

# 研究員報告書

第3・4号

(1983.3)

岡 山 理 科 大 学  
情報処理センター資料室

# 目 次

(56年度)

1. LP (線形計画問題) 解法の効率的アルゴリズムの開発  
教養部教授 成久洋之…………… 1
2. 数式処理 3  
応用数学科助教授 坂本 薫  
〃 助手 青江俊夫…………… 6
3. 結晶構造の計算及び熱力学関数の計算  
化学科教授 故中平光興  
〃 講師 林 宏哉…………… 9
4. 金属錯体の X 線結晶解析  
化学科助教授 柴原隆志…………… 12
5. 非線形力学系の不規則現象  
電子理学科助手 太田垣博 一…………… 16
6. 古典分散式による赤外反射率の解析  
基礎理学科助教授 若村国夫  
〃 助手 財部健一…………… 20

(57年度)

7. 数理計画法における分解原理  
電子理学科教授 成久洋之…………… 23
8. モリブデン錯体の X 線結晶解析  
—硫黄架橋をもつモリブデン(V)シュウ酸錯体の結晶構造—  
化学科助教授 柴原隆志…………… 29
9. ファインマン—ダイアグラムから数式への変換プログラムの作成  
応用数学科助教授 坂本 薫  
〃 助手 青江俊夫…………… 33
10. 有限結晶での X 線干渉縞  
教養部助教授 浦上 澤 之  
〃 講師 宇都宮 晃…………… 44

# 1. LP (線形計画問題) 解法の

## 効率的アルゴリズムの開発

教養部教授 成久洋久

### 1. まえがき

線形計画問題の解法アルゴリズムとして、単体法が開発されてよりかなりの期間が経過し、その応用分野も多岐にわたり、その普及ぶりについて今更言うまでもない。しかしながら、如何に秀れた理論および手法と言えども万能ではなく、対象となる問題の構造によってはより効率的な解法手法の実現が望まれるケースも少なからず存在するものである。

線形計画問題が大規模になってくると、与えられた端点集合の中から最適端点を見出すこともそう簡単ではなく、アルゴリズムとしての収束性の保証は確保されても現実的な処理時間はかなり大きくなることが予想されるものである。そこで、より効率的な最適解探索手順の解法が要求されることになる。

単体法で最適解を求める場合、原点から出発してその隣接端点に沿いながら逐次実行可能解の改善を行い最終的に最適端点に到着しようとするものである。そこで、いま何らかの方法で一足飛びに最適解の近くの端点まで到着しうる方法が存在すれば、LP問題に対する求解法としてかなり効率化を期待しうることになる。

### 2. Duoplex 法の基本的考え方

単体法より効率的なアルゴリズムを検討しようとする場合、根本的に simplex free アルゴリズムによるかあるいは quasi-simplex アルゴリズムによるかの2通りの方向が考えられる。後者の場合、simplex 法との接続を如何に処理するかが重要な事項となる。つまりある段階までは非単体法で処理するが、それ以降は単体法で最適解を求めるアルゴリズムとするため、実行可能基底解への変換法が容易に出来るかどうかの問題である。

本論文では、quasi-simplex アルゴリズムの立場で、適当なステップにおいて単体法にスイッチするようなアルゴリズムに限定する。いま、単体法で  $n$  ステップで最適解が求められるものと仮定し、そのうちの  $n_s$  ( $n_s < n$ ) ステップで単体法にスイッチするものとする。さらに、単体法での1ステップに  $t$  秒の処理時間を要するものとする、少なくとも quasi-simplex 法における単体法へのスイッチまでの時間 NST は、

$$NST < n_s t$$

でなければならない。これがためには出来るだけ  $n_s$  が  $n$  に近い事が望ましいわけであるが問題の構造にもかなり依存していることも否定出来ない。

単体法では実行可能性を保持しながら、解の改善を計るものであるが、最適解の近くの端点を通

る任意の条件式に対応する超平面 (active constraint) 上で実行不可能点を適当に選択してみる。すなわち、原点より出発して、つぎのステップで実行不可能点 (infeasible point) に移る。ところがこの点の実行可能性は保証されないかわりに目的関数値はかなりの度合において最適解に対応するものに近づくはざである。この状況を定式化するとつぎのとおり。

与えられた LP 問題

$$(1) \left\{ \begin{array}{l} \max \quad c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_n x_n \\ \text{subject to} \left\{ \begin{array}{l} a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + \cdots + a_{1n} x_n \leq b_1 \\ \cdots \\ a_{m1} x_1 + a_{m2} x_2 + \cdots + a_{mn} x_n \leq b_m \end{array} \right. \\ x_1, x_2, \cdots, x_n \geq 0 \end{array} \right.$$

この問題の条件式にスラック変数を導入して

$$(2) \left\{ \begin{array}{l} a_{11} x_1 + \cdots + a_{1n} x_n + x_{n+1} = b_1 \\ \cdots \\ a_{m1} x_1 + \cdots + a_{mn} x_n + x_{n+m} = b_m \end{array} \right.$$

とする。ここで Most Active Constraint として、

$$(3) a_{s1} x_1 + a_{s2} x_2 + \cdots + a_{sn} x_n = b_s$$

を決定したものとす。この条件式を MAC と呼ぶことにす。

MAC において最大カットを与える変数を  $x_t$  とし、 $x_{n+s}$  と  $x_t$  とを交換して掃き出しを行う。その結果目的関数  $\bar{z}$  は  $c_t \frac{b_s}{a_{st}}$  となり、各条件は次のように与えられる。

$$(4) \sum_{j=1}^{n+m} \bar{a}_{ij} x_j = \bar{b}_i, \quad i = 1, 2, \cdots, m$$

$$(5) \left\{ \begin{array}{l} \bar{a}_{ij} = \left\{ \begin{array}{ll} a_{ij} - \frac{a_{sj} a_{it}}{a_{st}} & (i \neq s) \\ \frac{a_{sj}}{a_{st}} & (i = s) \end{array} \right. \\ \bar{b}_i = \left\{ \begin{array}{ll} b_i - \frac{b_s a_{it}}{a_{st}} & (i \neq s) \\ \frac{b_i}{a_{st}} & (i = s) \end{array} \right. \end{array} \right.$$

この場合の基底変数は  $x_{n+1}, \cdots, x_{n+s-1}, x_t, x_{n+s+1}, \cdots, x_{n+m}$  となっており、 $\bar{z} = c_t \bar{b}_s$  である。

(5) の  $\bar{b}_i$  について考えると、

$$\min \left\{ \frac{b_i}{a_{it}}, a_{it} > 0 \right\} \cong \frac{b_s}{a_{st}}$$

であるから  $\bar{b}_i < 0$  の  $i$  も存在するはずである。つまり、 $a_{st}$  による掃き出しにより infeasible な基底解が求められたことになる。しかるに MAC の特質を考えると、目的関数の最適値  $z_0$  と  $\bar{z}$

とはかなり近い値となっているはずである。したがって、出来るだけ  $\bar{z}$  の値を変動させずに feasible solution が求められる様にしたわけである。basic feasible solution を求めるため、infeasibility の度合の大きいものから順に実行可能性を達成するようにしてみる。

$x_1$  をある基底解とすると、超平面  $\mathbf{a}x = b$  までの距離  $d$  は

$$(6) \quad d = \frac{|b - \mathbf{a}x_1|}{\|\mathbf{a}\|}$$

として表わされる。いま、 $x_1$  を infeasible basic solution として考えるならば、

$$\bar{a}_i x = \bar{b}_i \quad (i = 1, 2, \dots, m)$$

の中で  $\bar{b}_i < 0$  となる  $i$  の集合を  $\bar{I}$  とするとき

$$(7) \quad k = \max_{i \in \bar{I}} \left\{ \frac{|\bar{b}_i - \bar{a}_i x_1|}{\|\bar{a}_i\|} \right\}$$

として表わされる  $k$  条件式に対応する超平面でのスラック変数  $x_{n+k}$  を非基底変数とすればよい。このとき基底導入変数は  $\bar{a}_{kj}$  ( $j = 1, \dots, n+m$ ) の中で  $\bar{a}_{kj} < 0$  でしかも  $\max |\bar{a}_{kj}|$  となる  $x_l$  を選択する。すなわち、 $\bar{a}_{kl}$  を軸として掃き出すことになる。このときMAC条件式について考えると、

$$\sum_{j=1}^{n+m} \bar{a}_{sj} x_j = \bar{b}_s$$

であるから、 $\bar{b}_s$  は次のように与えられる。

$$\bar{b}_s = \bar{b}_s - \frac{\bar{b}_k \bar{a}_{sl}}{\bar{a}_{kl}}$$

したがって、 $\bar{a}_{sl} < 0$  であれば  $\bar{b}_k / \bar{a}_{kl} > 0$  であることから  $\bar{b}_s > 0$  であるが、 $\bar{a}_{sl} > 0$  であれば

$$(8) \quad \frac{\bar{b}_s}{\bar{a}_{sl}} > \frac{\bar{b}_k}{\bar{a}_{kl}}$$

となるように  $k$  を修正する必要がある。

上記基本的考え方により feasible basic solution を求め、単体法にスイッチして最適解を求めうる。

### 3. Duoplex アルゴリズム

ステップ 1 MAC条件式を求める。

ステップ 2 最大カット要素で軸操作して、infeasible basic solution を求める。

ステップ 3 (7)より maximum infeasible constraint  $k$  を求める。

ステップ 4 (8)が満たされる範囲で  $\bar{a}_{kl}$  を軸として、軸操作をおこなう。

ステップ 5 infeasible basic solution であればステップ 3 へ。basic feasible solution であればステップ 6 へ。

### 4. おわりに

本アルゴリズムによるステップ数は基本的に与えられた問題構造により依存することが判明した。一般には、与えられた問題の変数  $n$  が条件式に比して少ない場合に有効に使用することが考えられ

る。しかしながら、 $m \gg n$  の場合、双対問題に変換しても二段階法 (two phase method) における第一段階での実行可能解を探すステップにかなりの段階をとることを考慮すれば割合に現実的な効率的なものと言えよう。一方、primal simplex method により最適解を求める場合、目的関数の gradient のみを改善の尺度とせず、目的関数値の増加量をも計算して軸を決定する立場で単体法を適用すべきであることが如何に効率的であるかが判明した。本アルゴリズムは大規模な線形計画問題にも適用しうるように構成しているのでその種の利用者には十分に役立つものと確信しております。

## プログラム登録表

(様式1)

ライブラリ名	(センタ記入)	作成日付	57. 1. 20
プログラム名	α		
作成者氏名	成久洋之		
形式	(a) コンプリート・プログラム      c 関数副プログラム b サブルーチン・副プログラム      d その他		
使用機器	a 磁気テープ 入力 ( ) 本, 出力 ( ) 本 b CRTの種類 ( ) (c) 磁気ディスク・ファイル ( 1 ) 個 d その他 ( )		
プログラムサイズ	a ソース・プログラム ( 394 ) 行 b オブジェクト・プログラム ( 69.9 ) KW		
使用言語	a FLAG                      d COBOL                      g LISP (b) FORTRAN IV      e METASYMBOL      h PL/I c FORTRAN 77      f PASCAL      i その他 ( )		
処理形態	a バッチ処理専用                      (c) バッチ・TSS兼用 b TSS専用		
使用条件等	(枠内に入りきらない場合は、A4サイズのもので説明を添付してください)		

## 2. 数式処理 3

### — ファインマン図形の散乱振幅の自動作成のプログラム —

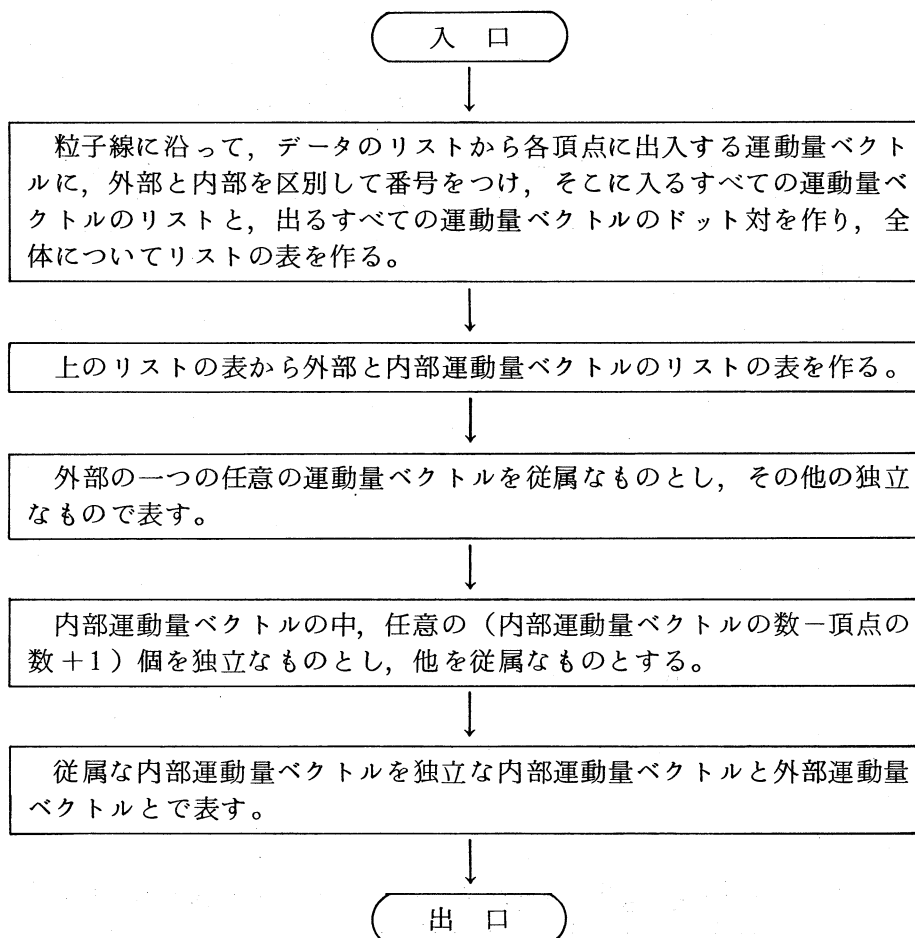
応用数学科助教授 坂本 薫

〃 助手 青江 俊夫

量子統計力学, 量子電気力学に於いて, ファインマン図形を表わすリストを生成する方法が報告された。<sup>1), 2), 3), 4)</sup> 私達はこのリストのデータから, 散乱振幅の式を作るプログラムをLisp Kで作成した。量子電気力学に於いての散乱振幅の式を作る方法について以下に述べる。

