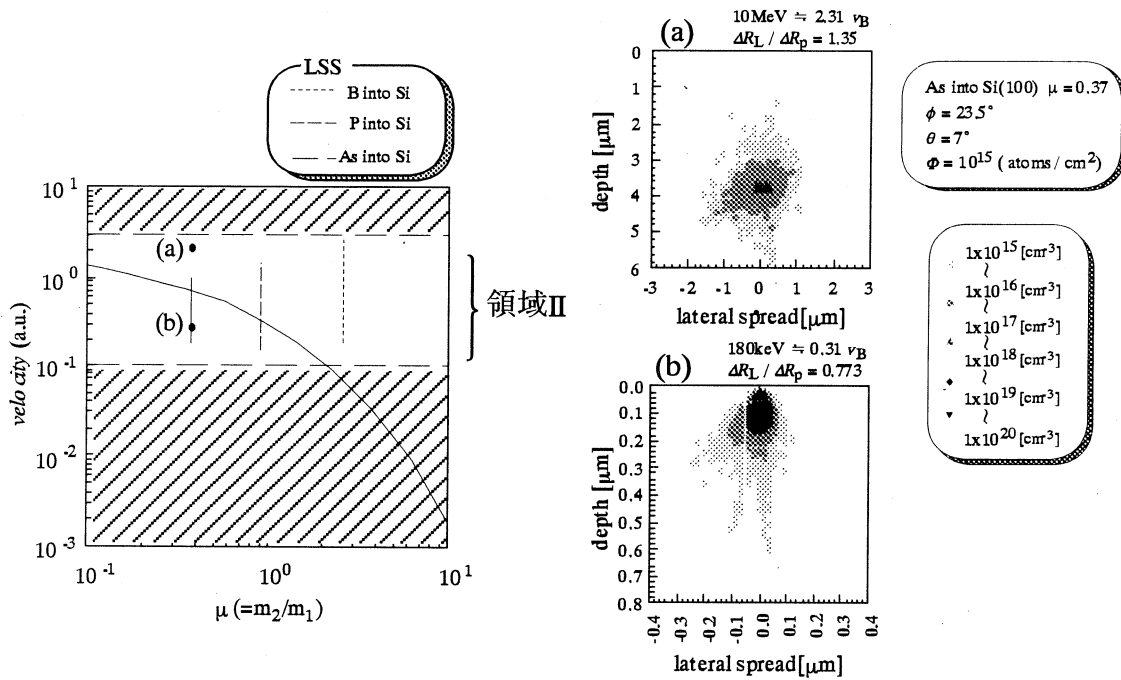


図1.

ΔR_L と ΔR_P の大きさの逆転を与える質量と速度の関係
図の中の3本の垂直な線分はLSSで予測する、 ΔR_L と ΔR_P が議論されている速度領域を示す。カーブは我々が示す、 ΔR_L と ΔR_P の大小関係が逆転する条件を与える v と μ の関係である。(a)、(b)は図2と対応している。

図2.

等濃度分布図

$\mu=0.37$ (As into Si(100))のとき、 $2.31v_B$ (=10MeV)と $0.31v_B$ (=180keV)のそれぞれで注入したときのビームラインに沿った縦断面での注入イオンの等濃度分布図を示す。

$$\Delta R_L / \Delta R_P = A(\mu) \times v^{B(\mu)} \quad (1)$$

$$A(\mu) = 1.39 \times \mu^{0.207}, B(\mu) = 0.261 \times \mu^{-0.306}$$

べき関数の係数を μ の関数として纏めることによって、ターゲットの違いを整理できた。これで、様々な衝突系での結果を予測することが可能なる。

3. ΔR_L と ΔR_P の大きさの逆転

さて、(1)式は見方を変えれば、分散比が1をはさんで変化する、 ΔR_L と ΔR_P の大きさが逆転をするような μ と v の関係を与える。図1のカーブがその境目を表わし、曲線そのものは分散比が1を示す。図1の黒丸で示した(a)、(b)は図2のそれらと対応している。領域II以外では我々の計算が保証されないの斜線を引いている。今まで、LSS理論を基にした予測でいえた話は、図1で示す異なった3つの垂直な線分の μ の値に対してであり、それぞれの線分の長さはそれがいえる速度領域を示す[11]。重イオン($\mu < 1$)の時、大体において我々が見出した曲線の下部に位置しており、また、軽イオン($\mu > 1$)の時、上部に位置している。ここで、我々が結晶の場合に見出した式(1)の分散比と μ と v の関係は、すなわち、結晶ターゲットについて予測するイオン分布の形状というのは、LSSの予測する ΔR_L と ΔR_P の大小関係と大きく異なる訳ではない。しかし、重要なことは、この曲線が分散比が1を超えるかどうかは、LSS理論が指摘する μ だけではなく、 v によっても決まるということである。

いままでは、分散比という物理量1つを見てきたが、実際にシミュレーション結果がどうなっているかを図2に示した。(a)、(b)は図1中の (μ, ν) の場合に対応し、同じ $\mu=0.37(\text{As into Si}(100))$ という $\mu<1$ の場合に速度の異なる2つの場合を見ている。(a)、(b)は、それぞれ、 $\nu=2.31\nu_B(10\text{MeV})$ の場合と $\nu=0.31\nu_B(180\text{keV})$ の場合を示している。 $\mu<1$ のときの $\Delta R_L/\Delta R_p$ の値が μ と同様に ν も重要なことを示したもので、 $\mu<1$ の時であっても実際のシミュレーション結果では分散比の値が示す様に $2.31\nu_B$ の場合は横長の分布をもち、 $0.31\nu_B$ の場合は縦長の分布をもつことが確かめられる。その時の分散比の値は、 $2.31\nu_B$ の時が $\Delta R_L/\Delta R_p$ は1.35であり、 $0.31\nu_B$ の時は、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ は0.773となっている。つまり、領域IIにおいて、同じ衝突系であっても ν が変化した場合、 ΔR_L と ΔR_p の大きさは逆転することがあることを意味している。

4. 結論

我々は分散比、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ 、の質量比依存性と速度依存性を研究した。C、Si、Geターゲットのダイヤモンド構造をもつ物質に限ってシミュレーションを行った。エネルギー領域は中間領域とし、イオン速度、 ν 、が0.1~3である。衝突系は質量比、 $\mu(=m_2/m_1)$ 、を0.1~10になるように入射イオンを選んだ。分散比は ν に関してのべき関数で表現でき、その係数は μ の関数として表現できる。分散比は μ と ν に関する関数として纏められる。つまり、中間領域では電子的阻止能、 S_e 、と核的阻止能、 S_n 、が競合的なので、 $\Delta R_L/\Delta R_p$ が1より大きい小さいかはLSS理論で予測されるような μ が1より大きい小さいだけでなく、 ν も重要な要因であることを意味している。

5. 参考文献

- [1] M.Takai, Y.Katayama, A.Kinomura, T.Lohner, S.Namba, and H.Ryssel
: High-speed data processing for three-dimensional analysis by micro-RBS,
Nucl.Instr.Meth. B **64** (1992),277-281.
- [2] J. Lindhard, M. Scharff, and H.E. Schiøtt
: Range concepts and heavy ion ranges,
Kgl. Danske. Videnskab. Selskab. Mat-Fys.Medd. **33**, no.14 (1963).
- [3] M.T. Robinson and I.M. Torrens
: Computer simulation of atomic-displacement cascades in solids in the binary-collision,
Phys.Rev.B **9** (1974), 5008-5024.
- [4] J.P. Biersack and L.G. Hagmark
: A monte carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous target,
Nucl.Instr.Meth. **174**, 257 (1980), 257-269.
- [5] E. Rimini, "Adv.Mat '93, IV, Laser and Ion Beam Modification of Materials "
(I.Yamada et al. eds.), pp. 41- 46. Elsevier, Amsterdam. (1994).
- [6] S.T.Nakagawa, Materials Chemistry & Physics, **54/1-3**, 28 (1998).
- [7] S.T.Nakagawa, H.Saito, L.Thomé and C.Clerc
: The two-dimensional profiling of light ions crystal,
Nucl.Instr. Meth.B **127/128** (1997), 248-251.

