

KLASIFIKAČNÍ SYSTÉM PRO SRÁŽKOVÉ PROCESY

Jan Stöckel

VZ 23/73

Ústav fyziky plazmatu ČSAV

Nademlýnská 600, Praha 9

O B S A H

1. Úvod	str. 1
2. Obecný klasifikační systém	2
3. Klasifikace srážkových procesů pomocí okrajově děrných štítků	4
4. Využití klasifikačního systému pro strojové zpracování dat o srážkových procesech	13
5. Dodatek I. Kód děrného štítku	15
6. Dodatek II. Vzor okrajově děrného štítku	17

1. ÚVOD.

Z hlediska praktické potřeby je obvykle třeba znát závislost velikosti srážkového průřezu jednoho nebo skupiny srážkových procesů na vzájemné energii srážejících se částic. Protože dosud není k dispozici monografie, která by souhrnně uvedla data o srážkových procesech, je nutné získávat tato data pracně z časopiseckých článků. Stále rostoucí počet ^{informací} o srážkových procesech a účinných průřezech si vynutil potřebu vytvoření systému, podle kterého by bylo možno jednoduše tyto informace tříditi, uchovávat a vyhledávat.

V této zprávě je navržen obecný klasifikační systém, který dovoluje tříditi srážkové procesy podle vlastností částic před a po srážce. Tento klasifikační systém je pak dále aplikován na zpracování informací o srážkových procesech pomocí okrajově děrných štítků.

Tato kapitola je zpracována detailně a může sloužit ihned jako návod k praktickému využití.

Na závěr zprávy je připojena krátká ϕ úvaha informativního rázu o možnosti využití klasifikačního systému pro zpracování dat o srážkových procesech na počítačím stroji.

2: OBECNÝ KLASIFIKAČNÍ SYSTÉM.

V Obecném klasifikačním systému (dále OKS) je možno klasifikovat vzájemné srážky dvou částic. Schema klasifikovatelného srážkového procesu je typu:



kde A (1) - je primární (obvykle rychlá, energetická) částice na př. elektron, foton, iont apod.

B (1) - je primární (obvykle pomalá, terčíková) částice na př. atom či molekula plynu.

A (2) - je rychlá částice po srážce resp. souhrn všech produktů, jež z rychlé částice v důsledku srážky vzniknou.

B (2) - je terčíková částice po srážce resp. souhrn všech produktů, jež z terčíkové částice v důsledku srážky vzniknou.

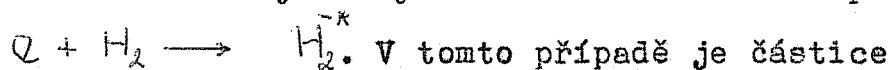
V OKS se každá částice klasifikuje zvlášť a to v pořadí A (1), B (1), A (2), B (2). Každá z těchto částic se klasifikuje dle tří hledisek. Jednotlivá hlediska χ jsou pak rozčleněna na jistý počet možností, které specifikují povahu částice. Rozdělení hledisek na možnosti lze provést různými způsoby. Obvykle je nutné vzít v úvahu konkrétní způsob využití OKS.

Hledisko č. 1 - DRUH ČÁSTICE.

Hledisko č. 1 popisuje hmotnou povahu částice. Pomocí tohoto hlediska lze rozhodnout zdali na př.

částice A (1) je elektron, foton, atom vodíku H_1 , molekula vodíku H_2 , molekula vody H_2O a pod. Pojmy

"elektron", "foton", "H₁", "H₂", "CO", "H₂O" a pod. představují pak jednotlivé možnosti v hledisku "DRUH ČÁSTICE". V tomto hledisku je výhodné klasifikovat i případy, kdy jedna z primárních částic je v důsledku srážky zachycena částicí druhou např.



V tomto případě je částice A (1) (elektron) zachycena molekulou vodíku a částice A (2) se tedy bude v tomto hledisku klasifikovat možností "ZACHYCENA".

Hledisko č. 2 - NÁBOJ ČÁSTICE.