#### 1. 運動量の保存<sup>4)</sup>

各頂点に於いて, 出る運動量ベクトルに負の符号をつければ, すべてその頂点に出入する運動量ベクトルの総和はゼロであるという保存則を使用して, 次の流れ図のように, 運動量ベクトルを定めていく。





## 2. 散乱振幅の作成

以下の規則によって、運動量表示の散乱振幅 ( $iM_{fi}$ ) の式を作る。<sup>2)</sup>

- (1)  $n$  次の摂動は、各々の頂点に 1 個の出る電子線 (実線) と 1 個の入る電子線と 1 個の光子線 (点線) が集まる  $n$  個の頂点に対応するものとする。散乱過程の振幅には、入るおよび出る粒子の数に等しい数の外部線を持つ図形が含まれる。
- (2) 外部の入る実線の各々には、入る電子の振幅  $u(p)$  あるいは、出る陽電子の振幅  $\bar{v}(p)$  を対応させ、出る実線の各々には、出る電子の振幅  $\bar{u}(p)$  あるいは、入る陽電子の振幅  $v(p)$  を対応させる。
- (3) 各頂点には、4-ベクトル  $-ie\gamma^\mu$  を対応させる。
- (4) 外部の入る又は出る光子の振幅は  $e_\mu (e_\mu^*)$  を対応させる。ここで  $e_\mu$  は偏りの 4-ベクトルである。ベクトルの添え字  $\mu$  は対応する頂点の行列  $\gamma^\mu$  の添え字と一致する。
- (5) 内部の実線には、行列要素  $iG(p)$  が、内部の点線には、 $-iD_{\mu\nu}(k)$  を対応させ、テンソルの添え字  $\mu, \nu$  を点線で結ばれる頂点の行列  $\gamma^\mu, \gamma^\nu$  の添え字と一致させる。
- (6) 一連の電子線に沿っての矢印は、一定の向きを持ち、それに沿っての双スピノールの添え字の配置は矢印と反対に動くとき、左から右へ行列を書く事に対応する。閉じた電子のループはそれに沿って並んだ行列の積の trace に対応する。
- (7) 陽電子線の運動量ベクトルを  $-p$  とする。独立な内部の運動量ベクトルごとに  $d^4p / (2\pi)^4$  について積分がなされる。
- (8) 外場に対応した入る外部線 (鎖線) には行列因子  $A^{(e)}(q)$  があてられる。運動量ベクトル  $q$  は頂点で他の運動量ベクトルと結ばれる。
- (9) 電子線がとじたループをなすとき、ループ符号因子は  $(-1)^L$  となる。ここで  $L$  はループの数である。

この得られた散乱振幅  $iM_{fi}$  を印刷する。

表 運動量表示の行列要素

No.	粒子とその状態	行列の要素の因子	ダイアグラムの要素
1	運動量 $p$ の入る電子	$u(p)$	
2	運動量 $-p$ の入る陽電子	$\bar{v}(p)$	
3	運動量 $p$ の出る電子	$\bar{u}(p)$	
4	運動量 $-p$ の出る陽電子	$v(p)$	
5	入る又は出る光子	$e_\mu(k)$ (入る) $e_\mu^*(k)$ (出る)	
6	頂点1から2への電子の運動 (又は2から1への陽電子の運動)	$iG(P) = i \frac{\hat{p} + m}{p^2 - m^2}$	
7	頂点の間の光子の運動	$-iD_{\mu\nu}(k) = \frac{-i}{k^2 - \lambda^2} g_{\mu\nu}$	
8	頂点の行列	$-ie\gamma^\mu$	
9	外場に対応した線	$A^{(e)}(q)$	

### 3. おわりに

得られた散乱振幅の簡単化とその数式処理について次の研究員報告で報告する予定である。

#### 【参考分献】

- (1) K. SAKAMOTO and T. AOE, J. Infor. Pro. 4, 2 (1981) 89-90.
- (2) J. A. CAMPBELL and A. C. HEARN, J. Comp. Phys. 5, 2 (1970) 28-327.
- (3) T. SAKAKI, J. Comp. Phys. 22, 2 (1976) 189-214.
- (4) 中西襄, 場の量子論, 培風館 (1975).
- (5) ヴェ・ベ・ベレステッキー, イエ・エム・リフシツ, 相対論的量子力学 I, 東京図書 (1967).

### 3. 結晶構造の計算及び熱力学関数の計算

化学科教授 故 中 平 光 興

〃 講師 林 宏 哉

化学輸送反応における単結晶の合成とは反応管に温度勾配をつけることにより生ずるエンタルピーの差を利用して、出発物質を異なる温度の領域に輸送する過程で単結晶を成長させようとするものである。ところが最近、異なる温度領域への輸送が行われずに、出発原料中で単結晶が成長する系があることが見いだされた。この新しい結晶成長の機構の解明のために種々の実験が行われた。その中で特に化学組成のずれが生ずるということに注目してその理由を次のように考えて、モデルを求め統計力学的な計算を進めた。

- 従来バルクの結晶のみに注目して平衡条件を考えていた（無限大結晶の仮定）。これを有限結晶と考え表面エネルギーを導入する。
- 個々の結晶が気相成分を媒介として平衡にきわめて近い条件で結晶が成長する（微結晶の蒸発および大結晶への結合）。
- 結晶の形状は立方体とし、大小の結晶においても形状は変化しないとする。
- 結晶は2種の原素AとBから成っており、相互に占有位置を換えることができるとする。
- 計算はBragg - Williams の近似を用いて行う。

このような条件のもとで、結晶サイズ、組成、温度の関係式が求められる。

特に大きなサイズの結晶は無限大であるとするとき次のような少し簡便な式が導かれる。

$$\left(\frac{M_s}{\alpha_s \rho_s}\right)^{1/3} \frac{1}{\alpha_s E_A} = X_l^2 - X_s^2 Z\varphi - 2Z\varphi \left\{ \frac{(1-X_l)^{4/3}}{[(1-X_l)^{2/3} + X_l^{2/3}]^2} - \frac{(1-X_s)^{4/3}}{[(1-X_s)^{2/3} + X_s^{2/3}]^2} \right\} + KT \log (X_l / X_s)$$

ここで $X_l$ 、 $X_s$ は大小結晶の化学組成、 $M_s$ は小結晶の化学式量、 $\alpha_s$ はA成分の比率、 $\rho_s$ は小結晶の密度、 $a_s$ は小結晶のサイズ、 $E_A$ はA原子間の結合エネルギー、 $\varphi$ はAとBの間のエネルギー、 $Z$ は配位数である。

組成変化に対するそれぞれのパラメーターの影響を見るためのプログラムをリストに示すように作製した。その計算結果を図に示す。

この計算結果は、実験によって得られたものと定性的に合致することを示している。

以上のように、本プログラムは、化学輸送反応中の大小結晶間の組成のずれを、結晶サイズおよび温度をパラメーターとして求めることを特徴としており、他のパラメーターを適当に選択することにより、他の系についても応用できるものと思われる。

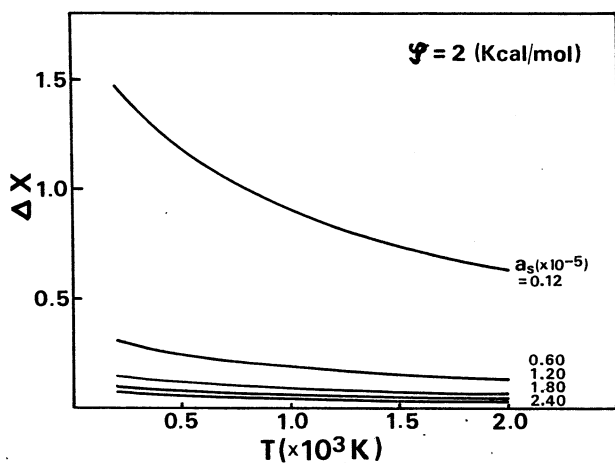


Fig. 1 Theoretical feature of temperature dependency on the compositional difference

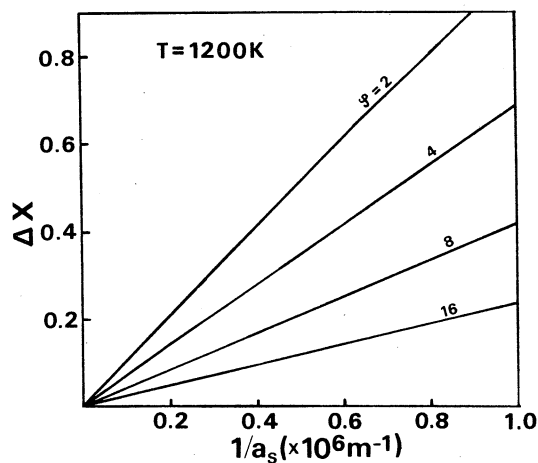


Fig. 2 Theoretical feature of size effect on the compositional difference

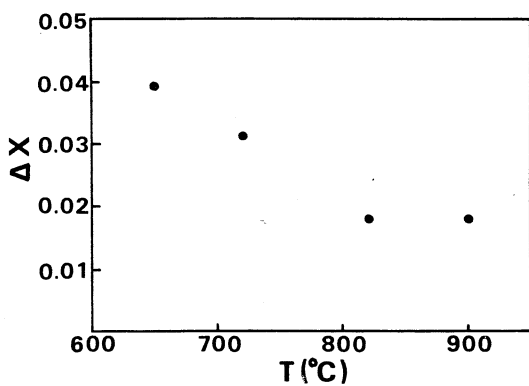


Fig. 3 Experimental values of temperature dependency on the compositional difference

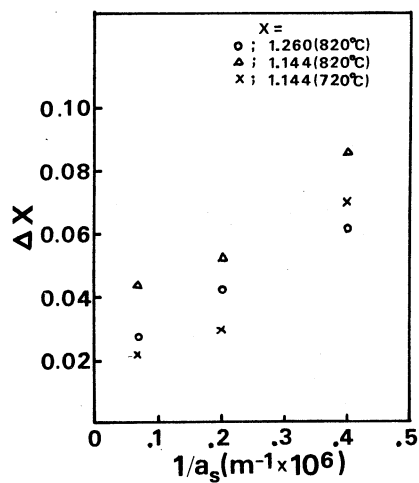


Fig. 4 Crystal size effect on the chemical composition difference

## プ ロ グ ラ ム 登 録 表

(様式1)

ライブラリ名	(センタ記入)	作成日付	
プログラム名	化学輸送反応中における結晶組成の計算		
作成者氏名	林 宏哉, 小橋 哲也, 野口 博司, 宮宇地 浩二		
形式	(a) コンプリート・プログラム      c 関数副プログラム b サブルーチン・副プログラム      d その他		
使用機器	a 磁気テープ 入力( )本, 出力( )本 b CRTの種類( ) c 磁気ディスク・ファイル( )個 d その他( )		
プログラムサイズ	a ソース・プログラム( 68 )行 b オブジェクト・プログラム( )KW		
使用言語	a FLAG                      d COBOL                      g LISP (b) FORTRAN IV      e METASYMBOL      h PL/I c FORTRAN 77      f PASCAL      i その他( )		
処理形態	(a) バッチ処理専用                      c バッチ・TSS兼用 b TSS専用		
使用条件等	(枠内に入りきらない場合は, A4サイズのもので説明を添付してください)		

## 4. 金属錯体の X-線結晶解析

化学科助教授 柴原隆志

### 1. はじめに

モリブデンを含む新しい錯体を合成し、X-線結晶解析によりその構造を明らかにしたので報告する。

### 2. COSMO-700Ⅲへの conversion

計算に必要なプログラムは前回報告した RSSFR-5 および HBL5-M に加えて UNICS<sup>1)</sup> の DAPH を本学情報処理センター MELCOM-COSMO-700Ⅲ に conversion して用いた。このプログラムは原子間距離、原子間角度、平面の間の dihedral angle 等、結晶構造の description に必要なほとんど全てのデータを計算することができる。使用方法は UNICS を参照されたい。

### 3. イオウ架橋をもつモリブデン(V)シュウ酸錯体、 $K_6[\{Mo_2O_3S(ox)_2\}_2(ox)] \cdot 10H_2O(I)$ および $K_6[\{Mo_2O_2S_2(ox)_2\}_2(ox)] \cdot 10H_2O(II)$ の X-線結晶解析

錯体の合成および強度データ採取方法については省略する。

表 1 に結晶学的データを示す。図 1 に I, II の分子構造を示す。図 2 に  $Cs_2[Mo_2O_2S_2(ox)_2(H_2O)_2] \cdot 2H_2O(III)^{2)}$  および  $Ba[Mo_2O_4(ox)_2(H_2O)_2] \cdot 3H_2O(IV)^{3)}$  の分子構造を示す。表 2 には DAPH を用いて計算したいくつかの原子間距離、角度および dihedral angle を示した。マロン酸錯体  $K_6[\{Mo_2O_4(mal)_2\}_2(mal)] \cdot 4H_2O(V)^{4)}$  の値もつけ加えてある。表 2 に見られるように III, IV の場合には末端酸素  $O_t$  のトランス効果が見られないが、I, II の場合には、はっきりとトランス効果が見られる。 $Mo \angle \overset{X}{Y} Mo$  の dihedral angle を見ると I, II の場合は III, IV の場合にくらべて明らかに大きく、これは ox による架橋の影響と思われる。赤外線吸収スペクトルにも I, II と III, IV の 2 つのグループの間に明らかな差がある。1200 ~ 1500  $cm^{-1}$  に現われる吸収帯を表 3 に示す。

表 1

	I	II
Crystal system	Monoclinic	Orthorhombic
a	13.640(3) Å	20.642(4) Å
b	20.296(3)	15.370(3)
c	15.213(4)	12.797(3)
$\beta$	106.42(2)°	90.0°
V	4039.76 Å <sup>3</sup>	4059.81 Å <sup>3</sup>
Space group	C2/c	Pbca
Z	4	4
R	0.048	0.035