- [8] S.T.Nakagawa, "Effect of Disorder and Defects in Ion-Implanted Semiconductors, "
Chapter 3, (Academic Press, Boston,1997).
- [9] W.Eckstein, "Computer Simulation of Ion-Solid interactions,"
(Springer-Verlag, Berlin, 1991).
- [10] S.T.Nakagawa
: The influence of accumulated defects on the lateral spread of implanted ions,
Mat. Sci. Forum, **258-263** (1998), 641-646.
- [11] 石原宏、古川静二郎
: 注入イオン分布と関連現象、応用物理、 **44** (1975), 700-712.
- [12] J.Biersack : New Projected Range Algorithm as Derived from Transport Equations,
Z.Phys.A **305** (1982), 95-101 .
- [13] S.T.Nakagawa, Y.Hada, L.Thomé
: Crystalline effect on the lateral spread of implanted ions,
Nucl. Instr. Meth.B in press (1999).
- [14] S.T.Nakagawa
: The correlation between the range straggling and energy straggling at intermeditate energy
region, Nucl.Instr. Meth.B**153**, 446-451 (1999).

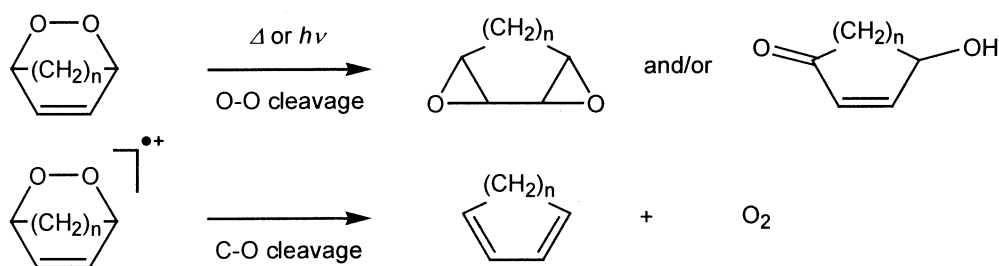
分子軌道法を用いた環状過酸化物の反応性考察

化学科 若松 寛

Quantum chemical calculation (B3LYP/6-31G*) reveals that the cation radicals of bicyclic endoperoxides derived from cyclic 1,3-dienes have shorter O—O distance and longer C—O distance than the corresponding neutral molecules. Especially in the case of the endoperoxides having phenyl group(s) on the C—O bond(s), charge and spin are delocalized between π orbitals of the benzene rings and σ orbital(s) of the C—O bond(s), resulting in reduction of energy barrier for the C—O bond cleavage.

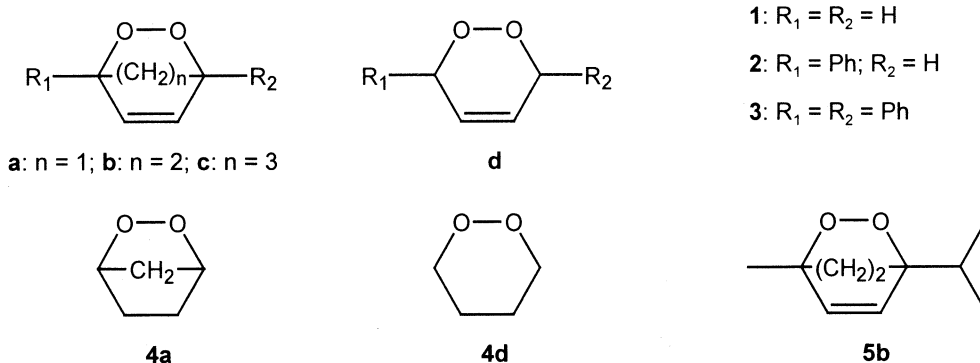
1. はじめに

1,3-ジエンまたは芳香族化合物の環状過酸化物であるエンドペルオキシド類は、加熱または光励起により容易にO—O結合あるいはC—O結合の開裂を起こすことが知られている [1]。一般に、1,3-ジエンのエンドペルオキシドではO—O結合開裂が優先しジエポキシドやケトアルコールを生成するが、これらを光化学的に一電子酸化して生成するカチオンラジカルでは選択的にC—O結合開裂のみが起こることが報告されている [2]。さらに、アリール置換基の有無と反応性の相関や、O—O結合回りのねじれ角と反応性の相関など、エンドペルオキシドのカチオンラジカルの反応には興味深い点が多々存在する。今回は、この中性分子とカチオンラジカルの反応性の差異を検討する目的で分子軌道計算を行ったので以下に報告する。



2. 計算方法

従来、水素以外の原子を10個程度以上含むような、我々が通常研究対象にする有機分子の分子軌道計算には、計算時間やコストの点から半経験的分子軌道法が使用されてきた。代表的なものとしてMOPACパッケージ [3] に含まれるAM1法やPM3法が挙げられ、多くの系でその実用性が実証されている [4]。しかしながら、過酸化物の場合にはこれらを使用した計算結果と実験値の一致は必ずしも良くない。Table 1に一例を示したが、AM1とPM3とも酸素間結合距離の実験値（標準値）との一致は悪く、しかもこの2つの方法の誤差の方向は互いに反対になっている。このことは、いずれの方法でも酸素上の非共有電子対間の反発



を正しく評価しておらず、過酸化物に関しては計算結果の信頼性が低いことを示している。

一方、ここ数年計算機の性能が格段に向上し、中程度サイズの分子に対しても *ab initio* (非経験的) 分子軌道法が適用できるようになった。今回の計算では, Paragon, Windows, Macintosh 上の GAMESS [5] および Windows 上の Gaussian 98 [6] の両プログラムを使用し, *ab initio* 法並びに密度汎関数法 (B3LYP) により研究を行った。

3. 電荷移動錯体光励起反応 [2]

今回のエンドペルオキシドとテトラシアノエチレン (TCNE) をジクロロメタン中に混合すると電荷移動錯体を形成し紫外～可視領域に対応する吸収帯が現れる。一般に電荷移動吸収帯を選択的に励起すると錯体内でほぼ完全な一電子移動が起こり, *contact ion pair* を形成することが知られている [7]。フェニル基が置換した二環性エンドペルオキシド (**3a-c**) では光励起により速やかに酸素を脱離するのに対し, 単環性の **3d** では C-O 結合開裂を全く起こさなかった。また, フェニル基が置換していない二環性エンドペルオキシド (**5b**, アスカリドール) の場合も原料回収であった。電荷移動錯体光励起で生成する *contact ion pair* は逆電子移動により出発物の中性分子に戻るのが速い (寿命 1 ns 以下) と考えられ [8], **3a-c** の反応は非常に効率よく起きていると示唆される。なお, フルオレノンを用いた光増感反応では **3a-d**, **5b** のいずれも O-O 結合開裂に由来するジエポキシドを生成した。