V hledisku č. 2 se klasifikuje jednak náboj částice ("plus", "minus", "neutrál" a v případě molekulárních částic i možné nábojové sestavy produktů disociace molekuly. Tak např. v nejjednodušším případě homogenní dvouatomová molekula H₂ může v důsledku srážky disociovat pěti možnými způsoby:

- | | |
|--------------------------------------|-----|
| 1) na dva neutrální atomy | ○ ○ |
| 2) na dva kladné ionty, | ⊕ ⊕ |
| 3) na kladný iont a neutrální atom, | ⊕ ○ |
| 4) na záporný iont a neutrální atom, | ⊖ ○ |
| 5) na záporný iont a kladný iont. | ⊖ ⊕ |

Každé takovéto nábojové sestavě produktů disociace, jež se tedy v OKS uvažuje i po srážce jako jedna částice, musí být jednoznačně přiřazena jediná možnost v hledisku "NÁBOJ ČÁSTICE".

Čím složitější molekuly chceme dle OKS úplně klasifikovat, tím větší bude počet možností v hledisku "NÁBOJ

ČÁSTICE" neboť počet možných nábojových sestav produktů disociace roste s počtem atomů v molekule.

Hledisko č. 3 - "STAV ČÁSTICE".

V hledisku č. 3 se klasifikují částice před i po srážce podle jejích kvantového stavu. Výběr možností, v tomto hledisku, je opět možné provést několika způsoby, podle toho, jak konkrétně se bude OKS využívat. Tak např. atomy by bylo možno klasifikovat dle hlavního kvantového čísla n a molekuly dle možných stavů Σ^+ , Π , Δ . V nejjednodušším případě by bylo možno zvolit pouze dvě možnosti a to: "ZÁKLADNÍ STAV" a "VYBUZENÝ STAV".

Z uvedené^{ho} přehledu vyplývá, že výběrem vhodných možností, lze každý srážkový proces jednoznačně popsat dvanácti údaji, z nichž každý již obsahuje jen malý počet informací. Výběr vhodných možností a jiné dílčí úpravy závisí na konkrétní aplikaci OKS.

3. KLASIFIKACE SRÁŽKOVÝCH PROCESŮ POMOCÍ OKRAJOVĚ DĚRNÝCH ŠTÍTKŮ.

Jednou z možných aplikací OKS by mohlo být jeho využití k třídění a vyhledávání informací o srážkových procesech pomocí okrajově děrovaných štítků.

Ideový návrh této aplikace by vypadal následovně. Informace o srážkových procesech se dají svesměs získat z časopiseckých článků. Z článku je možné eliminovat závislost srážkového průřezu na vzájemné energii částic ve formě grafické závislosti po případě

tabelárně. Tyto údaje o daném typu srážkového procesu se průběžně ukládají do kartotéky grafů. Každému srážkovému procesu je přiřazen okrajově děrovaný štítek. Část informací je vyděrována na okraji štítku, část je uložena v textu na děrném štítku.

- a) OKRAJ ŠTÍTKU: 1) Obsahuje údaje jednoznačně identifikující srážkový proces podle zásad dříve zmíněného obecného klasifikačního systému.
- 2) Obsahuje údaje o intervalu energií v němž byl srážkový průřez dle textu změřen.
- b) TEXT ŠTÍTKU : 1) Obsahuje rovnici srážkového procesu, název (pokud existuje) a poznámky.
- 2) Citaci článku, resp. článků, které se daným procesem zabývají.
- 3) Obsahuje pořadové číslo grafu závislosti srážkového průřezu na vzájemné energii částic v kartotéce grafů.
- 4) Obsahuje číslo eventuality otisku článku v kartotéce otisků článků.

Otázka textu okrajově děrovaného štítku bude plně objasněna na příkladu, který je uveden dále.

Zakódování informace o procesu a energii na okraj štítku je provedeno následujícím způsobem:

Každé částici A(1), B(1), A(2), B(2) je přiřazen jistý počet otvorů na okraji štítku a to tak, že částicím před srážkou A(1) a B(1) je přiřazen horní okraj štítku, rychlé částici po srážce A(2) levý okraj štítku a terčkové částici po srážce B(2) pravý okraj štítku (levá a pravá strana štítku se rozliší podle zkoseného rohu, jež se nachází vpravo nahoře). Spodní okraj štítku

(pokud je vyděrován) zůstává volný, neboť selekci štítků jež obsahují informaci na spodním okraji nelze provádět na mechanickém analyzátoru.