表 2

	Mo-Mo (Å)	Mo-Ot (Å)	Mo-Ob (Å)	Mo-Sb (Å)	Mo-O <sup>a</sup> (Å)	Mo-O <sup>b</sup> (Å)	(A)Ot-Mo-O <sup>b</sup> (°)	Dihedral angle (°)
<b>I</b>	2.667	1.685	1.926	2.326	2.107	2.301	170.6	168.5
<b>II</b>	2.829	1.692		2.323	2.114	2.315	173.1	172.4
<b>III</b>	2.822	1.697		2.314	2.163	2.160	158.4	155.6
<b>IV</b>	2.541	1.70	1.91		2.14	2.11	151	151
<b>V</b>	2.555	1.684	1.934		2.081	2.321	171	161

a) cis to Ot b) trans to Ot

表 3  
(cm<sup>-1</sup>)

<b>I</b>	1394vs	1324s	1245m
<b>II</b>	1390vs	1320s	1238m
<b>III</b>	1398vs	1265s	
<b>IV</b>	1422vs	1280s	

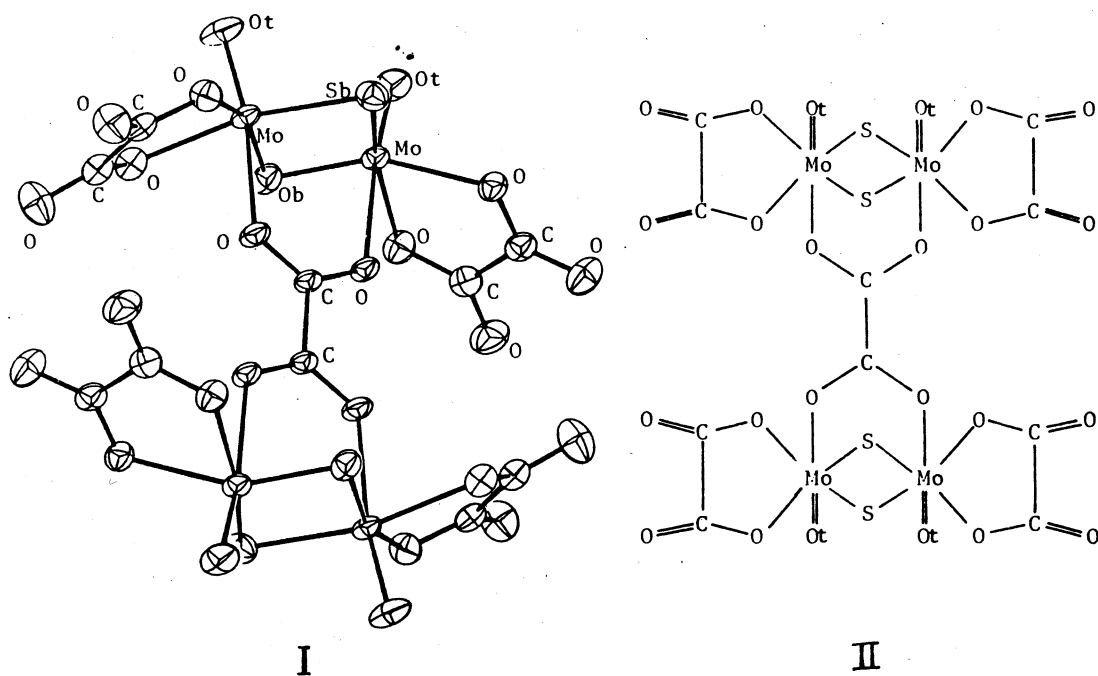
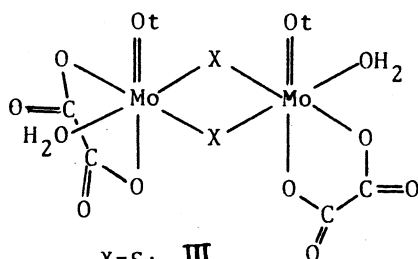


图 1



X=S: **III**

X=O: **IV**

图 2

【参考文献】

- (1) The Universal Crystallographic Computation Program System (UNICS),  
The Crystallographic Society of Japan (1967).
- (2) W. S. McDonald, *Acta Crystallogr., Sect. B*, 2850 (1978).
- (3) F. A. Cotton and S. M. Morehouse, *Inorg. Chem.*, 4, 1377 (1965).
- (4) T. Shibahava, H. Kuroya, K. Matsumoto and S. Ooi, *Inorg. Chim. Acta*, 54,  
L 75 (1981).



# プログラム登録表

(様式1)

ライブラリ名	(センタ記入)	作成日付	1981. 7. 22
プログラム名	DAPH		
作成者氏名	柴原隆志 (conversionのみ)		
形式	(a) コンプリート・プログラム      c 関数副プログラム b サブルーチン・副プログラム      d その他		
使用機器	a 磁気テープ 入力 ( ) 本, 出力 ( ) 本 b CRTの種類 ( ) c 磁気ディスク・ファイル ( ) 個 d その他 ( )		
プログラムサイズ	a ソース・プログラム ( 563 ) 行 b オブジェクト・プログラム ( ) KW		
使用言語	a FLAG                      d COBOL                      g LISP (b) FORTRAN IV      e METASYMBOL      h PL/I c FORTRAN 77      f PASCAL      i その他 ( )		
処理形態	(a) バッチ処理専用      c バッチ・TSS兼用 b TSS専用		
使用条件等	(枠内に入りきらない場合は、A4サイズのもので説明を添付してください)		

## 5. 非線形力学系における不規則現象

電子理学科助手 太田垣 博 一

### 1. 問題の定式化

本報告は、二次元の相空間  $Z = (x, y)$  において微分方程式

$$(1) \begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = \beta x - \alpha x^3 + \varepsilon (f' \cos \lambda t - \delta' y) \end{cases} \quad \left( \cdot = \frac{d}{dt} \right)$$

によって記述されている非線形力学系の不規則挙動について考察したものである。ただし初期条件は

$$(2) \begin{cases} x(t_0) = x_0 \\ y(t_0) = y_0 \end{cases}$$

として与えられているものとする。(ここでは実在のシステムとの対応については省略する。) 式(1)の力学系は原点  $(0, 0)$  を鞍点としてもっており、また  $\varepsilon = 0$  なるとき  $(\pm \sqrt{\beta/\alpha}, 0)$  を中心点としてもっている。式(1)の力学系に対し homoclinic 点 (又は集合) が存在するとき、この力学系に不規則挙動が発生すると考えられる。それ故ここでは  $\varepsilon$  の摂動傾の存在に対し鞍点  $(0, 0)$  に関する安定多様体  $M^{(s)}$  と不安定多様体  $M^{(u)}$  の解析的表現を行い、計算機を援用することによって homoclinic 点の出現条件を導出した。さらに、導出された条件のもとで、式(1)の力学系に不規則挙動の存在することを確認するためにシミュレーション実験を行った。

### 2. 安定, 不安定多様体の解析的表現

摂動パラメータ  $\varepsilon > 0$  なるときに式(1)に存在する安定多様体と不安定多様体の間の距離は

$$(3) \quad \Delta_\varepsilon(t_0) = \varepsilon \left[ \frac{4\beta\sqrt{\beta}}{3\alpha} \delta' - f' \pi \lambda \sqrt{\frac{\beta}{\alpha}} \operatorname{sech}(\pi \lambda) \sin \omega t_0 \right]$$

で与えられる。また、安定, 不安定多様体の上の点は、 $\varepsilon = 0$  としたときに存在するセパトリックス (これは  $\varepsilon \rightarrow 0$  としたとき安定, 不安定多様体がセパトリックスに接近すると考えてよい) と直交するという条件は、 $(x_\varepsilon^+(t_0), y_\varepsilon^+(t_0)), (x_\varepsilon^-(t_0), y_\varepsilon^-(t_0))$  をそれぞれ安定, 不安定多様体の上の点としたとき

$$(4) \quad p_0(y_0(t_0))(x_\varepsilon^+(t_0) - x_\varepsilon^-(t_0)) + q_0(x_0(t_0))(y_\varepsilon^+(t_0) - y_\varepsilon^-(t_0)) = 0$$

と表わされる。ただしここで

$$p_0 = y_0(t_0), \quad q_0 = \beta x_0(t_0) - \alpha x_0^3(t_0)$$

であり、 $(x_0(t_0), y_0(t_0))$  はセパトリックスの上を動く式(1) ( $\varepsilon = 0$ ) の解軌道である。式(4)と  $\Delta_\varepsilon(t_0)$  を定義している式

$$(5) \quad \Delta_\varepsilon(t_0) = -q_0(x_0(t_0))(x_\varepsilon^+(t_0) - x_\varepsilon^-(t_0)) + p_0(y_0(t_0))(y_\varepsilon^+(t_0) - y_\varepsilon^-(t_0))$$

を組合わせると安定多様体と不安定多様体の上の点の座標は次式によって表わされる。

$$(6-a) \quad x_{\varepsilon}^{+}(t_0) = x_0(t_0) - \varepsilon \frac{q_0(x_0(t_0))}{q_0^2(x_0(t_0)) + p_0^2(y_0(t_0))} \Delta_{\varepsilon}^{+}(t_0)$$

$$(6-b) \quad y_{\varepsilon}^{+}(t_0) = y_0(t_0) + \varepsilon \frac{p_0(y_0(t_0))}{q_0^2(x_0(t_0)) + p_0^2(y_0(t_0))} \Delta_{\varepsilon}^{+}(t_0)$$

$$(7-a) \quad x_{\varepsilon}^{-}(t_0) = x_0(t_0) - \varepsilon \frac{q_0(x_0(t_0))}{q_0^2(x_0(t_0)) + p_0^2(y_0(t_0))} \Delta_{\varepsilon}^{-}(t_0)$$

$$(7-b) \quad y_{\varepsilon}^{-}(t_0) = y_0(t_0) + \varepsilon \frac{p_0(y_0(t_0))}{q_0^2(x_0(t_0)) + p_0^2(y_0(t_0))} \Delta_{\varepsilon}^{-}(t_0)$$

ただしここで  $\Delta_{\varepsilon}^{+}(t_0)$ ,  $\Delta_{\varepsilon}^{-}(t_0)$  は  $\Delta_{\varepsilon}^{+}(t_0) - \Delta_{\varepsilon}^{-}(t_0) = \Delta_{\varepsilon}(t_0)$  を満足しており

$$(8) \quad \Delta_{\varepsilon}^{+}(t_0) = -\int_{t_0}^{\infty} y_0(t) [f' \cos \lambda t - \delta' y_0(t)] dt$$

$$(9) \quad \Delta_{\varepsilon}^{-}(t_0) = \int_{-\infty}^{t_0} y_0(t) [f' \cos \lambda t - \delta' y_0(t)] dt$$

によって与えられる。ただし

$$(10) \quad y_0(t) = -\sqrt{\beta} \frac{c_0 e^{\sqrt{\beta}(t-t_0)} - c_1 e^{-\sqrt{\beta}(t-t_0)}}{\{c_0 e^{\sqrt{\beta}(t-t_0)} + c_1 e^{-\sqrt{\beta}(t-t_0)}\}^2}$$

$$c_0 = \sqrt{\beta} - \frac{y_0(t_0)}{x_0(t_0)}, \quad c_1 = \sqrt{\beta} + \frac{y_0(t_0)}{x_0(t_0)}$$

である。式(6), (7)によって多様体  $M^{(s)}$  と  $M^{(u)}$  を計算するプログラムを以下に示す。

```

1.      H=0.01
2.      N=400
3.      AL=100.
4.      BE=10.
5.      D1=1.
6.      F1=0.9
7.      W=3.76
8.      EPS=1.
9.      PAI=3.14159265
10.     T0=0.
11.     DO 10 IJ=1,200
12.     T=0.
13.     TI=SQRT(BE)*(-T0)
14.     X10=SQRT(2.*BE/AL)/COSH(TI)
15.     X20= BE*SQRT(2./AL)/COSH(TI)*TANH(TI)
16.     P00=X20
17.     Q00=BE*X10-AL*X10*X10*X10
18.     P10=0.
19.     Q10=F1*COS(W*T)-D1*X20
20.     SUMI=Q00*P10-Q10*P00
21.     WRITE(6,15) T0
22.     15  FORMAT(1H , '***', 2X, 'T0=', F15.8)
23.     WRITE(6,13) TI, X10, X20, P00, Q00, Q10, SUMI
24.     13  FORMAT(1H , 2X, 'TI=', I5, 2X, 'X10=', F15.8, 2X, 'X20=', F15.8,
25.     1  2X, 'P00=', F15.8, 2X, 'Q00=', F15.8, 2X, 'Q10=', F15.8, 2X, 'SUMI=',
26.     1  F15.8)
27.     TF=SQRT(BE)*(2.*N+H-T0)
28.     X1T=SQRT(2.*BE/AL)/COSH(TF)