4. 計算結果

4.1 中性分子

過酸化物 **1-4** の各種計算法による構造最適化結果を Table 1 に示す。この中では電子相関を考慮している MP2 と B3LYP の結果が標準的な O-O 結合距離 (R_{O-O}) をほぼ再現している。B3LYP によると, 二環性エンドペルオキシドの **1a-c** の HOMO はいずれも酸素上の非共有電子対同士の反対称性軌道 (π_{O-O}^-) で, next HOMO は C=C 二重結合の π 軌道 (π_{C-C}) になっている。一方, 単環性の **1d** では C-O-O-C のねじれによって非共有電子対間の反発が緩和されるため, π_{O-O}^- と π_{C-C} のエネルギーが逆転している。また, フェニル基が置換した **2a**, **3a** の HOMO は **1a** 同様に π_{O-O}^- であるが, そのすぐ下にベンゼン環の π 軌道 (π_{Ph}) が位置し, それらの π 軌道が C-O σ 軌道 (σ_{C-O}) にほぼ直交するようなコンフォメーションを

Table 1. Calculated Bond Lengths and Dihedral Angles for the Peroxides (**1–4**)

	Method	Bond length / Å			Dihedral angle / deg	
		R_{C-O}	R_{O-O}	$R_{C=C}$	$D_{C-O-O-C}$	$D_{C=C-C-O}$
1a	AM1	1.485	1.318	1.357	0.00	65.93
	PM3	1.413	1.615	1.345	0.00	70.50
	HF/6-31G*	1.430	1.417	1.322	0.00	68.69
	MP2/6-31G*	1.462	1.508	1.350	0.00	70.86
	B3LYP/6-31G*	1.458	1.487	1.342	0.00	70.18
1b	MP2/6-31G*	1.454	1.498	1.343	0.00	58.58
	B3LYP/6-31G*	1.451	1.481	1.336	0.00	57.98
1c	MP2/6-31G*	1.461, 1.441	1.476	1.341	29.33	49.74, 44.84
	B3LYP/6-31G*	1.442	1.474	1.334	0.07	49.37
1d	MP2/6-31G*	1.427	1.476	1.338	80.19	17.36
	B3LYP/6-31G*	1.423	1.463	1.333	77.23	16.48
2a	B3LYP/6-31G*	1.470 (Ph-C-O)	1.481	1.341	1.42	69.60
		1.461				70.04
2d	B3LYP/6-31G*	1.442 (Ph-C-O)	1.462	1.333	77.08	13.88
		1.422				18.07
3a	B3LYP/6-31G*	1.473	1.474	1.340	0.00	69.48
3d	B3LYP/6-31G*	1.436, 1.428	1.466	1.332	76.12	16.43, 13.27
4a	B3LYP/6-31G*	1.435	1.503	—	0.04	—
4d	B3LYP/6-31G*	1.428	1.459	—	72.65	—
Me-O-O-Me (experimental) ^{a)}		1.420	1.457	—	119.1	—
tBu-O-O-tBu (experimental) ^{a)}		1.460	1.480	—	166.0	—

a) Ref. 9.

置し、それらの π 軌道が C-O σ 軌道 (σ_{C-O}) にほぼ直交するようなコンフォメーションをとっている (Fig. 1)。 **2d**, **3d** では **1d** 同様 π_{O-O^*} のエネルギー低下のため π_{Ph} が π_{O-O^*} よりエネルギー的に上位となった。なお、**1–4** の LUMO はいずれも O-O σ^* 反結合性軌道 (σ_{O-O^*}) なので、**1–4** が直接またはエネルギー移動で励起された場合には O-O の反結合性が増大し結合開裂することがわかる。

4.2 カチオンラジカル

カチオンラジカルの計算はすべて B3LYP で行った (Table 2)。 **1a**⁺ の R_{O-O} は 1.301 Å で、

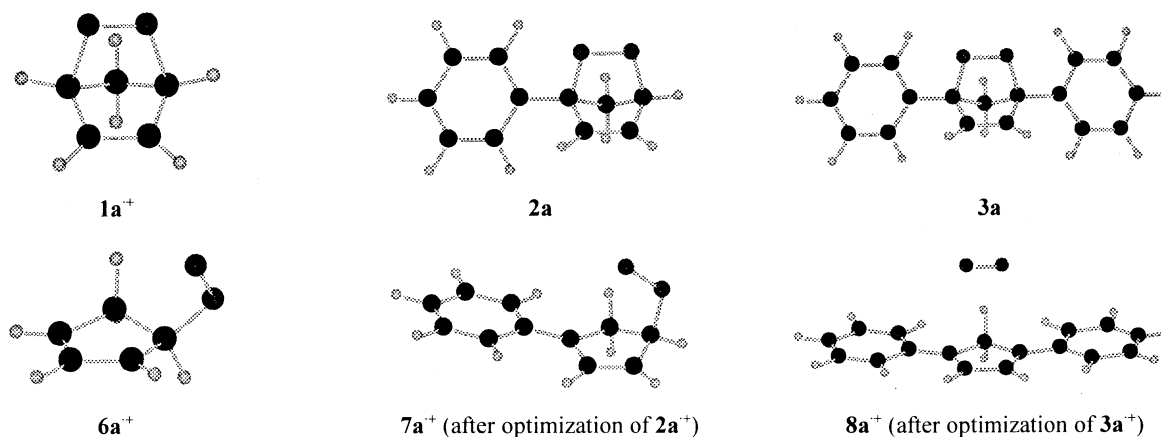
**Fig. 1.**

Table 2. Calculated Bond Lengths (Å) for the Peroxide Cation Radicals by B3LYP/6-31G*

	Cation Radical			Difference (Cation Radical – Neutral)		
	R_{C-O}	R_{O-O}	$R_{C=C}$	C–O	O–O	C=C
1a	1.637	1.301	1.349	0.179	–0.185	0.007
1b	1.516	1.333	1.335	0.065	–0.148	–0.001
1c	1.535	1.320	1.334	0.093	–0.154	0.000
1d	1.402	1.461	1.387	–0.021	–0.002	0.054
2a	2.850 (Ph–C–O)	1.299	1.361	1.380 (Ph–C–O)	–0.182	0.020
(7a⁺)	1.530			0.069		
2d	1.485 (Ph–C–O)	1.403	1.331	0.043 (Ph–C–O)	–0.059	–0.002
	1.446			0.024		
3a	3.337	1.215	1.404	1.864	–0.259	0.064
(8a⁺)						
3d	1.434, 1.420	1.465	1.350	–0.002, –0.008	–0.001	0.018
4a	1.497	1.346	—	0.062	–0.157	—
4d	1.501	1.328	—	0.073	–0.131	—

中性の **1a** よりかなり短くなっている。これは π_{O-O} から電子が失われることによって非共有電子対間の反発が弱められた結果と理解することができる。これに対し、C–O 結合距離 (R_{C-O}) は 1.637 Å となり、**1a** (1.458 Å) に比べかなり長くなった。これは O–O 結合が二重結合性を強めた結果 C–O 結合の結合性が低下したと考えることができるが、二重結合が還元された **4a** のカチオンラジカル (**4a⁺**) では **4a** と比べ 0.06 Å しか R_{C-O} が増大していないことを考慮すると、さらに重要なのは σ_{C-O} と $\pi_{C=C}$ の相互作用であると思われる。この点は **1a–d** の比較でさらに明らかとなる。Table 1 から明らかなように、**1a–c** では中性状態で C–O 結合と C=C 二重結合がなす二面角 (D_{C-C-O}) が大きいため σ_{C-O} と $\pi_{C=C}$ の重なりが大きく、 $\pi_{C=C}$ からの部分的なイオン化の後 σ_{C-O} への電荷とスピンの非局在化が起き、その結果中性分子に比べ R_{C-O} が増大する。それに対し、 D_{C-C-O} が小さい、すなわち σ_{C-O} と $\pi_{C=C}$ の重なりが小さい **1d** ではそのような効果は期待できないため、 R_{C-O} の増大量は小さいかむしろ減少している。以上より、 R_{C-O} の大きい **1a–c⁺** では中性分子に比べ C–O 結合開裂が起りやすいと予想されるが、C–O 結合が 1 つ開裂した open form (**6a⁺**, Fig. 1) の最適化後のエネルギーは開裂前の **1a⁺** より 6.1 kcal mol^{–1} 高く、**6b⁺**, **6c⁺** の場合はエネルギー極小点が見出せずそれぞれ **1b⁺**, **1c⁺** の構造に収束した。このことは、**1a–c⁺** の C–O 結合開裂が熱力学的に不利な過程であり、光誘起電子移動（電荷移動錯体光励起）条件下ではカチオンラジカルが短寿命（1 ns 以下）であるため反応は事実上起こらないことを示している [2]。