Každá částice se klasifikuje zvlášť podle tří hledisek (jak již bylo uvedeno dříve) "DRUH", "NÁBOJ", "STAV". Omezený počet otvorů na okraji štítku a požadavek co nejjednodušší selekce kladě jistá omezení na počet možností v jednotlivých hlediscích. Toto omezení se bude týkat hlavně hlediska "NÁBOJ" v němž bude počet možností pro částice před srážkou A(1) a B(1) omezen na deset. U částic po srážce A(2), B(2) se v důsledku srážky počet možných nábojových sestav zvětší (disociace a pod.) a proto je hledisko "NÁBOJ" rozšířeno na sto možností. Hledisko "DRUH" se klasifikuje u všech částic stejně a je v něm obsaženo sto možností. Rovněž hledisko "STAV" se klasifikuje pro všechny částice stejně a to dvěma možnostmi.

Rozdělení otvorů na okraji štítku pro jednotlivé částice a hlediska je patrné z připojeného příkladu vyplněného okrajově děrného štítku.

Děrování jednotlivých možností na okraj štítku se děje pomocí přímého a kombinačního kódu, jejichž podstata je objasněna v dodatku. Přiřazení jednotlivých možností kódovým číslům se nazývá třídník. V následujícím odstavci je proveden návrh třídníku podle potřeb oddělení NTP s možností dalšího rozšíření.

T Ř Í D N Í K :

I. ČÁSTICE PŘED SRÁŽKOU A(1), B(1).

Hledisko	Možnost	Kódové číslo
1) DRUH	foton	$h\nu$ 11
	elektron	e 12
	at. vodík	H 14
	mol. vodík	H ₂ 17
	mol. vodík	H ₃ 21
	at. deuterium	D 22
	mol. deuterium	D ₂ 24
	mol. deuterium	D ₃ 27
	at. kyslík	O 41
	mol. kyslík	O ₂ 42
	at. dusík	N 44
	mol. dusík	N ₂ 47
	helium	He 71
	neon	Ne 72
	argon	Ar 74
	"JINÉ"	77

Pozn.: Možnost "JINÉ" klasifikuje ty částice, které nejsou uvedeny v seznamu možností. Jestliže se tato kategorie naplní daty o částicích jednoho druhu, je možné pro tyto částice zavést zvláštní možnost (celkový počet možností je v tomto hledisku 100).

Hledisko	Možnost		Kódové číslo
2) NÁBOJ	kladná částice	⊕	1
	neutrál. částice	○	2
	záporná částice	⊖	4
	dvojnásob.ionis.část.	⊕ ²⁺	7

Pozn: Tyto možnosti se vysekávají hlubokým výsekem a jsou tříděny jednou jehlou. Je-li primární částice více než dvakrát ionisovaná je možné rozšířit možnosti i na ni tak, že ji bude odpovídat kód na př. 3., který se bude vysekávat dvěma mělkými výseky 1 a 2 a tato možnost se vytrídí dvěma jehlami. (Celkový počet možností je 10)

3) STAV	základní		1
	excitovaný		2

II. ČÁSTICE PO SRÁŽCE A(2), B(2).

Hledisko	Možnost		Kódové číslo
1) DRUH	foton	$h\nu$	11
	elektron	e	12
	at. vodík	H	14
	mol. vodík	H ₂	17
	mol. vodík	H ₃	21
	at. deuterium	D	22
	mol. deuterium	D ₂	24
	mol. deuterium	D ₃	27
	at. kyslík	O	41
	mol. kyslík	O ₂	42

Hledisko	Možnost	Kódové číslo	
DRMH	at. dusík	N	44
	mol. dusík	N ₂	47
	helium	He	71
	neon	Ne	72
	argon	Ar	74
	"JINÉ"		77
	"ZACHYCENA"		10

Pozn.: Pro částice po srážce se objevuje ještě další možnost "ZACHYCENA", která popisuje procesy v nichž je primární částice zachycena terčíkovou částicí např.
Tato možnost se již, jak je z kódového čísla patrné třídí třemi jehlami.