```

```

29.      X2T= BE*SQRT(2./AL)/COSH(TF)*TANH(TF)
30.      POT=X2T
31.      QOT=BE*X1T-AL*X1T*X1T*X1T
32.      P1T=0.
33.      Q1T=F1*COS(W*(2.*N*H))-D1*X2T
34.      SUMT=QOT*P1T-Q1T*POT
35.      WRITE(6,14) TF,X1,X2T,POT,QOT,Q1T,SUMT
36. 14  FORMAT(1H ,2X,'TF=',I5,2X,'X1T=',F15.8,2X,'X2T=',F15.8,
37. 1     2X,'POT=',F15.8,2X,'QOT=',F15.8,2X,'Q1T=',F15.8,2X,'SUMT=',
38. 1     F15.8)
39.      SUMGO=0.
40.      SUMGE=0.
41.      DO 1 I=1,N
42.      T=T+H
43.      T1=SQRT(BE)*(T-T0)
44.      X1=SQRT(2.*BE/AL)/COSH(T1)
45.      X2= BE*SQRT(2./AL)/COSH(T1)*TANH(T1)
46.      U1=X1*COS(W*T)-X2/W*SIN(W*T)
47.      U2=X1*SIN(W*T)+X2/W*COS(W*T)
48.      P0=X2
49.      Q0=BE*X1-AL*X1*X1*X1
50.      P1=U.
51.      Q1=F1*COS(W*T)-D1*X2
52.      G=-P0*Q1+P1*Q0
53.      SUMGO=SUMGO+G
54.      HX1X2=X2*X2/2.-BE*X1*X1/2.+AL*X1*X1*X1*X1/4.
55.      T=T+H
56.      T1=SQRT(BE)*(T-T0)
57.      X1=SQRT(2.*BE/AL)/COSH(T1)
58.      X2= BE*SQRT(2./AL)/COSH(T1)*TANH(T1)
59.      U1=X1*COS(W*T)-X2/W*SIN(W*T)
60.      U2=X1*SIN(W*T)+X2/W*COS(W*T)
61.      P0=X2
62.      Q0=BE*X1-AL*X1*X1*X1
63.      P1=0.
64.      Q1=F1*COS(W*T)-D1*X2
65.      G=-P0*Q1+P1*Q0
66.      SUMGE=SUMGE+G
67.      HX1X2=X2*X2/2.-BE*X1*X1/2.+AL*X1*X1*X1*X1/4.
68. 1 CONTINUE
69.      DELTA1=4.*D1*BE*SQRT(BE)/(3.*AL)+F1*PAI*W*SQRT(2./AL)*SIN(W*T0)
70. 1 COSH(PAI*W/(2.*SQRT(BE)))
71.      A=SQRT(Q00*Q00+P00*P00)
72.      SUMG=(SUMI+SUMT+4.*SUMGO+2.*SUMGE)*H/3.
73.      DELTAP=SUMG
74.      DELTAN=DELTA1-DELTAP
75.      DSEP=DELTA1/A
76.      DSEPP=DELTAP/A
77.      DSEPN=DELTAN/A
78.      X1EP=X10-Q00/(Q00*Q00+P00*P00)*EPS*DELTAP
79.      X2EP=X20+P00/(Q00*Q00+P00*P00)*EPS*DELTAP
80.      X1EN=X10-Q00/(Q00*Q00+P00*P00)*EPS*DELTAN
81.      X2EN=X20+P00/(Q00*Q00+P00*P00)*EPS*DELTAN
82.      WRITE(6,4) HX1X2,DELTA1
83. 4  FORMAT(1H ,2X,'HX1X2=',F15.10,2X,'DELTA1=',F15.10)
84.      WRITE(6,5) A,DSEP,DELTAP,DELTAN,DSEPP,DSEPN
85. 5  FORMAT(1H ,2X,'A=',F15.8,2X,'DSEP=',F15.8,2X,'DELTAP=',F15.8,
86. 1     2X,'DELTAN=',F15.8,2X,'DSEPP=',F15.8,2X,'DSEPN=',F15.8)
87.      WRITE(6,6) X1EP,X2EP,X1EN,X2EN
88. 6  FORMAT(1H ,2X,'X1EP=',F15.8,2X,'X2EP=',F15.8,2X,'X1EN=',F15.8,
89. 1     2X,'X2EN=',F15.8)
90.      T0=T0-0.01
91. 10 CONTINUE
92.      STOP
93.      END

```

プ ロ グ ラ ム 登 録 表

(様式 1)

ライブラリ名	(センタ記入)	作成日付	
プログラム名	安定・不安定多様体の計算		
作成者氏名	太田垣 博 一		
形式	(a) コンプリート・プログラム          c 関数副プログラム b サブルーチン・副プログラム          d その他		
使用機器	a 磁気テープ 入力( )本, 出力( )本 b CRTの種類( ) c 磁気ディスク・ファイル( )個 d その他( )		
プログラムサイズ	a ソース・プログラム( )行 b オブジェクト・プログラム( ) KW		
使用言語	a FLAG    d COBOL    g LISP (b) FORTRAN IV    e METASYMBOL    h PL/I c FORTRAN 77    f PASCAL    i その他( )		
処理形態	(a) バッチ処理専用    c バッチ・TSS兼用 b TSS専用		
(枠内に入りきらない場合は、A 4サイズのもので説明を添付してください)			

## 6. 古典分散式による赤外反射率の解析

「赤外反射率から古典振動子モデルにより、  
フォノンパラメーターを決定する。」

基礎理学科助教授 若村 国夫  
「 助手 財部 健一

結晶の原子的側面であるフォノンを調べる重要な方法の一つとして赤外反射率の測定がある。得られたデータから、計算機を用いて、フォノンパラメーターを求める事が行われるが、そのうちの一つである古典分散式によるものを示す。

### 1. 原理と計算モデル

結晶中のイオンが、バネ定数  $k$ 、速度に比例する力  $\gamma \dot{x}$ 、電荷  $e^*$  を持って互いに独立に運動している。結晶中の分極場を合わせて考える時、運動方程式と連立させて解くと次式が得られる。

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} + \sum_j (S_j^2 \omega_j^2 / (\omega_j^2 - \omega^2 + i\gamma_j \omega))$$

ここに、 $\epsilon_{\infty}$ 、 $S_j$ 、 $\gamma_j$ 、 $\omega_j$  はそれぞれ、光学的誘電率、振動子強度、減衰係数、 $j$  番目の赤外活性モードの振動数である。物質に光をあてた時、その反射率  $R$  は、 $\epsilon(\omega)$  の実数部  $\epsilon_1$ 、虚数部  $\epsilon_2$  を用いて次のように書ける。

$$R = ((n-1)^2 + \kappa^2) / ((n+1)^2 + \kappa^2)$$

$$\epsilon_1 + i\epsilon_2 = (n + i\kappa)^2$$

故に、 $\epsilon_{\infty}$ 、 $S_j$ 、 $\gamma_j$ 、 $\omega_j$  をフィッティングパラメーターとして  $\epsilon(\omega)$  を計算し、これより  $R$  を各  $\omega$  の所で計算できる。

### 2. プログラムの構成

上記パラメーターを入力として各  $\omega$  での  $R$  を計算し、観測値と比較して、全  $\omega$  の領域で  $|R(\text{計算}) - R(\text{観測})|$  が一定値より小さくなる迄、パラメーターを変えながら、計算を行う。この条件を満たす  $\epsilon$  より横モード振動数、縦モード振動数等が決定される。

このためのプログラムを以下に示す。

```

1.      C      CALCULATION OF ROOT FOR F(X)                                KPVA
2.      SUBROUTINE CALC XS
3.      COMMON XL,XS,A,AS(40),T(10),R,Z(10),I,J,K,XM
4.      F(Y1,Y2,Y3,Y4,Y5,Y6)=Y1-Y2*(Y3**2-Y4**2)+2.0*Y2*(EXP(1.33333333*AL
5.      1OG(1.0-Y3))/(EXP(0.66666666*ALOG(1.0-Y3))+EXP(0.66666666*ALOG(Y3))
6.      2)**2-EXP(1.33333333*ALOG(1.0-Y4))/(EXP(0.66666666*ALOG(1.0-Y4))+EX
7.      3P(0.66666666*ALOG(Y4))**2)-Y5*Y6*ALOG(Y3/Y4)
8.      X1=XL
9.      X2=XS
10.     Q=Z(I)
11.     AP=AS(K)
12.     AP=A/AP
13.     P=T(J)
14.     12 IF(F(AP,Q,XL,X1,R,P))*F(AP,Q,XL,X2,R,P)) 1,3,2
15.     1 XM=(X1+X2)/2.0
16.     IF(F(AP,Q,XL,X1,R,P))*F(AP,Q,XL,XM,R,P)) 4,6,5
17.     4 X2=XM
18.     11 IF(X1-X2,GE,0.00001) GO TO 1
19.     7 XM=X1
20.     GO TO 10
21.     2 GO TO 13
22.     13 XM=1.0
23.     GO TO 10
24.     5 X1=XM
25.     GO TO 11
26.     3 IF(F(AP,Q,XL,X1,R,P)) 8,7,8
27.     8 XM=X2
28.     GO TO 10
29.     6 IF(F(AP,Q,XL,X1,R,P)) 10,9,10
30.     9 XM=X1
31.     10 RETURN
32.     END

```

```

1.      C      MAIN PROGRAM
2.      DIMENSION DX(10,10,40),TITLE(20)
3.      COMMON XL,XS,A,AS(40),T(10),R,Z(10),I,J,K,XM
4.      READ(5,200) TITLE
5.      READ(5,100) A,A2,Y,PJ,XLO,XSO
6.      100 FORMAT(3F10.6,F10.1,2F10.6)
7.      200 FORMAT(20A2)
8.      Z1=0.2
9.      T1=2.0
10.     A1=1.2
11.     R=1.987
12.     DO 10 I=1,10
13.     Z(I)=Y*Z1*FLOAT(I)
14.     DO 20 J=1,10
15.     T(J)=PJ*T1*J
16.     DO 30 K=1,40
17.     AS(K)=A2*A1*K
18.     XL=XLO
19.     XS=XSO
20.     CALL CALC XS
21.     DX(I,J,K)=XL-XM
22.     30 CONTINUE
23.     20 CONTINUE
24.     10 CONTINUE
25.     DO 40 JN=1,10
26.     WRITE(6,15) TITLE,T(JN)
27.     15 FORMAT(1H1,20A2/1H,2HT=,F10.5)
28.     WRITE(6,25) (Z(IN),IN=1,10)
29.     25 FORMAT(1H0,2HZ=,6X,10(F10.5,2X))
30.     DO 50 KN=1,40
31.     WRITE(6,35) AS(KN),(DX(IM,JN,KN),IM=1,10)
32.     35 FORMAT(1H,3HAS=,F10.8/1H,8X,10(F10.6,2X))
33.     50 CONTINUE
34.     40 CONTINUE
35.     STOP
36.     END

```

# プログラム登録表

(様式1)

ライブラリ名	(センタ記入)	作成日付	
プログラム名	古典振動子モデルによるフォノンパラメーターの決定		
作成者氏名	若村 国夫, 財部 健一		
形式	(a) コンプリート・プログラム      c 関数副プログラム b サブルーチン・副プログラム      d その他		
使用機器	a 磁気テープ 入力( )本, 出力( )本 b CRTの種類( ) c 磁気ディスク・ファイル( )個 d その他( )		
プログラムサイズ	a ソース・プログラム( )行 b オブジェクト・プログラム( )KW		
使用言語	a FLAG                                  d COBOL                                  g LISP (b) FORTRAN IV      e METASYMBOL      h PL/I c FORTRAN 77      f PASCAL      i その他( )		
処理形態	(a) バッチ処理専用                                  c バッチ・TSS兼用 b TSS専用		
使用条件等	(枠内に入りきらない場合は, A4サイズのもので説明を添付してください)		

1.

大は線ので分えるしたDの方と呼とし資源といとと

2.

たけは



## 7. 数理計算法における分解原理

電子理学科教授 成久洋之

### 1. まえがき

大規模な線形計画問題の解法にダンチツヒ・ウルフの提案した分解原理がよく用いられる。これは線形構造の特殊性を利用した考え方で各グループ毎に独立した問題構造を活用させようとするものである。

分解原理を経営学的観点から捉えるとき、企業内での本部と事業部との関連性を示す理論ともいえる。すなわち、本部は共通資源の利用と共通目標への貢献という見地から、各事業部を統轄する。したがって、各事業部は本部の制約を破らない範囲での意志決定が認められる。

Dantzig-Wolfeの方法は価格・数量型のアルゴリズムとされているのに対し、A. ten Kateの方法は数量・価格型のそれとみなされている。このテン・ケイトの方法は別名、直接資源配分法と呼ばれているが、できればこの直接配分法の方がアルゴリズムとして極めて望ましい。その理由としては共通資源の配分を通じて各事業部を管理しようとしていることと、さらに配分された共通資源の利用法について各事業部に決定権を分譲することになるので分権システムとしても好ましいといえよう。

以上の観点から、本研究では直接分割法による分権システムの最適化アルゴリズムを開発しようとするものであるが、A. ten Kateのそれのように、Dantzig-Wolfeの双対版ではなく、もっとより直接的な配分法を各事業部の利益情報のみにより達成させようとするものである。

### 2. 基本的考え方

つぎの線形計画問題が与えられたものとする。

$$\begin{aligned} [T] \quad & \max \quad \sum_{k=1}^n C_k x_k \\ & \text{s. t.} \quad B_k x_k \leq b_k \\ & \quad \quad \sum_{k=1}^n A_k x_k \leq b \\ & \quad \quad x_k \geq 0, \quad k = 1, \dots, n \end{aligned}$$

ただし、 $x_k$ 、 $C_k$  は  $j_k$  次元ベクトル、 $b_k$  は  $m_k$  次元ベクトル、 $b$  は  $m$  次元ベクトルとし、 $B_k$  は  $m_k \times j_k$  行列、 $A_k$  は  $m \times j_k$  行列とする。

この問題はつぎのように2つの問題として考えられる。

$$\begin{aligned} [CP] \quad & \max \quad \sum_{k=1}^n z_k \\ & \text{s. t.} \quad \sum_{k=1}^n A_k x_k \leq b, \quad x_k \geq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{〔DP〕}_k \quad & \max \quad z_k = \mathbf{C}_k \mathbf{x}_k \\ & \text{s. t.} \quad \mathbf{B}_k \mathbf{x}_k \leq \mathbf{b}_k, \quad \mathbf{x}_k \geq \mathbf{0} \end{aligned}$$

ただし、 $k = 1, 2, \dots, n$  とする。

ここで、〔CP〕は中央部、〔DP〕<sub>k</sub> は k 事業部の問題として捉え得るので、〔DP〕<sub>k</sub> の実行可能領域  $F_k$  の端点集合を  $EF_k$  としよう。

$$EF_k = \{x_k^1, x_k^2, \dots, x_k^{l_k}\}$$

$F_k$  が凸領域であるとし、 $F_k$  と  $EF_k$  の凸包が等しいものと仮定すると、 $F_k$  に含まれる任意の解  $x_k$  は必ず  $EF_k$  の要素の凸結合で表わされるはずである。すなわち、

$$\mathbf{x}_k = \sum_{t=1}^{l_k} \lambda_{kt} \mathbf{x}_k^t, \quad \sum_{t=1}^{l_k} \lambda_{kt} = 1, \quad \lambda_{kt} \geq 0$$

となっている。これを〔CP〕に代入すると、

$$\sum_k z_k = \sum_k \mathbf{C}_k \mathbf{x}_k = \sum_k \mathbf{C}_k \sum_t \lambda_{kt} \mathbf{x}_k^t = \sum_t \sum_k \mathbf{C}_k \mathbf{x}_k^t \lambda_{kt}$$

$$\sum_k \mathbf{A}_k \mathbf{x}_k = \sum_k \mathbf{A}_k \sum_t \lambda_{kt} \mathbf{x}_k^t = \sum_t \sum_k \mathbf{A}_k \mathbf{x}_k^t \lambda_{kt}$$