C–O 結合の炭素原子に結合したベンゼン環は、条件次第で効果的に C–O 結合距離を長くすると期待できる。**2a** や **3a** の場合、ベンゼン環の π 軌道 (π_{ph}) は HOMO である π_{O-O} とエネルギー準位が近いため（前述）、**2a⁺** や **3a⁺** の正電荷とスピンはある程度ベンゼン環上にも分布している。もし、 π_{ph} と σ_{C-O} の重なりが大であれば、C–O 結合上にも電荷とスピンの分布する結果（超共役）、その結合次数は低下するであろう。また、この場合ベンゼン環と環内 C=C 二重結合はほとんど共平面上にあるため、環内 C=C 二重結合を介した長い共役系が形成されることになる。前節で述べたように中性分子においては π_{ph} と σ_{C-O} がほぼ直交しているため重なりがほとんどないが、カチオンラジカルの構造最適化計算で得られた最安定

構造では π_{ph} と σ_{C-O} が平行に近くなり重なりが大きくなる結果、 R_{C-O} の著しい増大がみられた。

$2a^+$ では、構造最適化計算の過程でフェニル置換した C-O 結合が開裂し open form ($7a^+$, Fig.1) で最安定となった。C-O 結合を保った形でのエネルギー極小点は見出されなかった。この構造ではベンゼン環と環内アリルが共平面上にあり正電荷がこれらの間に非局在化している。また、 $3a^+$ においても C-O 結合を保った構造は極小点とならず、さらに $2a^+$ のように片側の C-O 結合のみが開裂した open form ではなく両方が同時開裂した complex ($8a^+$, Fig.1) となった。なおこの場合は、正電荷はほとんどジエン側に局在していた。ベンゼン環の回転障壁はこの場合ほとんどないと考えられるのでカチオンラジカルで寿命内で十分回転でき、 $3a^+$ ではベンゼン環の回転に伴い2つの C-O 結合開裂が(協奏的に)同時進行したと推定される。単環性の $2d^+$, $3d^+$ の場合は、 π_{O-O^-} は π_{ph} よりエネルギーが低い正電荷とスピンはほとんどベンゼン環上にある。ベンゼン環の回転によって π_{ph} と σ_{C-O} の重なりを大きくすることはできるが、 $2a^+$, $3a^+$ とは異なり σ_{C-O} と $\pi_{C=C}$ の重なりが小さい ($D_{C-C-C-O}$ が小さい) ために環内 C=C 二重結合をも含む長い共役系は形成できない。従って、 $2d^+$, $3d^+$ の場合には $2a^+$, $3a^+$ に比べ C-O 結合開裂は起こりにくいと予想でき、これは実際の実験結果 [2] と一致している。

5. まとめ

無置換の二環性エンドペルオキシドのカチオンラジカルは対応する中性分子より短い R_{O-O} と長い R_{C-O} を有することが分子軌道計算より明らかとなった。これは、HOMO である π_{O-O^-} からのイオン化によって酸素の非共有電子対間の反発が弱められたのと、next HOMO である $\pi_{C=C}$ からの部分的なイオン化と $\pi_{C=C}$ と σ_{C-O} の間の電荷およびスピンの非局在化によると考えられる。従って、カチオンラジカルでは O-O 結合が開裂しにくくなると同時に C-O 結合が開裂しやすくなると予想されるが、無置換体では開裂反応が吸熱的となるため反応は起こらない。一方、フェニル置換体のカチオンラジカルでは二環性のものが実際に C-O 結合の開裂を起こすが、そのためにはベンゼン環の π_{ph} とフェニル置換した C-O 結合の σ_{C-O} の重なりが最大になるようにベンゼン環が回転することが必要であることが計算より予想された。そして、この回転障壁は十分小さいため、カチオンラジカルで短い寿命内にベンゼン環の回転と同時に C-O 結合が開裂できると考えられ、構造最適化の結果ほとんど C-O 結合が開裂した構造が最安定構造として求められた。

参考文献

- [1] I. Saito and S. S. Nittala, in *The Chemistry of Peroxides*, ed. S. Patai, Wiley, New York, 1983, pp. 311-374.
- [2] (a) Y. Takahashi, K. Wakamatsu, S. Morishima, and T. Miyashi, *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 243 (1993); (b) Y. Takahashi, S. Morishima, K. Wakamatsu, T. Suzuki, and T. Miyashi, *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 13 (1994).
- [3] MOPAC 97, J. J. P. Stewart, Fujitsu Ltd., Tokyo, 1997; URL <http://www.winmopac.com/>.

- [4] (a) 「第 4 版実験化学講座 基本操作 III」, 日本化学会編, 丸善, 1991 年; (b) 「分子軌道法 MOPAC ガイドブック」, 平野恒夫, 田辺和俊編, 海文堂出版, 1991 年; (c) 「分子軌道法でみる有機反応」, 田辺和俊, 堀 憲次編, 丸善, 1997 年.
- [5] GAMESS, M. W. Schmidt, K. K. Baldridge, J. A. Boatz, S. T. Elbert, M. S. Gordon, J. J. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K. A. Nguyen, S. Su, T. L. Windus, M. Dupuis, and J. A. Montgomery, *J. Comput. Chem.*, **14**, 1347 (1993); URL <http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html>.
- [6] Gaussian 98 (Revision A.3), M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, V. G. Zakrzewski, J. A. Montgomery, R. E. Stratmann, J. C. Burant, S. Dapprich, J. M. Millam, A. D. Daniels, K. N. Kudin, M. C. Strain, O. Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Mennucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G. A. Petersson, P. Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. Cioslowski, J. V. Ortiz, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzalez, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. G. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, J. L. Andres, M. Head-Gordon, E. S. Replogle, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 1998; URL <http://www.gaussian.com/>.
- [7] R. S. Mulliken and W. B. Person, *Molecular Complexes*, Wiley, New York, 1969.
- [8] G. Jones, II, in *Photoinduced Electron Transfer, Part A*, eds. M. A. Fox and M. Channon, Elsevier, Amsterdam, 1988, pp. 245–304.
- [9] (a) B. Haas and H. Oberhammer, *J. Am. Chem. Soc.*, **106**, 6146 (1984); (b) B. Haas and H. Oberhammer, *J. Mol. Struct.*, **40**, 65 (1977).