Hledisko	Možnost	Kódové číslo	
2) NÁBOJ	kladná částice	⊕	11
	neutr. částice	○	12
	záporná částice	⊖	14
	dvounás.ion.částice	⊕ ²⁺	17
	dvójice ⊕ iontů	⊕ ⊕	21
	dvójice neutr.částic	○ ○	22
	neutr.č. a klad.iont	○ ⊕	24
	kladný iont a neutrál.č.	⊕ ○	27
	iontový pár	⊕ ⊖	41
	iontový pár	⊖ ⊕	42
	neutrál. a záp. iont	○ ⊖	44
	záp. iont a neutr.č.	⊖ ○	47
	"JINÉ"		77

Pozn.: První čtyři možnosti jsou stejné jako v případě částic před srážkou. Je-li však alespoň jedna z interagujících částic molekula, může dojít při srážce k její disociaci. Různé disociační procesy jsou zahrnuty pak v dalších možnostech. Na př. možnost " $\text{O} + \oplus$ " (24) značí, že molekulární částice disociovala v důsledku srážky na neutrální atom a kladný iont, t.j. $\text{H}^+ + \text{CO} \rightarrow \text{H}^0 + \text{C} + \text{O}^+$ a možnost " $\oplus + \text{O}$ " (27) označující stejný proces ovšem s opačnými znaménky náboje u produktů disociace t.j. $\text{H}^+ + \text{CO} \rightarrow \text{H}^0 + \text{C}^+ + \text{O}$.

Výčet možností uvedený v přehledu dovoluje popisovat úplně procesy dvouatomových molekul při čemž velikost náboje produktů disociace je $\leq \pm 1$. Bylo-li by třeba klasifikovat úplně srážky ve kterých jsou produkty disociace vícenásobně ionisované nebo srážky tříatomových molekul, bylo by nutné přidat další možnosti zcela popisující možné způsoby disociace. Není-li třeba úplné klasifikace, pak složitější případy disociace (méně časté) zahrneme do možnosti "JINÉ".

3) STAV	základní	1
	excitovaný	2

III. VZÁJEMNÁ ENERGIE ČÁSTIC PŘI SRÁŽCE.

Možnost	Kódové číslo
Energie menší než 1 keV	1
Energie větší než 1 keV	2

Pozn.: Vzhledem k tomu, že pro toto hledisko zbyly na děrném štítku pouze dvě dvojice otvorů (jak je vidět z příkladu děrného štítku), byla zvolena pouze tato jednoduchá klasifikace.

A na závěr uveďme několik příkladů klasifikace srážkových procesů pomocí uvedeného systému. Z prostorových důvodů nebude uvedena klasifikace dle hlediska "STAV".

1) Nábojová výměna:

ROVNICE	H^+		+	H_2		\longrightarrow	H^0		+	H_2^+	
HLEDISKO	DRUH	NÁBOJ		DRUH	NÁBOJ		DRUH	NÁBOJ		DRUH	NÁBOJ
MOŽNOST	"H"	plus		"H ₂ "	neutr.		"H"	neutr.		"H ₂ "	plus
KÓD	14	1		17	2		14	12		17	11

2) Disociace molekuly:

ROVNICE	H^+		+	CO		\longrightarrow	H^+		+	$C^+ + O +$	
HLEDISKO	DRUH	NÁBOJ		DRUH	NÁBOJ		DRUH	NÁBOJ		DRUH	NÁBOJ
MOŽNOST	"H"	plus		"JINÉ"	neutr.		"H"	plus		"CO"	⊖0
KÓD	14	1		77	2		14	11		77	27

3) Disociativní zachycení elektronů:

ROVNICE	e		+	O_2		\longrightarrow	$O^- + O$	
HLEDISKO	DRUH	NÁBOJ		DRUH	NÁBOJ		DRUH	NÁBOJ
MOŽNOST	elon	minus		"O ₂ "	neutr. zachyc.		"O ₂ "	⊖0
KÓD	12	4		42	2		10	42 47

4) Iont - molekulární reakce:

ROVNICE	H_2^+		+	H_2		\longrightarrow	H^0		+	H_3^+	
HLEDISKO	DRUH	NÁBOJ	DRUH	NÁBOJ	DRUH	NÁBOJ	DRUH	NÁBOJ	DRUH	NÁBOJ	
MOŽNOST	"H ₂ "	plus	"H ₂ "	neutr.	"H ⁰ "	neutr.	"H ₃ "	plus			
KÓD	17	1	17	2	14	12	21	11			

5) Dvojnásobná ionisace atomu:

ROVNICE	H^+		+	Ar		\longrightarrow	H^+		+	Ar^{++}		+	Ze	
HLEDISKO	DRUH	NÁBOJ	DRUH	NÁBOJ	DRUH	NÁBOJ	DRUH	NÁBOJ	DRUH	NÁBOJ				
MOŽNOST	"H"	plus	"Ar"	neutr.	"H"	plus	"Ar"	(2+)						
KÓD	14	11	74	2	14	11	74	17						