として与えられるので、〔CP〕の代わりに

$$\begin{aligned} \text{〔CPT〕} \quad & \max \quad \sum_t \sum_k \mathbf{C}_k \mathbf{x}_k^t \lambda_{kt} \\ & \text{s. t.} \quad \sum_t \sum_k \mathbf{A}_k \mathbf{x}_k^t \lambda_{kt} \leq \mathbf{b} \\ & \quad \sum_t \lambda_{kt} = 1, \quad \lambda_{kt} \geq 0 \\ & \quad t = 1, 2, \dots, l_k \\ & \quad k = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

を満足する  $\lambda_{kt}$  を決定すればよいことになる。ここで、 $z_k^t = \mathbf{C}_k \mathbf{x}_k^t$ 、 $\mathbf{a}_k^t = \mathbf{A}_k \mathbf{x}_k^t$  とすると、〔CPT〕はつぎのように表わせる。

$$\begin{aligned} & \max \quad \sum_{k,t} z_k^t \lambda_{kt} \\ & \text{s. t.} \quad \sum_t \lambda_{kt} = 1, \\ & \quad \sum_{k,t} \mathbf{a}_k^t \lambda_{kt} \leq \mathbf{b} \\ & \quad \lambda_{kt} \geq 0 \\ & \quad t = 1, 2, \dots, l_k, \quad k = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

この問題の双対問題はつぎのようになる。

$$\text{〔CDT〕} \quad \text{mix} \quad \sum \pi_{0k} + \mathbf{b} \boldsymbol{\pi}$$

$$\text{s. t. } \pi_{0k} + \mathbf{a}_k^t \boldsymbol{\pi} \geq z_k^t$$

$$\boldsymbol{\pi} \geq \mathbf{0}$$

ところが、双対定理より

$$\sum \pi_{0k} + \mathbf{b}\boldsymbol{\pi} \geq \sum_{k,t} z_k^t \lambda_{kt}$$

$$\sum \pi_{0k} + \sum_{k,t} \mathbf{a}_k^t \lambda_{kt} \boldsymbol{\pi} \geq \sum_{k,t} z_k^t \lambda_{kt}$$

$$\sum \pi_{0k} + \sum_{k,t} \mathbf{A}_k \mathbf{x}_k^t \lambda_{kt} \boldsymbol{\pi} \geq \sum_{k,t} \mathbf{C}_k \mathbf{x}_k^t \lambda_{kt}$$

$$\sum_k \pi_{0k} + \sum_k \mathbf{A}_k \mathbf{x}_k \boldsymbol{\pi} \geq \sum_k \mathbf{C}_k \mathbf{x}_k$$

となり、

$$(\mathbf{C}_k - \mathbf{A}_k \boldsymbol{\pi}) \mathbf{x}_k \leq \pi_{0k}$$

となる必要がある。つまり、〔CDT〕を満足する $\boldsymbol{\pi}$ は最適解となるはずであり、そのときの〔DP〕<sub>k</sub>は

$$(\mathbf{C}_k - \mathbf{A}_k \boldsymbol{\pi}) \mathbf{x}_k \leq \pi_{0k}$$

となるので、 $k$ 事業部では

$$〔DDP〕_k \quad \max (\mathbf{C}_k - \mathbf{A}_k \boldsymbol{\pi}) \mathbf{x}_k$$

$$\mathbf{B}_k \mathbf{x}_k \leq \mathbf{b}_k, \quad \mathbf{x}_k \geq \mathbf{0}$$

を考慮している事に等しい。

以上の記述より、〔T〕の問題を解くための手順はつぎのとおり。

ステップ1 各 $k$ において〔DP〕<sub>k</sub>を解くことにより $EF_k$ を求める。

ステップ2  $EF_k$ の要素に対応する $z_k^t$ ,  $\mathbf{a}_k^t$ を計算する。

ステップ3 中央では〔CDT〕を満足する $\boldsymbol{\pi}$ と $\pi_{0k}$ を計算する。

ステップ4 各 $k$ 事業部において〔DDP〕<sub>k</sub>を解き、ステップ1に戻る。

ただし、ステップ3において、〔CDT〕を満す $\boldsymbol{\pi}$ が求めれば最適解である。

〔T〕において、

$$\mathbf{A}_k \mathbf{x}_k = \mathbf{d}_k$$

とすると、〔T〕は次のように書ける。

$$\max \quad \sum \mathbf{C}_k \mathbf{x}_k$$

$$\text{s. t. } \mathbf{B}_k \mathbf{x}_k \leq \mathbf{b}_k$$

$$\sum \mathbf{d}_k \leq \mathbf{b}, \quad \mathbf{x}_k \geq \mathbf{0}$$

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

そこで、 $k$ 事業部の問題として、

$$\begin{aligned}
 (DP1)_k \quad & \max \quad C_k x_k = z_k \\
 & \text{s.t.} \quad B_k x_k \leq b_k \\
 & \quad \quad A_k x_k \leq d_k, \quad x_k \geq 0
 \end{aligned}$$

と考える。すると、中央部としては

$$\begin{aligned}
 (CP1) \quad & \max \quad \sum z_k \\
 & \text{s.t.} \quad \sum d_k = b
 \end{aligned}$$

となるような  $d_k$  を決定すればよい。

ここで、 $(DP1)_k$  を

$$\begin{aligned}
 & \max \quad C_k x_k = z_k \\
 & \text{s.t.} \quad \begin{bmatrix} B_k \\ A_k \end{bmatrix} x_k \leq \begin{bmatrix} b_k \\ d_k \end{bmatrix}, \quad x_k \geq 0
 \end{aligned}$$

とすると、そのDualは

$$\begin{aligned}
 & \begin{bmatrix} B_k \\ A_k \end{bmatrix}^t y_k \geq C_k^t, \quad y_k \geq 0 \\
 & \begin{bmatrix} b_k \\ d_k \end{bmatrix}^t y_k \rightarrow \min
 \end{aligned}$$

と表わされる。したがって、 $k$  事業部での最適解では

$$z_k = \begin{bmatrix} b_k \\ d_k \end{bmatrix}^t y_k$$

となっているはずである。このことから  $(CP1)$  では、

$$\begin{aligned}
 \max \quad & \sum z_k = \max \sum \begin{bmatrix} b_k \\ d_k \end{bmatrix}^t y_k \\
 \text{s.t.} \quad & \sum d_k = b
 \end{aligned}$$

を満たすように  $d_k$  の配分がとれればよい。これは、目的関数において

$$\sum (b_k^1 y_k^1 + d_k^1 y_k^2) \rightarrow \max$$

と書き直せるわけであるが、

$b_k^1 y_k^1$  の分については本来、各事業部で独自に決定できる部分であるから、中央部として

$$\sum d_k^1 y_k^2 \rightarrow \max$$

の部分を検討すればよい。そこで

$$\begin{aligned}
 \max \quad & \sum d_k^1 y_k^2 \\
 & \sum d_k = b
 \end{aligned}$$

については

$$\sum d_k^i y_k^2 = \mathbf{b}' \mathbf{y}^2$$

となる関係が満足されればよい。

### 3. 新アルゴリズムの概要

ステップ1  $k$  事業部の問題として

$$\begin{aligned} \max \quad & \mathbf{C}_k \mathbf{x}_k = z_k \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{B}_k \mathbf{x}_k \leq \mathbf{b}_k, \quad \mathbf{x}_k \geq 0 \\ & (k = 1, \dots, n) \end{aligned}$$

を解く。この最適解より

$$\mathbf{d}_k = \mathbf{A}_k \mathbf{x}_k$$

を計算し、 $\mathbf{d}_k$  と、 $z_k$  を中央に送る。

ステップ2 中央では

$$\sum \mathbf{d}_k \leq \mathbf{b}$$

となっているかどうかチェックする。

この条件を満足すれば  $\sum z_k$  は最適値である。そうでないとき、

$$\mathbf{d}_k = (d_k^i), \quad \mathbf{b} = (b^i)$$

として、

$$\lambda_k^i = \frac{b^i z^k}{d_k^i \sum z^k}$$

を計算し、

$$\tilde{\mathbf{d}}_k = (d_k^i \lambda_k^i), \quad \sum \tilde{\mathbf{d}}_k = \mathbf{b}$$

となるように  $\mathbf{b}$  の配分を行う。

以上の考え方でのアルゴリズムでは、共通資源  $\mathbf{d}$  の配分の1回分で、約5%前後の誤差範囲の近似解が求められることが判明した。さらに、この中央部での再配分を数回実行すればかなり実用に耐える最適近似解が得られる見通しである。しかも、これは primal な問題での  $z_k$ 、 $\mathbf{d}_k$  を直接に取扱っている関係上より現実的直接配分を指向しており、計算量が少なく済むし、 $\mathbf{d}_k$  の配分さえすれば、各事業部毎の最適計画に委せてしまえる利点をもっている。

# プログラム登録表

(様式1)

ライブラリ名	(センタ記入)	作成日付	
プログラム名	B-O		
作成者氏名	成久 洋之		
形式	<input checked="" type="radio"/> a コンプリート・プログラム      c 関数副プログラム <input type="radio"/> b サブルーチン・副プログラム      d その他		
使用機器	<input type="radio"/> a 磁気テープ 入力 ( ) 本, 出力 ( ) 本 <input type="radio"/> b CRTの種類 ( ) <input checked="" type="radio"/> c 磁気ディスク・ファイル ( ) 個 <input type="radio"/> d その他 ( )		
プログラムサイズ	<input type="radio"/> a ソース・プログラム ( 1,408 ) 行 <input type="radio"/> b オブジェクト・プログラム ( 252 ) KW		
使用言語	<input type="radio"/> a FLAG                      d COBOL                      g LISP <input type="radio"/> b FORTRAN IV      e METASYMBOL      h PL/I <input checked="" type="radio"/> c FORTRAN 77      f PASCAL      i その他 ( )		
処理形態	<input type="radio"/> a バッチ処理専用 <input checked="" type="radio"/> c バッチ・TSS兼用 <input type="radio"/> b TSS専用		
使用条件等	データの入力形式 (1) グループ数 ( $n$ ) を (8I10) で入力 (2) 共通条件数 ( $m^1, m^2, \dots, m^n, m^o$ ) を (8I10) で入力 (3) 各グループの変数の個数 ( $n^1, n^2, \dots, n^n$ ) を (8I10) で入力 (4) 1グループからのデータを (8F10.0) で入力する。		
(枠内に入りきらない場合は、A4サイズのもので説明を添付してください)			

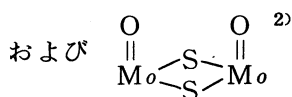
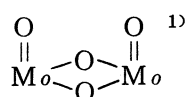
1. そ 持 ぱ 結 2 は じ ら 3 フ ま に 込 た

## 8. モリブデン錯体の X線結晶解析

### —硫黄架橋を持つモリブデン(V)シュウ酸錯体の結晶構造—

化学科助教授 柴原隆志

#### 1. 序 論



骨格を持つシュウ酸錯体 (以下 OX 錯体と略) はすでに

その結晶構造が明らかにされている。今回上記 2 種の錯体と比較する目的で  $\begin{array}{c} \text{O} \quad \quad \text{O} \\ \parallel \quad \quad \parallel \\ \text{Mo} \text{---} \text{O} \text{---} \text{Mo} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{O} \quad \quad \text{O} \end{array}$  骨格を

持つ OX 錯体を合成し、結晶解析を行い、新しい配位形式の tetramer を見出した。さらに ir ス

ペクトルの比較から  $\begin{array}{c} \text{O} \quad \quad \text{O} \\ \parallel \quad \quad \parallel \\ \text{Mo} \text{---} \text{S} \text{---} \text{Mo} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{S} \quad \quad \text{S} \end{array}$  骨格を持つ OX 錯体の tetramer 構造の存在を推定し、これを

結晶解析により確認したので報告する。

#### 2. 錯体の合成:

$\text{K}_6 \{ \{ \text{Mo}_2 \text{O}_3 \text{S} (\text{ox})_2 \}_2 (\text{ox}) \} \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$  (I) および  $\text{K}_6 \{ \{ \text{Mo}_2 \text{O}_2 \text{S}_2 (\text{ox})_2 \}_2 (\text{ox}) \} \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$  (II) は、 $\text{Cs}_2 \{ \text{Mo}_2 \text{O}_2 \text{S}_2 (\text{ox})_2 (\text{H}_2\text{O})_2 \} \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$  (III) の場合<sup>3)</sup>と同様に、それぞれ  $\{ \text{Mo}_2 \text{O}_3 \text{S} (\text{H}_2\text{O}_6) \}^{2+}$  および  $\{ \text{Mo}_2 \text{O}_2 \text{S}_2 (\text{H}_2\text{O})_6 \}^{2+}$  錯体に  $\text{H}_2 \text{ox}$  を加え、 $\text{KOH}$  で中和することにより橙色結晶として得られた。

#### 3. 結晶解析

グラファイトで単色化した  $\text{Mo K}\alpha$  線を用い、フィリップス PW 1100 型自動回折計によって  $\omega$ -スキャン法で強度データを集めた。

表 1

表 1 に結晶学的データを示す。解析

は通常の重原子法で行い、ブロック

近似最小 2 乗法により精密化を行っ

た。

	I	II
Crystal system	Monoclinic	Orthorhombic
a	13.640(3) Å	20.642(4) Å
b	20.296(3)	15.370(3)
c	15.213(4)	12.797(3)
$\beta$	106.42(2)°	90.0°
V	4039.76 Å <sup>3</sup>	4059.81 Å <sup>3</sup>
Space group	C2/c	Pbca
Z	4	4
R	0.048	0.035

図1に I, II の分子構造を示す。図2に III<sup>2)</sup> および Ba[Mo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>(ox)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>] · 3H<sub>2</sub>O (IV)<sup>1)</sup> の分子構造を示す。表2にはいくつかの原子間距離, 角度, および 2 面角を示した。