JAVAによる遺伝的アルゴリズムの研究

情報処理センター 岩崎彰典

遺伝的アルゴリズムは、組合わせ問題の近似解をヒューリスティックに探索するアルゴリズムのなかでは比較的有効な方法の一つである。しかしながら、問題によってはパラメータを適切に決定する必要がある。そこで、本研究ではJAVA言語を用いて遺伝的アルゴリズムを構成し、結果を視覚化することでパラメータの決定を容易にすることを試みた。

1 はじめに

遺伝的アルゴリズムは、様々な組合わせ問題において比較的良好な解を短時間に見つけるがことできることで知られている。しかしながら、実用的な問題においては、単純な遺伝的アルゴリズムだけで解を見つけることは一般に困難であり、問題の特性を生かしたパラメータの決定が必要となる。本研究では、遺伝的アルゴリズムを適用する組合わせ問題として0-1ナップザック問題を取りあげる。0-1ナップザック問題は、問題の単純さにもかかわらず、組合わせ問題の本質的難しさを備えており、また、探索空間上の解の分布を視覚化しやすい特徴を持つ。JAVA言語によって遺伝的アルゴリズムのプログラムを作成し、解が改善される様子をアニメーションによって示す。

2 0-1 ナップザック問題

0-1 ナップザック問題は次のように定式化される：

$$\begin{aligned} &\text{maximize} && f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N f_i x_i \\ &\text{subject to} && g(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N g_i x_i \leq b \\ &&& x_i = 0 \text{ or } 1, \quad i = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \tag{1}$$

ここで、係数 f_i , g_i は、その目的関数、制約関数、 b は制約許容量である。

3 遺伝的アルゴリズム

遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm :GA) は、生物進化の原理に着想を得たアルゴリズムであり、確率的探索、学習、最適化の一手法である。このアルゴリズムとは生物の進化過程をシミュレーションすることによって、数多くの組み合わせの中から最適な解を見つけ出す。ダーウィンの自然淘汰理論を基礎に、生物の進化過程を工学的モデルに応用したものである。それぞれの組み合わせを遺伝子からなる染色体を解に対応させて、その組み合わせごとの目的関数を計算する。そして、その値の高いものを選択し、それを残すように何世代にもわたって行わせれば最終的に、高い目的関数値をもつ解を得ることができる。

まず、0と1の値を持つ遺伝子からなる染色体と考えこの染色体の集まりを集団と言う。これらの集団に対して、交叉、突然変異、選択の操作を施す。

3.1 交叉

交叉 (crossover) は、二つの親の染色体を組み替えて子の染色体を作る操作である。

1. 単純交叉 (simple crossover)

最も単純な方法では、交叉する位置を一つ決めてその前と後で、どちらかの親の遺伝子型を受け継ぐかを変える方法である。これを単純交叉、または一点交叉 (one-point crossover) と呼ぶ。図3.1では、4番目と5番目の遺伝子座の間に交叉位置があり、個体Bの5番目から最後まで遺伝子が、新しい個体の遺伝子となる。また、その逆が、他の新しい個体の遺伝子となる。

個体 A	1001		111	→	1001000
個体 B	0011		000	→	0011111

<図 3.1> 1点交叉の例

2. 複数点交叉 (multipoint crossover)

複数点交叉は、交叉位置が複数ある方法である。例えば交叉位置が2と5なら、新たな個体の一つは個体Aの先頭から2番目まで個体Bの3番目から5番目まで個体Aの6番目から最後までによって、遺伝子が作られる。同時に、その逆の組み合わせで、もう一つの新たな個体の遺伝子が作られる。(図3-2)

本実験では、ランダムに選んだ20個の解からランダムに2つを選びさらにランダムに選んだ2カ所で切り、中央を入れ替える2点交叉を使用した。

個体 A	10	011	11	→	1011011
個体 B	00	110	00	→	0001100

＜図 3.2＞ 複数点交叉の例

3.2 突然変異

突然変異 (mutation) は、各染色体において、突然変異 (mutation) は、各染色体において、ある確率で、遺伝子の一部が 0 から 1、あるいは 1 から 0 に反転させる操作である。大きな変異確率に設定するとランダム探索と同じようなことになってしまいが、ある程度の変異は必要である。突然変異が無い場合は、初期の遺伝子の組合せ以外の空間を探索することはできず、従って、求められる解の質にも限界が出てくる。図 3.3 では、文字列の 1 か所をランダムに選択し反転させる 1 点突然変異を示した。

変異前	1001	0	11	→	変異後	1001	1	00
-----	------	---	----	---	-----	------	---	----

＜図 3.3＞ 突然変異の例

3.3 選択

交叉、突然変異を経た遺伝子を持った染色体のうち、環境へのより高い適応性を持つものを選択する。本研究では、エリート戦略 (ここでは集団中で最も高い目的関数値をそのまま次世代に残す) を用いた。

4 計算機実験

JAVA 言語を用い、ランダムな値をもつ 50 変数の 0-1 ナップザック問題を作成し、遺伝的アルゴリズムを適用した。実験では 20 個の解集団を生成し、遺伝的アルゴリズムによってその解集団が最適化される様子を調べた。

実験で用いた遺伝的アルゴリズムのパラメータを次に示す。

個体数：20

交叉方法：2点交叉

突然変異率：mut = $\frac{\text{突然変異数}}{\text{全遺伝子数}} \times 100$ (%)

$$\text{適応度関数} = \begin{cases} f(x) & g(x) \leq b \\ f(x) - \lambda(g(x) - b) & g(x) > b \end{cases}$$

λ : ペナルティ乗数

選択方法：エリート戦略

5 結果

図5.1はランダムに生成した20個の解の分布を示す。制約条件がないとき、もしくは制約関数の総和が制約許容量と等しいとき、最適解は全ての変数が1の明らかな解をもつ。しかし、単なるランダム探索では全ての変数が1となる確率はほとんど0であり、解の品質もほとんど改善されない。

図5.2は突然変異率を0%、図5.3は突然変異率を5%として、制約条件がない問題に遺伝的アルゴリズムを適用し、解の改善していく軌跡を表している。突然変異率が0%では、解は改善されてはいるが、最適解付近までは到達していない。しかし、突然変異率を5%とすると、解ほとんど最適解付近まで到達している。

図5.4は制約をもつ問題へ適用した結果である。ペナルティ乗数を1としたとき、比較的良好に解が改善されている。

図5.5はペナルティ乗数を1とし、制約許容量の非常に少ない問題へ適用した結果である。実行可能解が得られていないことがわかる。

図5.6はペナルティ乗数を10とし、制約許容量の非常に少ない問題へ適用した結果である。解ほとんど最適解付近まで到達している。

このように、遺伝的アルゴリズムは問題によってパラメータを適切に定める必要があり、解の挙動の可視化はパラメータの決定を容易にすることがわかる。

6 むすび

本研究では、JAVA言語を用いた遺伝的アルゴリズムを0-1ナップザック問題に適用し、結果を視覚化した。遺伝的アルゴリズムはパラメータの適切な決定が重要であり、解の改善されていく様子の可視化はそれを容易にすることがわかった。