4. VYUŽITÍ KLASIFIKAČNÍHO SYSTÉMU PRO STROJOVÉ ZPRACOVÁNÍ DAT O SRÁŽKOVÝCH PROCESECH.

Místo děrných štítků by bylo možno pro uchovávání, třídění a vyhledávání dat o srážkových procesech využít s výhodou počítačového stroje, informace o srážkovém procesu by se opět skládala ze dvou částí -

- a) názvu procesu, jež by se kódoval do paměti počítače pomocí zásad obecného klasifikačního systému
- b) textu, jež by obsahoval citaci literatury k danému procesu, tabulku resp. graf závislosti srážkového průřezu na vzájemné energii a eventuální poznámky.

Tato data by byla průběžně ukládána do paměti počítače a v případě potřeby by mohla být vyvolávána následujícími několika způsoby:

- 1) úplným názvem procesu dle klasifikačního systému t.j. vyvolávací příkaz by obsahoval úplné údaje ("DRUH", "NÁBOJ", "STAV") o všech částicích A(1), B(1), A(2), B(2). Počítač by pak vytiskl:
 - a) rovnici procesu
 - b) citaci literatury
 - c) tabulku resp. graf závislosti srážkového průřezu na vzájemné energii částic
- 2) neúplným názvem procesu, t.j. zajímal-li by nás pouze na př. "DRUH", "NÁBOJ" a "STAV" rychlé částice po srážce (výměna náboje $H^+ + H_2 \rightarrow H^0 + \dots$) pro všechny možné modifikace terčíkové částice, pak vyvolávací příkaz by obsahoval pouze parametry tří částic A(1), B(1) a A(2) a počítač tiskne:

- a) rovnice všech procesů majících dané parametry
 - b) citace literatury k těmto procesům
 - c) tabulku resp. graf závislosti srážkového průřezu neúplně klasifikovaného procesu na vzájemné energii částic $A(l)$ a $B(l)$. Srážkový průřez je dán součtem srážkových průřezů pro jednotlivé procesy, jež jsou neúplným názvem vyvolány.
- 3) úplným či neúplným názvem procesu a konkrétní hodnotou energie. Na tento příkaz je vyvolána hodnota srážkového průřezu daného resp. procesu pro danou hodnotu energie. Tento způsob by byl výhodný pro numerické výpočty.

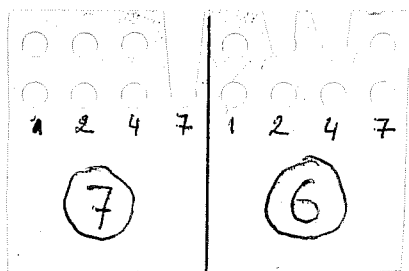
Tento hrubý nástin využití klasifikačního systému vyžaduje ovšem důkladného propracování. Dá se předpokládat, že se pak objeví ještě další možné aplikace klasifikačního systému. Pokud se týče konkrétního provedení zpracovávání dat o srážkových procesech pomocí počítače první odhady ukázaly, že hlavní obtíž tkví v rozsáhlém děrování dat do paměti počítače, avšak nároky na kapacitu paměti by měly být v mezích možnosti běžného počítače.

DODATEK I.

Kód děrného štítku.

Kód děrného štítku je způsob přiřazení jednotlivých možností k výsekům na okraji štítku. Pro zde uvedený případ byly zvoleny dva nejjednodušší typy kódů.