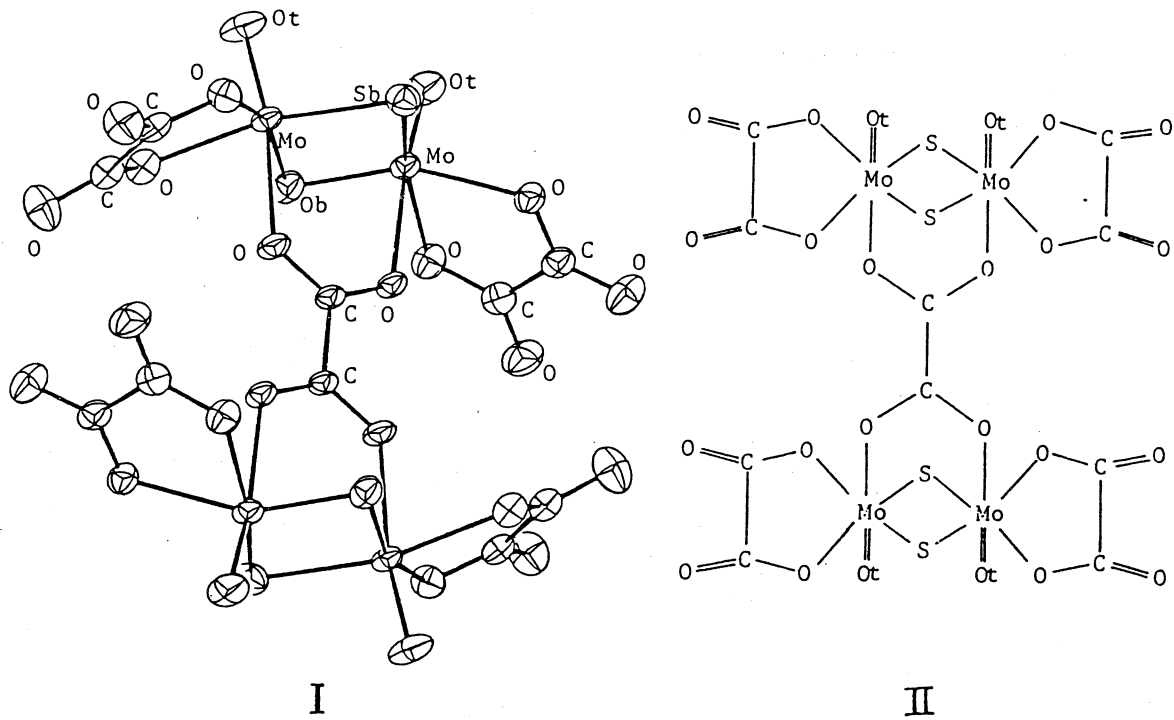


図 1

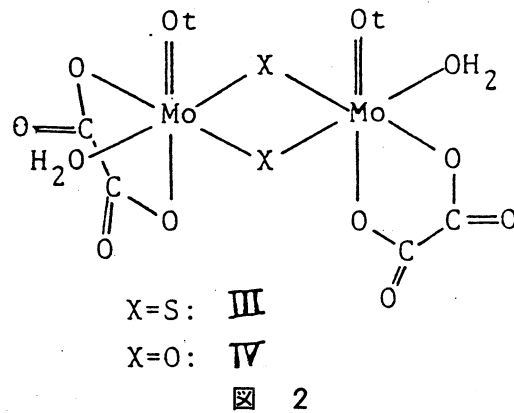


表 2

	Mo-Mo(Å)	Mo-Ot(Å)	Mo-Ob(Å)	Mo-Sb(Å)	Mo-O <sup>a)</sup> (Å)	Mo-O <sup>b)</sup> (Å)	(A)Ot-Mo-O <sup>b)</sup> (°)	Dihedral angle(°)
I	2.667	1.685	1.926	2.326	2.107	2.301	170.6	168.5
II	2.829	1.692		2.323	2.114	2.315	173.1	172.4
III	2.822	1.697		2.314	2.163	2.160	158.4	155.6
IV	2.541	1.70	1.91		2.14	2.11	151	151
V	2.555	1.684	1.934		2.081	2.321	171	161

a) cis to Ot b) trans to Ot

図  
(I  
位  
O-  
良  
ま  
合  
べ  
は  
か  
ir  
現

て  
【  
(1)  
(2)  
(3)  
(4)



(IV)<sup>1)</sup> 図1に示したようにIおよびIIは2つの $\text{Mo}_2\text{O}_3\text{S}(\text{ox})_2$  (Iの場合)または $\text{Mo}_2\text{O}_2\text{S}_2(\text{ox})_2$  (IIの場合)の部分が4座配位子としてのoxイオンにより架橋された構造をしている。架橋ox配位子のC-C結合の中点が結晶学的対称心の上であり、錯体全体の対称は $C_{2h}$ に近い。IとIIは $\mu\text{-O}-\mu\text{-S}$ と $\text{di}-\mu\text{-S}$ につながるところにのみ原子間距離や角度に差異を示すが、他の部分では良く似ている。

表2に見られるようにIII, IVの場合には末端酸素 $\text{O}_t$ のトランス効果が見られないが、I, IIの場合には、はっきりと $\text{O}_t$ のトランス効果が見られる。 $\text{Mo}\overset{\text{X}}{\text{<}}\overset{\text{Y}}{\text{>}}\text{Mo}$ の2面角を見るとI, IIの場合に較べて明らかに大きく、これはoxによる架橋の影響と思われる。 $\text{Mo}-\text{O}$  (架橋oxの酸素)の結合はかなり長いものの、Coordination geometryに関してIII, IVとの間にかなりの差を与えることがわかる。

I, IIの配位形式はマロン酸錯体 $\text{K}_6\{[\text{Mo}_2\text{O}_4(\text{mal})_2]_2(\text{mal})\} \cdot 4\text{H}_2\text{O}^{4)}$ (V)のそれに近い。irスペクトルにもI, IIとIII, IVの2つのグループの間に明らかな差がある。1200~1500 $\text{cm}^{-1}$ に現われる吸収帯を表3に示す。

表 3

	$(\text{cm}^{-1})$		
I	1394vs	1324s	1245m
II	1390vs	1320s	1238m
III	1398vs	1265s	
IV	1422vs	1280s	

結合距離, 角度の算出はUNICSのDAPHプログラムを本学情報処理センターにconversionして用いた。

#### 【参考文献】

- (1) F. A. Cotton and S. M. Morehouse, *Inorg. Chem.*, 4, 1377 (1965).
- (2) W. S. McDonald, *Acta Crystallogr.*, Sect. B, 2850 (1978).
- (3) F. A. Armstrong, T. Shibahara and A. G. Sykes, *Inorg. Chem.*, 17, 189 (1978).
- (4) 柴原隆志, 黒谷寿雄, 松本圭司, 大井俊一郎, 第30回錯塩化学討論会要旨集, P 240 (1980).

# プログラム登録表

(様式1)

ライブラリ名	(センタ記入)	作成日付	
プログラム名	DAPH		
作成者氏名	柴原隆志		
形式	㉠ コンプリート・プログラム      c 関数副プログラム b サブルーチン・副プログラム      d その他		
使用機器	a 磁気テープ 入力 ( ) 本, 出力 ( ) 本 b CRTの種類 ( ) c 磁気ディスク・ファイル ( ) 個 d その他 ( )		
プログラムサイズ	a ソース・プログラム ( ) 行 b オブジェクト・プログラム ( ) KW		
使用言語	a FLAG                                  d COBOL                                  g LISP ㉡ FORTRAN IV      e METASYMBOL      h PL/I c FORTRAN 77      f PASCAL      i その他 ( )		
処理形態	㉢ バッチ処理専用                                  c バッチ・TSS兼用 b TSS専用		
使用条件等	(枠内に入りきらない場合は、A4サイズのもので説明を添付してください)		

序  
 私  
 い  
 ス  
 セ  
 1.  
 部  
 和  
 粒  
 そ  
 こ  
 影  
 ク

## 9. ファインマン-ダイアグラムから 数式への変換プログラムの作成

応用数学科助教授 坂本 薫  
" 助手 青江 俊夫

### 序 論

私達の研究は、物理学と情報学の1つの接点である物理学の計算の完全な自動処理を目的とする。私達はここで特に量子統計学の計算に現われるファインマン-ダイアグラムの自動処理の方法について研究をしている。この論文では主に数式変換プログラムについて述べる。そのプログラムはリヌプで作成しているが、ここでは作成の途中なので主に方法のみ述べるが、一部分プログラムを載せている。<sup>7)</sup>

### 1. 相互作用をしているフェルミ系<sup>1), 2)</sup>

2体力  $V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$  によって相互作用をしているフェルミオンからなる多体系を考える。外部からの場はないと仮定すると、1個の粒子の状態は次のように表わされる。

$$\phi_k = Q^{-\frac{1}{2}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad \epsilon_k = k^2 / 2m$$

このフェルミ系に対して私達は、伝播関数による摂動を表わすダイアグラムを作り、それを部分和によって評価し、準粒子の挙動の結果を調べる。1個の状態が  $\phi_m$  で他の状態が  $\phi_n$  である2個の粒子は互に衝突して各々  $\phi_k, \phi_l$  の状態に散乱される過程に於ける行列要素は次のようである。

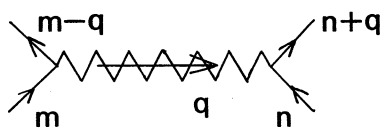
$$V_{klmn} = \int d^3\mathbf{r} \int d^3\mathbf{r}' \phi_k^*(\mathbf{r}) \phi_l^*(\mathbf{r}') V(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \phi_n(\mathbf{r}) \phi_m(\mathbf{r}')$$

そのような相互作用は、ダイアグラム中の波線によって表現される。


 $\equiv (-i) \frac{1}{2} V_{klmn}$

図 1

ここで、左バーテックスは運動量  $\mathbf{m}$  から  $\mathbf{k}$  への1粒子の散乱を示し、右バーテックスはその粒子の影響を受けた  $\mathbf{n}$  から  $\mathbf{l}$  への他の1粒子の散乱を示す。このバーテックスの散乱によって左バーテックスから右バーテックスに運動量  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{m} - \mathbf{k} = \mathbf{l} - \mathbf{n}$  が移動する。図1は



$$\begin{aligned} &\equiv -i \times \frac{1}{2} V_{m-q, n+q, m, n} \\ &= -i \times \frac{1}{2} V_q \end{aligned}$$

図 2

図2のように、書き直される。

フェルミ系の粒子の他に空孔 (hole) について考える。粒子はここではフェルミ面以上のみ存在するものとする。

粒子：粒子-空孔の意味での粒子フェルミ面以上のみ存在する。

空孔：フェルミ面以下にのみ存在する空孔のエネルギーは負で次のようである。

$$\varepsilon_k^{hole} = -\varepsilon_k$$

粒子の伝播に対して、粒子は時間に順行するが空孔は時間に逆行する。粒子や空孔の伝播を表わすのに矢印付きの線を用いるが、空孔は、時間の経過の逆方向に矢印をつける。両方とも状態をあらわすのに運動量を線の横に書く。

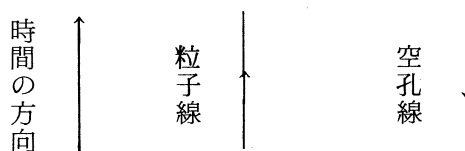


図 3

私達はフェルミ系に於いて、1つの散乱の図即ちファイマン-ダイアグラムが<sup>1)</sup>与えられたとして、数式に変換するプログラムをリスプによって作成する。

## 2. 運動量保存則<sup>1), 2)</sup>

ファインマン-ダイアグラムを式に変換するためには、運動量が保存されるように、運動量を表わす変数を割りつけなければならない。運動量は外線運動量と内線運動量がある。外線運動量は系に入る運動量と系から出ていく運動量がある。内線運動量は右又は左のバーテックスに於いて、そこに入る又は出ていく運動量がある。

外線運動量：外部からバーテックスに入る又は出ていく伝播を表わす線の運動量

内線運動量：右又は左バーテックスから左又は右バーテックスへの伝播をあらわす線の運動量あるいは運動量の移動を表わす波線の運動量

バーテックスに入る運動量を表わす変数をそのままにし、バーテックスから出る運動量を表わす変数にマイナスの符号を付ける。そのとき、外部運動量の総和はゼロで、右又は左バーテックスに於いて、内部運動量の総和はゼロになる。以上の事から、図4のような流れ図のように運動量の変数を運動量が保存されるように決める。図5のような左バーテックスAに於いて、次のような点対で表わす。