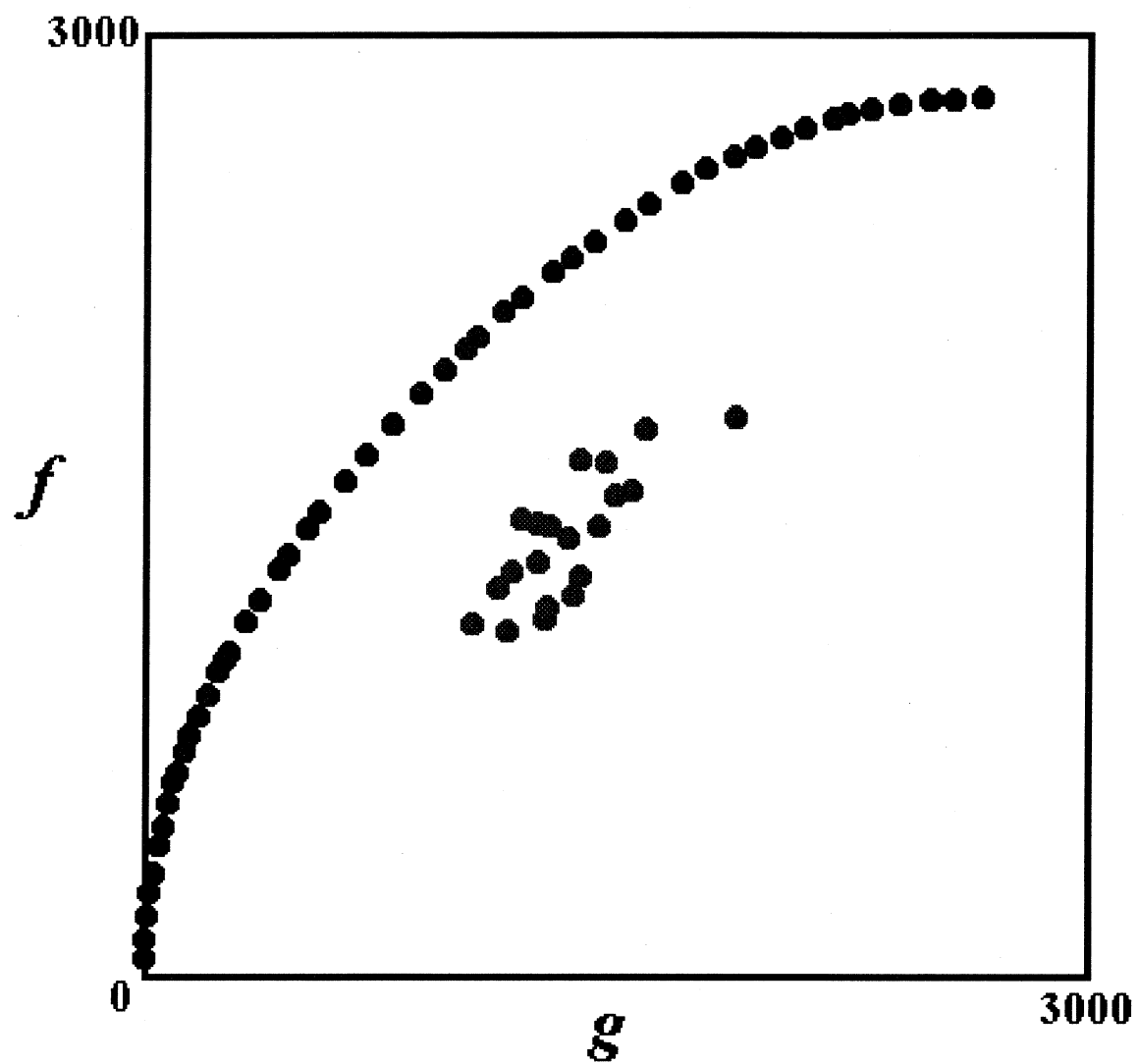


図-5.1 ランダムな20個の解

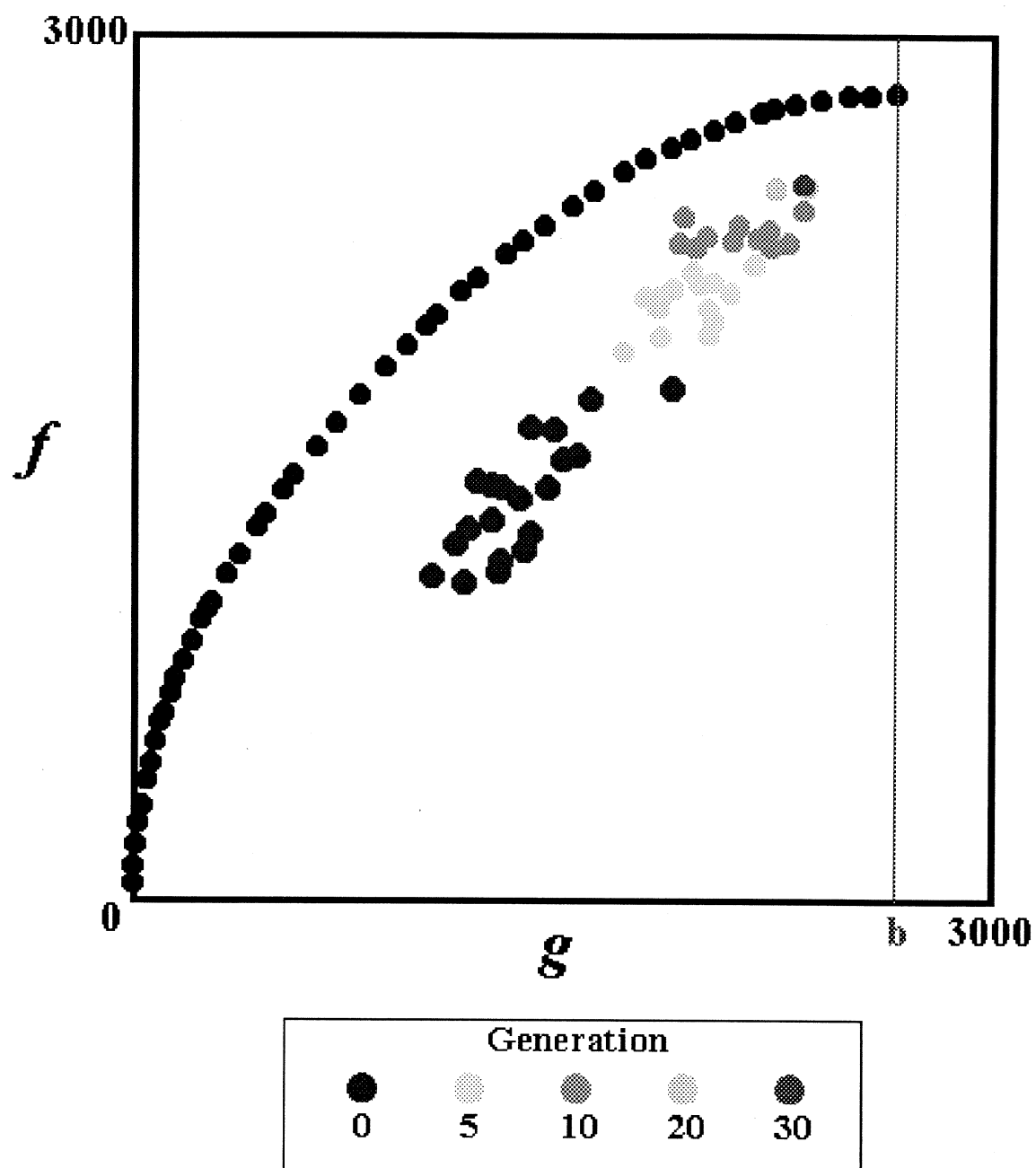


图-5.2 $b=2666$ $\text{mut}=0.0(\%)$ $\lambda=1.0$