- 1) KÓD přímý : každé možnosti odpovídá jediný výsek a selekce možnosti se provádí jedinou jehlou. Pro hlediska s větším počtem možností (> 10) je však neúsporný. V našem případě je tohoto kódu užito pro hledisko "STAV" a pro klasifikaci energie.
- 2) Kód kombinační II. třídy: každé možnosti odpovídá dvojice výseků a selekce se tudíž provádí dvěma jehlami.
V konkrétních případech se obvykle užívá t.zv. kódu "1, 2, 4, 7", který umožňuje pomocí čtyř dvojic otvorů (při použití štítků s dvěma řadami otvorů) vyjádřit deset možností označených čísly 1, 2, 3, 4, 8, 9, 0. Čtyři dvojice otvorů jsou po řadě označeny čísly 1, 2, 4, 7.
Možnosti č. 1, č. 2, č. 4, č. 7 se třídí jedním hlubokým výsekem příslušné dvojice otvorů.
Zbývající možnosti jsou tříděny dvěma mělkými výseky tak, že součet pořadových čísel otvorů dává číslo možnosti, t.j. možnost č. 3 se třídí dvěma mělkými výseky otvoru označených 1 a 2, možnost č. 5 výseky otvoru 1 a 4 apod. Možnost označena číslem 0 se třídí mělkými výseky 7 a 4.
Na obrázku jsou uvedeny dva příklady děrování možnosti č. 7 a možnosti č. 6.

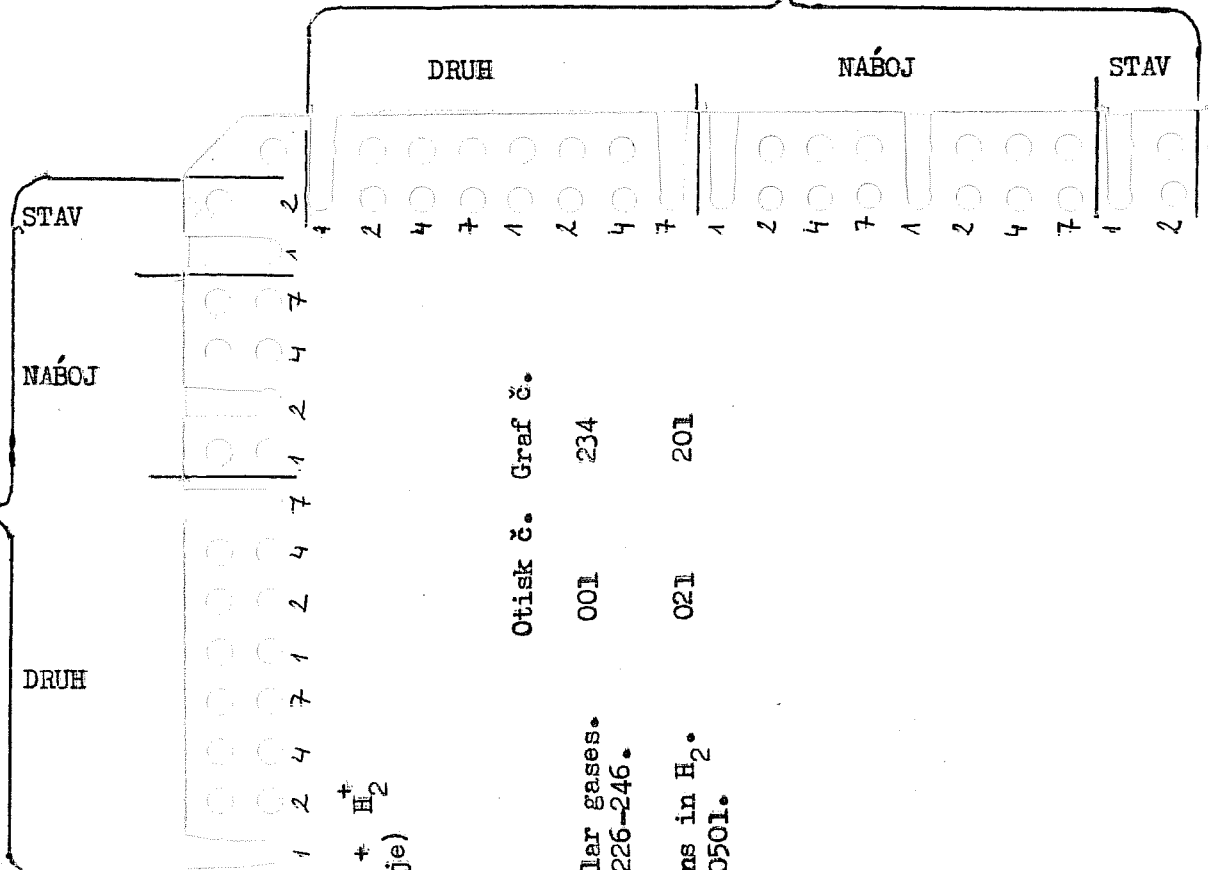


Při kódování většího počtu možností (> 10) uijeme osmi dvojic otvorů a možnosti označíme dvojcifernými čísly. Každou cifru pak kódujeme zvlášť pomocí kódu "1, 2, 4, 7". Tímto způsobem můžeme pomocí osmi dvojic otvorů a čtyř jehel třídit sto možností označených 00, 01, 02, 98, 99.