存在  
表わ  
をあらわ  
とし  
を表  
は系  
そ  
量あ  
わす  
りに  
り変  
点対

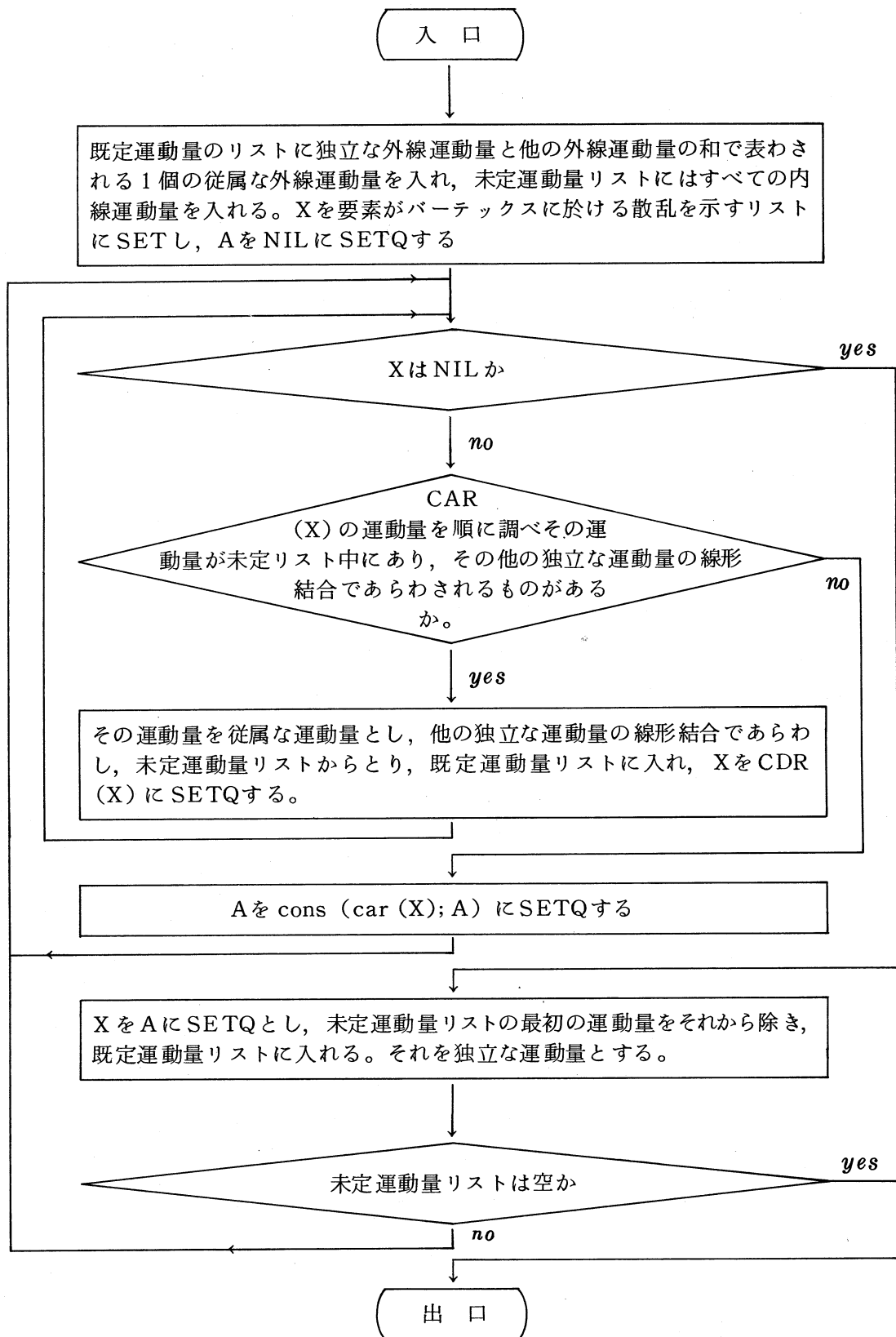


図 4 運動量の決定の流れ図

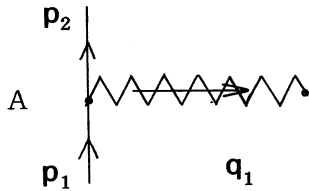


図 5

$((p_1) \cdot (p_2 q_1))$   
 ↑ ↑  
 パーテックスに パーテックスから  
 入る運動量のリスト 出る運動量のリスト

図 6 のようなパーテックス A と B のファイマンダイアグラムを次のように表わす。

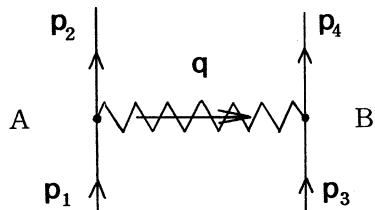


図 6

$((p_1) \cdot (p_2 q)) \quad ((p_3 q) \cdot (p_4))$   
 ↑ ↑  
 A B

### 3. パターン照合について<sup>3), 4), 5)</sup>

パターン照合を使用して、以上得られたリストから数式を表わすリストに変換するプログラムをリスプで作成した。パターン照合はパターンのリストと言明のリストを比較して照合するが、パターンのリスト中に言明にはない>や+のような1文字の特別なアトムが含まれている場合と含まれていない場合がある。パターンと言明を比較する関数MATCHを考える。>や+のような特別なアトムを含まないパターンと言明と比較する場合は両方が全く等しいとき、すなわち同じ場所に同じアトムがあるときに限り、それらは照合する。パターン(OKAYAMA RIKADAIGAKU)をこれと同じ言明(RIKADAIGAKU)と照合させると、当然照合は成功する。すなわちMATCHはTを返す。しかし(OKAYAMA RIKADAIGAKU)と(OKAYAMA SYODAI)と照合させると、これは失敗する。すなわちMATCHはNILを返す。次に特別なアトム>はどのアトムにも照合するという特性を持つと仮定する。同様にアトム+は複数個のアトムと照合すると仮定する。これにより、MATCHの柔軟性が増え、+を含むパターンは、そのパターンよりも多くのアトムを持っている言明と照合することが出来る。MATCHに対する1つの改良は、照合が成功すれば、パターンの中のアトムが値を得るように、一般化することである。>変数は変数をパターン中の1個のアトムに束縛させるが、+変数は変数をパターン中のアトムのリストに束縛させるものとする。K-リスプ<sup>4)</sup>ではアトムを1文字ずつ分解して、それらのリストにする関数が使用できないので>Lや+Lの代りに、(> L)や(+ L)を各々使用する。MATCH((PLUS (> A) (> B)) (PLUS 2 3))はTを返し、Aの値を2に、Bの値を3にCSETする。もう1つの改良は、パターン変数の照合する相手の制限を行う機能を導入し、これまでアトムを書いていたパターンの場所に置く。そのリストは次のように書かれる。

(RESTRICT 述語1 述語2 ……)

又は

(RESTRICT >変数 述語1 述語2 ……)

ここ  
リス  
トム

### 4.

以  
ば、  
の  
関  
次

を  
PA  
ン  
用  
る。

ここで変数は制限によって照合されたアトムに結合される。この場合、以前述べた理由のため、Kリスプは使用できないので京大大型計算センターのLisp 1.5でプログラムを作成した。言明中のアトムに制限をして照合しない関数MATCHをKリスプで作成した。

#### 4. 書き換え則によるリストの要素の変換

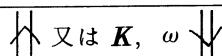








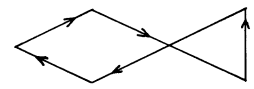
以上で述べたパターン照合の関数MATCHを用いて、リストの要素の置き換えを試みる。たとえば、置き換えられるリストの要素にあらわれるアトムAをすべてアトムBに置き換える関数MATCHINGの関数が作られた。

次に、次のような書き換え則

$$\left( \begin{array}{l} a_1 \rightarrow b_1 \\ a_2 \rightarrow b_2 \\ \vdots \\ a_n \rightarrow b_n \end{array} \right) \text{ を } ((a_1 \ b_1) (a_2 \ b_2) \cdots (a_n \ b_n))$$

をリストで表わして、書き換え則をリストに適用する関数PATTERNMATCHが作成された。PATTERNMATCH(((A B) (B C)) (A B C))は(C C C)を返す。以上のパターン照合する関数を使用して数式に変換するプログラムを作成する。その書き換え則は表1を使用する。

表1 外部ポテンシャルがない場合の相互作用をする多体フェルミオン系

ダイアグラム	因子
$K, \omega$  又は $K, \omega$ 	$iG(K, \omega)$
$K, \omega$  又は $K, \omega$ 	$iG_0(K, \omega) = \frac{i}{\omega - \epsilon_K + \delta_K}$ $\delta_K > K_F = +\delta$ $\delta_K < K_F = -\delta$
 $K, \omega$  $K, \omega$	$iG(K, \omega) \exp(i\omega 0^+)$ ( $0^+ \times \infty = \infty$ )
 $K, \omega$  $K, \omega$	$iG(K, \omega) \exp(i\omega 0^+)$
	$-iV_{klmn}$ 即ち $-iV_l$
各Rフェルミオンループ 	$(-1)$
各々中間周波数 $\omega$	$\int \frac{d\omega}{2\pi}$
各々中間運動量 $K$	$\sum_K$ 又は $\int \frac{d^3K}{(2\pi)^3}$ ( $\Omega = 1$ としてスピンの和を含む)

【参考文献】

- (1) K. SAKAMOTO and T. AOE, J. Infor. Proc. 4, 2 (1981), P89~90
- (2) MATTUK, A guide to Feynman diagrams in the many body problem,  
Magraw - Hill (1976)
- (3) P. H. ウィンストン, LISP, 培風館 (1981)
- (4) MELOM LISP 1.5 説明書  
HM-SROO-36A 27AI
- (5) FACOM OSIV LISP 手引書
- (6) A. C. HEARN, Comm. ACM 9, 3 (1966), 573~577
- (7) To be published



(付)

KLISPによる書き換え則のプログラム<sup>4)</sup>

```
DEFINE((
(MATCH (LAMBDA (P D)
(COND ((AND (NULL P) (NULL D)) T)
((OR (NULL P) (NULL D)) NIL)
((OR (EQUAL (CAR P) (QUOTE $$$>$))
(EQUAL (CAR P) (CAR D)))
(MATCH (CDR P) (CDR D)))
((AND (EQUAL (CAAR P) (QUOTE $$$>$))
(MATCH (CDR P) (CDR D)))
(PROG2 (CSET (CADAR P) (CAR D)) T))
((EQUAL (CAR P) (QUOTE $$$+$))
(COND ((MATCH (CDR P)(CDR D)) T)
((MATCH P (CDR D)) T)
(T NIL)))
((EQUAL (CAAR P) (QUOTE $$$+$))
(COND ((MATCH (CDR P) (CDR D))
(PROG2 (CSET (CADAR P) (LIST (CAR D))) T))
((MATCH P (CDR D))
(PROG2 (CSET (CADAR P) (CONS (CAR D)
(EVAL (CADAR P)
(QUOTE $ALIST)))) T))
(T NIL))))
(T NIL))))
))
```

```
DEFINE((
(MATCHING1 (LAMBDA (X)
(PROG ( )
(COND ( (NULL (CDR X)) (COND ((MATCH (QUOTE (A)) X)
(RETURN (QUOTE (B)))) (T (RETURN X))))
( (MATCH (QUOTE (A (¥ ¥ ¥ + ¥ S))) X)
(RETURN (CONS (QUOTE B) (MATCHING1 S))))
( (MATCH (QUOTE ((¥ ¥ ¥ + ¥ R) A)) X)
(RETURN (APPEND (MATCHING1 R) (QUOTE (B))))))
( (MATCH (QUOTE ((¥ ¥ ¥ + ¥ R) A (¥ ¥ ¥ + ¥
S))) X)
(RETURN (APPEND (MATCHING1 R) (CONS
(QUOTE B) (MATCHING1 S))))))
(T (RETURN X))) )))
```

```

DEFINE((
(PATTERNMATCH (LAMBDA (PATTERNS X)
(PROG (X1 Y PATTERN VALUE)
(SETQ Y PATTERNS)
(SETQ X1 X)
A (COND ((NULL Y) (RETURN X1)))
(SETQ PATTERN (CAAR Y))
(SETQ VALUE (CADAR Y))
(SETQ X1 (MATCHING X1 PATTERN VALUE))
(SETQ Y (CDR Y))
(GO A) )))
(MATCHING (LAMBDA (X Y Z)
(PROG ( )
(COND ((NULL (CDR X)) (COND ((MATCH (LIST Y) X) (RETURN
(LIST Z))) (T (RETURN X))))
((MATCH (LIST Y (QUOTE ($$$+$ R))) X)
(RETURN (CONS Z (MATCHING (EVAL (QUOTE R) (QUOTE $ALIST
)) Y Z))))
((MATCH (LIST (QUOTE ($$$+$ S)) Y) X)
(RETURN (APPEND (MATCHING (EVAL (QUOTE S) (QUOTE $ALIST
)) Y Z) (LIST Z))))
((MATCH (LIST (QUOTE ($$$+$ R)) Y (QUOTE ($$$+$ S
))) X) (RETURN (APPEND (MATCHING (EVAL (QUOTE R) (QUOTE
$ALIST)) Y Z) (CONS Z (MATCHING (EVAL (QUOTE S) (QUOTE
$ALIST)) Y Z))))))
(T (RETURN X))) )))
))
MATCHING((A A A A A) A B)
MATCHING((A C A C) A B)
MATCHING((C C A A) A B)
PATTERNMATCH(((A B) (B C)) (A B C))

```

MATCHING1は第1引数中のすべてのアトムAをアトムBに変換する関数であるが、MATCHINGは第1引数中のすべての第2引数のアトムを第3引数のアトムで置き換える関数である。

## FACOMのLISPによるMATCHのプログラム<sup>5)</sup>

```

DEFINE ((
(MATCH (LAMBDA (P D)
  (COND ((AND (NULL P) (NULL D)) T)
        ((OR (NULL P) (NULL D)) NIL)
        ((AND (NOT (ATOM (CAR P)))
              (EQUAL (CAAR P) (QUOTE RESTRICT))
              (EQUAL (CADAR P) (QUOTE $$$ $))
              (TEST (CDDAR P) (CDR D)))
         (MATCH (CDR P) (CDR D)))
        ((AND (NOT (ATOM (CAR P)))
              (EQUAL (CAAR P) (QUOTE RESTRICT))
              (EQUAL (ATOMCAR (CADAR P)) (QUOTE $$$ $))
              (TEST (CDDAR P) (CAR D))
              (MATCH (CDR P) (CDR D)))
         (PROG2 (CSET (ATOMCDR (CADAR P))(CAR D)) T))
        ((OR (EQUAL (CAR P) (QUOTE $$$ $))
              (EQUAL (CAR P) (CAR D)))
         (MATCH (CDR P) (CDR D)))
        ((AND (EQUAL (ATOMCAR (CAR P)) (QUOTE $$$ $))
              (MATCH (CDR P) (CDR D)))
         (PROG2 (CSET (ATOMCDR (CAR P)) (CAR D)) T))
        ((EQUAL (CAR P) (QUOTE $$$+$))
         (COND ((MATCH (CDR P) (CDR D)) T)
               ((MATCH P (CDR D)) T)
               (T NIL)))
        ((EQUAL (ATOMCAR (CAR P)) (QUOTE $$$+$))
         (COND ((MATCH (CDR P) (CDR D))
               (PROG2 (CSET (ATOMCDR (CAR P))
                          (LIST (CAR D))) T))
               ((MATCH P (CDR D))
               (PROG2 (CSET (ATOMCDR (CAR P))
                          (CONS (CAR D)
                                (EVAL (ATOMCDR (CAR P))
                                      (QUOTE ALIST)))) T))
               (T NIL)))
        (T NIL))
  ))
(TEST (LAMBDA (PREDICATES ARGUMENT)
  (PROG ( )
    LOOP
      (COND ((NULL PREDICATES) (RETURN T)))
      (COND ((FUNCALL (CAR PREDICATES) ARGUMENT)
            (PROG2 (SETQ PREDICATES (CDR PREDICATES))
                  (GO LOOP)))
            (T (RETURN NIL))))
  ))
(FUNCALL (LAMBDA (FUN ARGUMENT)
  (APPLY FUN (LIST ARGUMENT) (QUOTE ALIST))))
))

```

NG

```

DEFINE((
  (ATOMCAR (LAMBDA (X)
    (CAR (EXPLODE X)) ))
  (ATOMCDR (LAMBDA (X)
    (IMPLODE (CDR (EXPLODE X))) ))
  (IMPLODE (LAMBDA (X)
    (PROG (Y)
      (COND ((ATOM X) (RETURN X)))
      (SETQ Y X)
      A (COND ((NULL Y) (RETURN (MKATOM))))
        (RLIT (CAR Y))
        (SETQ Y (CDR Y))
        (GO A) ))) ))