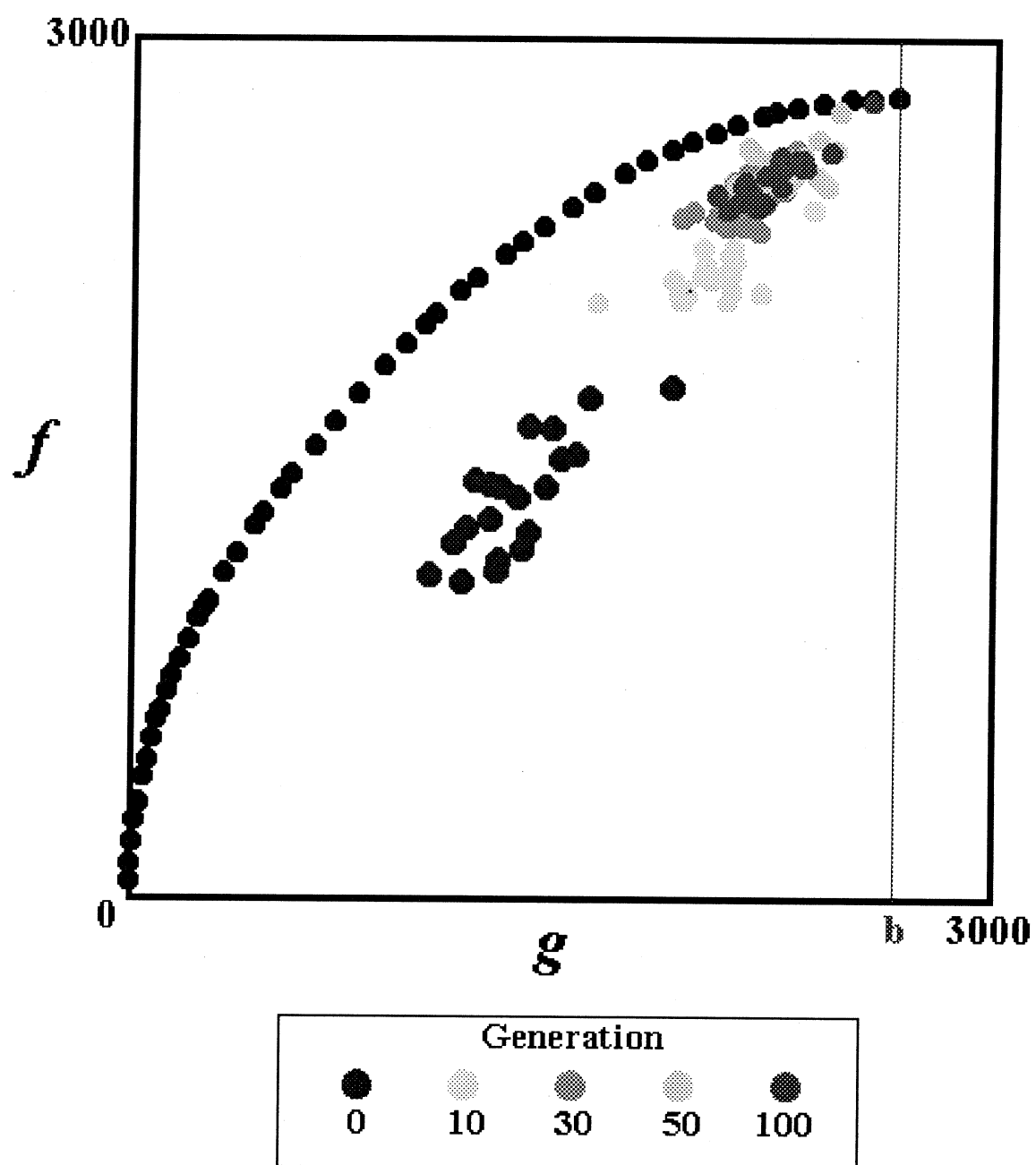


图-5.3 $b=2666$ $mut=5.0(\%)$ $\lambda=1.0$

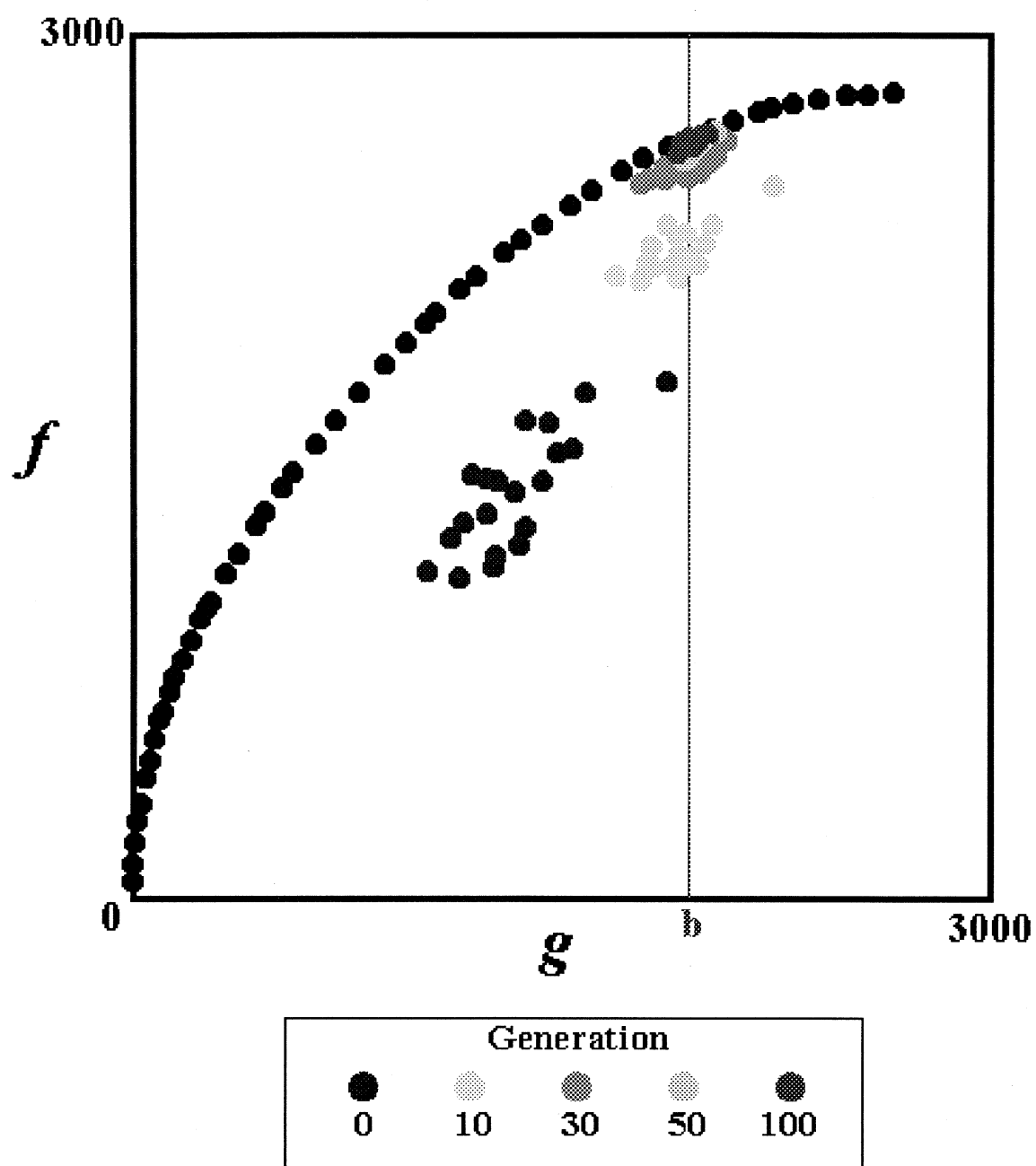


图-5.4 $b=1955$ $\text{mut}=1.0(\%)$ $\lambda=1.0$