Pro nejčastěji se vyskytující možnosti je výhodné zvolit pořadová čísla složená ze základních cifer kódu t.j. 11, 12, 14, 17, 21, 22, 24, 27, 74, 77, (kterých je celkem šestnáct), neboť v těchto případech se třídění provádí pomocí dvou hlubokých výseků a tudíž pomocí pouze dvou třídících jehel.

B(2)

B(1)

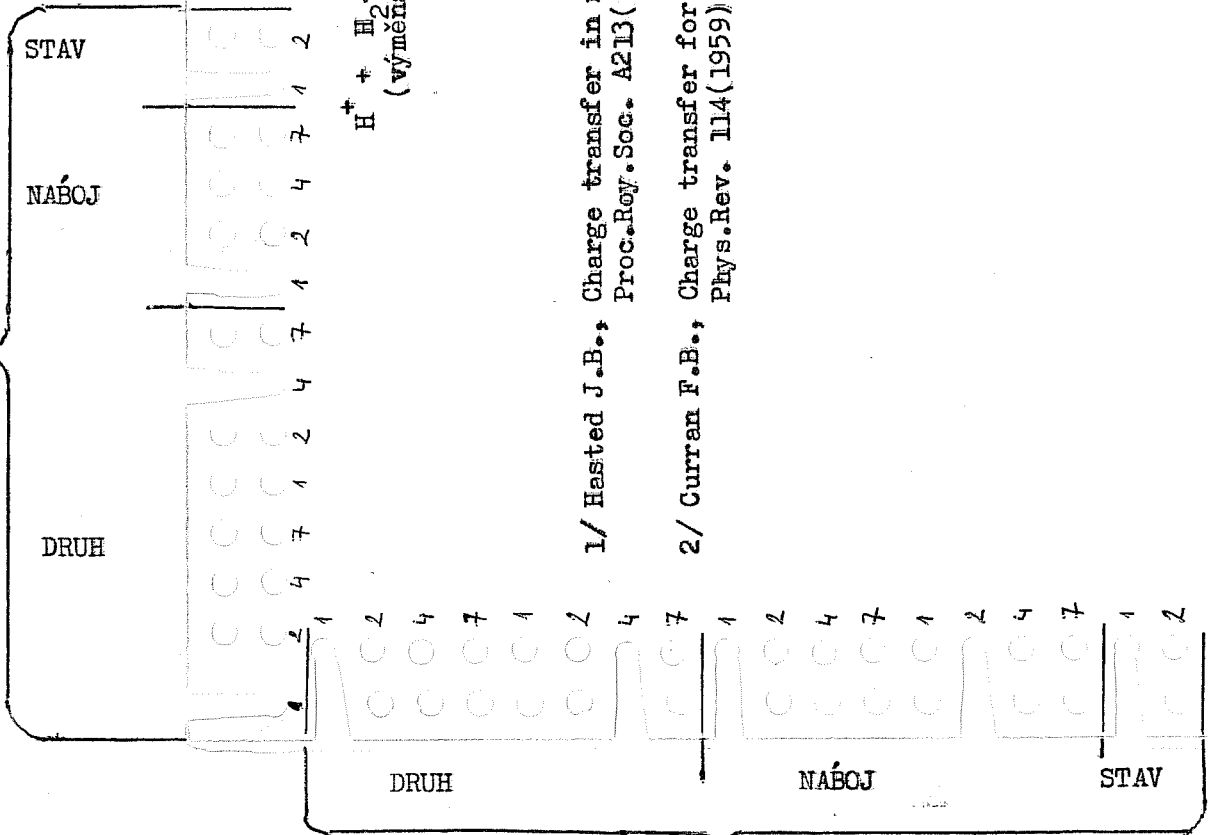


Otisk č. Graf č.

1/ Hasted J.B., Charge transfer in molecular gases. Proc.Roy.Soc. A213(1956) 226-246.

2/ Curran F.B., Charge transfer for protons in H_2 . Phys.Rev. 114(1959) 2 490501.

A(1)



A(2)