```

FACOMのLISPによるPATTERNMATCHの関数は\$ALISTをALISTに書き換えて得られる。MATCHINGの関数も同様である。

# プログラム登録表

(様式1)

ライブラリ名	(センタ記入)	作成日付	
プログラム名			
作成者氏名	坂本 薫, 青江 俊夫		
形式	a コンプリート・プログラム      ㉔ 関数副プログラム b サブルーチン・副プログラム      d その他		
使用機器	a 磁気テープ 入力( )本, 出力( )本 b CRTの種類( ) c 磁気ディスク・ファイル( )個 d その他( )		
プログラムサイズ	a ソース・プログラム( )行 b オブジェクト・プログラム( )KW		
使用言語	a FLAG                      d COBOL                      ㉕ LISP b FORTRAN IV      e METASYMBOL      h PL/I c FORTRAN 77      f PASCAL      i その他( )		
処理形態	㉖ バッチ処理専用                      c バッチ・TSS兼用 b TSS専用		
使用条件等	(枠内に入りきらない場合は, A4サイズのもので説明を添付してください)		

専ら

## 10. 有限結晶での X 線干渉縞

教養部助教授 浦上 澤 之

” 講 師 宇都宮 晃

### I 目 的

シリコン結晶等の単結晶に X 線が入射し、Bragg 反射が励起されているとき、結晶内には 2 種類の波動が存在し、透過波と回折波には干渉縞が現われる。この干渉縞を X 線回折の動力的理論で計算する。この計算によって、2 種類の波動の干渉の様子、結晶内部での波動の分布状況、透過 X 線および回折 X 線の強度分布がわかる。

### II 動力的回折理論

X 線は Maxwell の方程式で記述されるが、単結晶内で回折が生じているときには、X 線の動力的理論によって次のように書くことができる。<sup>1)</sup>

結晶内の X 線を表わす波動関係数  $\psi(\mathbf{r})$  を

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i \mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}) + \psi_k(\mathbf{r}) \exp(-2\pi i \mathbf{k}_k \cdot \mathbf{r}), \quad (1)$$

とおく。ここで、 $\psi_0(\mathbf{r})$  と  $\psi_k(\mathbf{r})$  は結晶内の位置ベクトル  $\mathbf{r}$  の関数で、それぞれ透過波と回折波を表わす。ベクトル  $\mathbf{k}_0$  と  $\mathbf{k}_k$  は X 線の透過方向と回折方向の波動ベクトルである。この透過波と回折波が次の偏微分方程式を満す：

$$\frac{\partial \psi_0}{\partial s_0} = -i\pi K C \chi_{-k} \psi_k, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial s_k} = -i\pi K C \chi_k \psi_0. \quad (3)$$

ここで、 $s_0$ 、 $s_k$  は  $\mathbf{k}_0$ 、 $\mathbf{k}_k$  方向の座標であり、係数  $\pi K C \chi_{\pm k}$  は複素数である。従って、 $\psi_0$ 、 $\psi_k$  は 2 次元空間内の複素関数である。

偏微分方程式(2)、(3)を解くための境界条件は、通常 Bragg Case<sup>2)</sup>、有限厚結晶での Bragg Case<sup>3)</sup>、および有限結晶内で Laue Case と Bragg Case が同時に励起される場合<sup>4)</sup>によって異なるが、最後の有限結晶における境界条件は Laue surface で、

$$\psi_0 = \Phi_0, \quad \psi_k = 0, \quad (4)$$

Bragg surface で、

$$\psi_0 = \Phi_0, \quad \frac{\partial \psi_k}{\partial s_k} = -i\pi K C \chi_k \Phi_0, \quad (5)$$

rear surface で

$$\frac{\partial \psi_0}{\partial s_0} = 0, \quad \psi_h = 0. \quad (6)$$

ここで、(4)式の  $\Phi_0$  は、入射波を

$$\Psi(r) = \Psi_0(r) \exp(-2\pi i K r), \quad (7)$$

としたとき、

$$\Phi_0(r) = \Psi_0(r) \exp(-2\pi i [K - k_0] r), \quad (8)$$

で与えられる。ベクトル  $K$  は真空中における入射波の波動ベクトルである。

偏微分方程式を解く領域は結晶の形状と入射波の存在範囲によって決る。入射波が結晶全体に結晶波を励起するときには、全領域について解くが、入射波がある範囲に限られているときには、結晶内で結晶波が伝播する領域についてのみ解く。

解の一意性についてはグリーン関数の方法を適用し、Goursat の定理<sup>5)</sup>を使って証明する。<sup>4)</sup>

### III プログラミングに用いた数値解析の方法

2次元空間  $(s_0, s_h)$  を網目空間  $(i, j)$  で表わし、波動関数は複素2次元配列  $\psi_0(i, j)$ ,  $\psi_h(i, j)$  で記述される。方程式(2), (3)によって、 $\psi_0(i, j)$  は  $\psi_0(i-1, j)$  から求められ、また  $\psi_h(i, j)$  は  $\psi_h(i, j-1)$  から求められるが、計算精度を高めるため修正 Euler 法

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n + \frac{h}{2}; y_n + \frac{h}{2} f(x_n, y_n)), \quad (9)$$

を2次元の偏微分方程式に適用して用いる。その結果、第1回目の計算では、

$$\begin{aligned} \psi_0(i, j) &= (1 + \frac{GH}{4}) \psi_0(i-1, j) \\ &+ \frac{G}{2} \{ \psi_h(i-1, j) + \psi_h(i+1, j) \} + \frac{GH}{4} \psi_0(i+1, j), \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \psi_h(i, j) &= (1 + \frac{GH}{4}) \psi_h(i+1, j) \\ &+ \frac{H}{2} \{ \psi_0(i-1, j) + \psi_0(i+1, j) \} + \frac{GH}{4} \psi_h(i-1, j), \end{aligned} \quad (11)$$

を用い、計算精度をさらに改善するための第2回目とそれ以降の計算では改良 Euler 法、

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} \{ f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}) \}, \quad (12)$$

による、

$$\psi_0(i, j) = \psi_0(i-1, j-1) + \frac{G}{2} \{ \psi_h(i-1, j-1) + \psi_h(i, j) \}, \quad (13)$$

$$\psi_h(i, j) = \psi_h(i+1, j-1) + \frac{H}{2} \{ \psi_0(i+1, j-1) + \psi_0(i, j) \}, \quad (14)$$

をくりかえし用いる。ただし、境界条件(5)を必要とする Bragg surface では、入射波  $\phi_0$  が計算領域外に存在するため、回折波を正しく計算するために次式を使用する。

$$\psi_h(i, j) = \psi_h(i+1, j) + \frac{H}{2} \{ \psi_0(i+1, j) + \psi_0(i, j) \}. \quad (15)$$

ここで、 $h$  は階差方程式を解くための step 間隔、また  $G$ ,  $H$  は次式で与えられる。

$$\left. \begin{aligned} G &= -i\pi h K C x_h, \\ H &= -i\pi h K C x_h. \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

境界条件(4)~(5)を与える入射波(7)、すなわち(8)には次の 5 通りが用意されている。

- i) 非常に細い X 線ビーム：analytic には  $\delta$  関数であたえられる入射波であるが、通常の実験室における実験に適う結果を与える。数値計算では、境界上の 1 点で有限の値を持ち、他の点では 0 の値をもつ step 関数である。
- ii) 球面波：点光源から射出される X 線を表わす。micro focus の実験条件に対応する入射波である。
- iii) Laue surface 上の平面波：平面波が Laue case で結晶に入射するときの境界波で、Bragg surface 上では入射波を 0 にとる。
- iv) Bragg surface 上の平面波：平面波が Bragg case で結晶に入射するときの境界波で、Laue surface 上では入射波を 0 にとる。
- v) incoherent wave：非常に細い入射波が、互に独立に、入射面上に一様に分布する場合である。構造解析等で、入射スリットを広くしたときの実験条件に適合する。

計算を行う領域については 2 節で述べた。結晶の形状は任意の形を、その形を表わす関数を代入することによって指定できる。現在、四角形と円形の形状を選択できるが、その変形をも含めて、次の 7 通りが即座に可能である：

- a) Laue case における四角形結晶
- b) Bragg case における四角形結晶
- c) Laue case と Bragg case を含む四角形結晶
- d) (+, -) setting の double crystal 回折法における 2 結晶
- e) 多層薄膜結晶
- f) 円形結晶
- g) 楕円結晶

入射条件と結晶形状を定めることによって、数値解析を開始できるが、計算途上の各点で次の事項が判断、決定される。

- i) 結晶の内部と境界の判別。
- ii) 境界の場合、いかなる境界条件を満すべき境界であるかの判定。



計算

- ハ) また、境界の場合に、入射波の存在、大きさ（振幅）の決定と、 $\psi_i$  の計算方法の決定。
- ニ) 計算精度と反復計算回数の決定。
- ホ) 積分強度等算出のために保存すべきデータの抽出。
- ヘ) graphics による強度分布図作成のためのデータ選別。

上述のようにして計算が行われ、結果は結晶によるX線の吸収を考慮した上で、後述のように数値、ラインプリンタによるグラフと等高線図形、グラフィクスによる2次元と3次元図形によって出力される。

実験  
他の

#### IV プログラムの構成

##### 1. 波動関数を計算するためのプログラム

###### 1-1. コマンド・プロシジャ

目的入力データ、計算時間、出力ファイル等を指定して、バッチ・ストリームを呼ぶ。

###### 1-2. バッチ・ストリーム

バッチ・ジョブに投入し、ジョブの処理状況を通知する。

###### 1-3. フォートラン・プログラム

メイン・プログラムと次のサブプログラムからなる。すなわち、結晶データ計算、結晶形状、積分強度、入射範囲算出、入射波動関数、Euler 計算、一次元強度分布、二次元強度分布、等高線図、ブロック・データ。

##### 2. 3次元グラフィクスのためのプログラム

###### 2-1. コマンド・プロシジャ

目的入力データ、図形データ、計算時間、出力ファイル等を指定して、まずエディターを on line で呼び、次にバッチ・ストリームを呼ぶ。

###### 2-2. 入力データ加工プログラム

波動関数の計算によって得られたデータ・ファイルを、グラフィクスのシステムが受け付られるようにエディターで加工する。

###### 2-3. バッチ・ストリーム

上記のプログラムで加工したデータ・ファイルをグラフィクス処理するためにバッチ・ジョブに投入し、ジョブの処理状況を通知する。

###### 2-4. グラフィクスのプログラム

CGS の structure, picture 処理を行う。

###### 2-5. 図形描写プログラム

CGS の picture で得られた図形データを draw で CRT, あるいは X-Y プロッタに表示する。

射波

で、

で、

言で

も入

こ、

事

ミ  
ン  
グ  
—  
—  
開  
—  
—  
在  
—  
—  
在  
—  
—  
在  
—  
—  
在  
—  
—  
在

### 3. 積分強度表示のためのプログラム

#### 3-1. 結晶表面強度プログラム

X線射出面上の強度分布を描く。

#### 3-2. 結晶厚—強度のプログラム

結晶の厚さと積分強度の関係を描く。

#### 3-3. 強度曲線のプログラム

入射X線の方向を変化させたときの強度変化を描く。

### 4. 計算精度検討プログラム

#### 4-1. 複素変数ベッセル関数プログラム

第 $n$ 次のベッセル関数を、X線の吸収を考慮して複素数の変数について計算する。

#### 4-2. 計算精度比較プログラム

ベッセル関数の値を用いて、偏微分方程式の数値解の精度を比較する。

## V 結 論

本プログラム作成の元来の目的はX線の結晶による消衰効果の研究にあるが、はじめに述べた目的を達成するためのプログラムは上述のごとく完成している。

本プログラムによる計算結果は次の形式で表示される。すなわち、積分強度の数値、X線射出面における強度分布の数値、結晶内のある厚さにおける強度分布のラインプリンタによるグラフ、結晶領域全体の強度分布のラインプリンタによる等高線図と3次元グラフィクスによる図形強度分布(波動関数の real part, imaginary part, 透過波, 図折波についての強度分布等を出力できる), 結晶厚—強度, 入射角—強度曲線等々である。

これから得られる結果によって、任意の形状の結晶内での波動の挙動が明確に把握され、また、analytic な解が存在する回折状況についても物理的洞察を深めることができ、<sup>6)</sup> そして応用面にも発展することが期待できる。<sup>7)</sup>

### 【参考文献】

- 1) S. Takagi : Acta cryst. 15 (1962) 1311 ; J. Phys. Soc. Japan 26 (1969) 1239.
- 2) T. Uragami : J. Phys. Soc. Japan 27 (1969) 147.
- 3) T. S. Uragami : J. Phys. Soc. Japan 28 (1970) 1508.
- 4) T. S. Uragami : J. Phys. Soc. Japan 31 (1971) 1141.
- 5) E. Gousat : Cours D'Analyse Mathematique (Gauthier-Villars Et Cie, Paris, 1923) Troisieme Edition, Tom III.
- 6) T. S. Uragami : J. Phys. Soc. Japan 52 (1983) 3073.
- 7) T. S. Uragami : 10 congrès international d'optique des rayons X et de microanalyse (1983) 52.

# プログラム登録表

(様式1)

ライブラリ名	(センタ記入)	作成日付	
プログラム名			
作成者氏名	浦上 澤之, 宇都宮 晃		
形式	(a) コンプリート・プログラム      c 関数副プログラム b サブルーチン・副プログラム      d その他		
使用機器	a 磁気テープ 入力( )本, 出力( )本 b CRTの種類( ) c 磁気ディスク・ファイル( )個 d その他( )		
プログラムサイズ	a ソース・プログラム( )行 b オブジェクト・プログラム( )KW		
使用言語	a FLAG                                  d COBOL                                  g LISP (b) FORTRAN IV      e METASYMBOL      h PL/I c FORTRAN 77      f PASCAL      i その他(コマンド・プロシジャー)		
処理形態	(a) バッチ処理専用                                  c バッチ・TSS兼用 b TSS専用		
使用条件等	(枠内に入りきらない場合は, A4サイズのもので説明を添付してください)		

目  
 出  
 面  
 結  
 分  
 布  
 る),  
 こ,  
 こも

is,

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