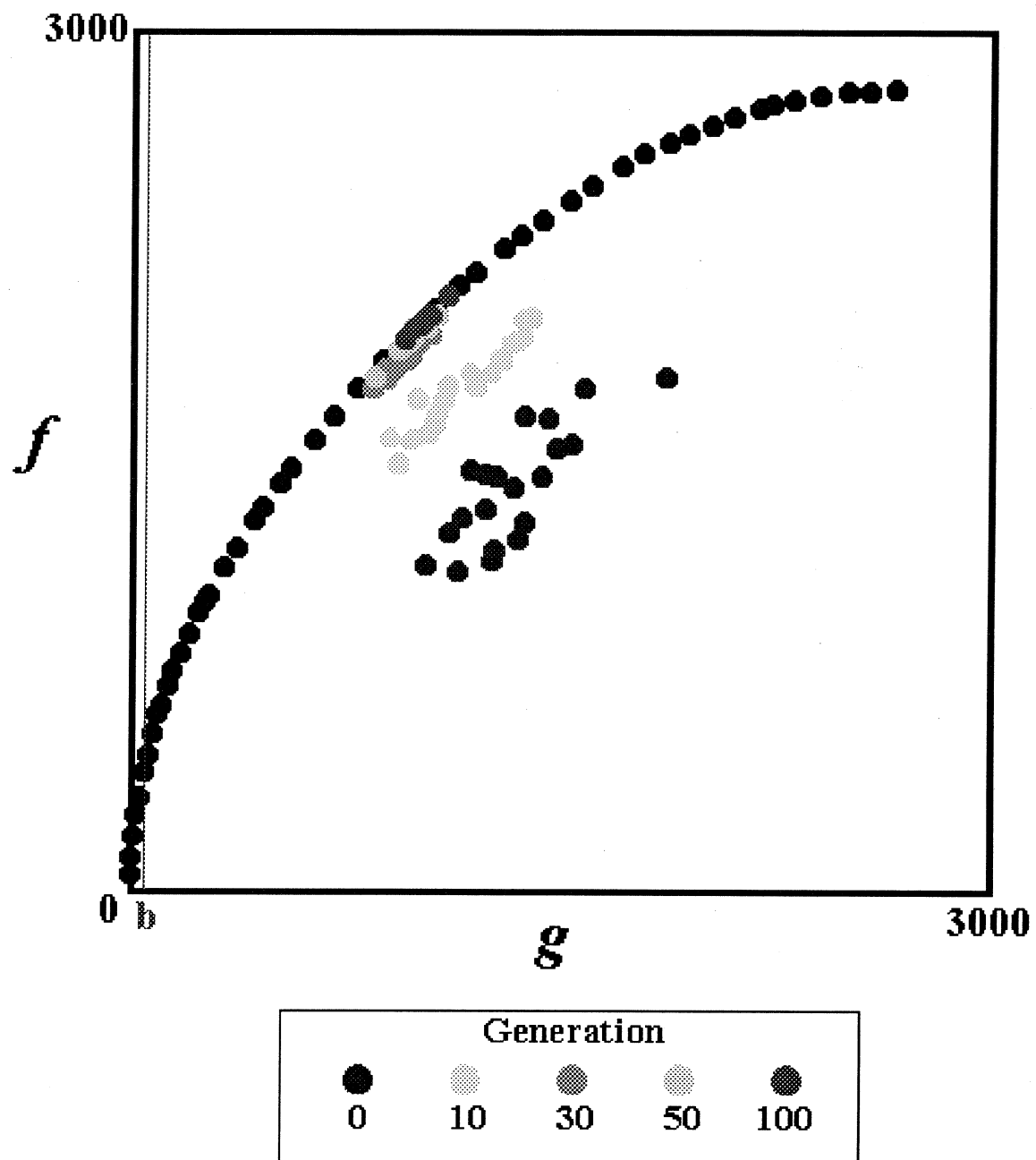


图 5.5 $b=50$ $mut=1.0(\%)$ $\lambda=1.0$

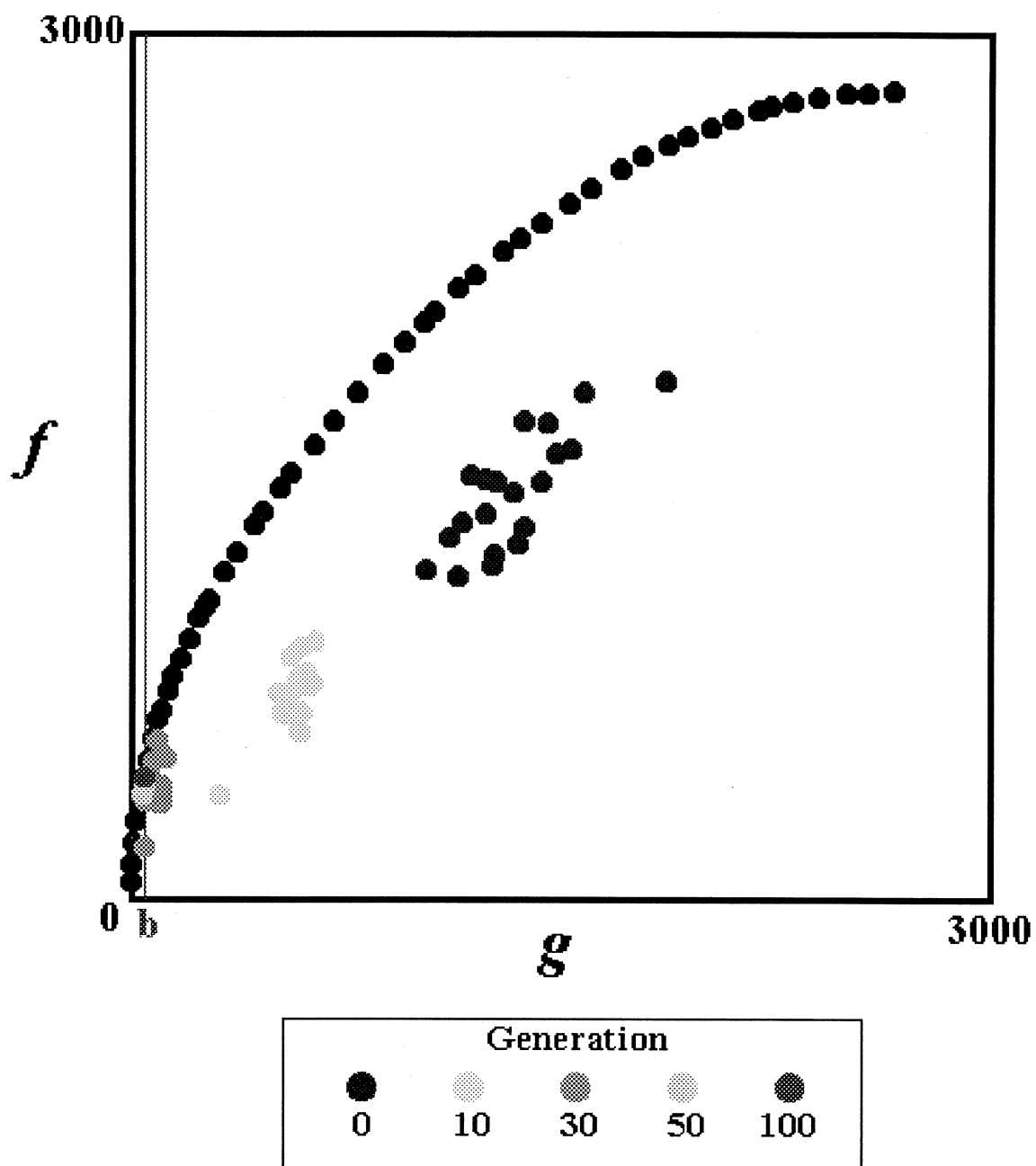


图-5.6 $b=50$ $\text{mut}=1.0(\%)$ $\lambda=10$