

(1) 原子分子データセンター・ネットワーク第1回会合

1) 出席者

C. F. Barnett (Controlled Fusion Atomic Data Center, ORNL, USA; このセンターの長どこの分野のデータ活動の草分け)

E. Beatty (IAEA/NDS, A+M Data Unit; この Unit の長として JILA (Joint Institute for Laboratory Astrophysics) よりこの会合の1週間前に赴任; なお NDS=Nuclear Data Section)

J. L. Delcroix (Lab. Phys. des Plasmas, Orsay, France; 原子分子データに関する文献情報検索のコンピュータ・システムを作成)

H. W. Drawin (CEN Fontenay-aux-Roses, France)

C. Dunford (NNDC/BNL, USA; NNDC=National Nuclear Data Center, 核データの専門家としてのオブザーバー)

G. Ebel (ZAED, Karlsruhe, Fed. Rep. of Germany; ZAED=Zentralstelle für Atomkernenergie-Dokumentation)

T. Fuketa (原研)

Y. Itikawa (東大宇宙航空研究所)

P. Johnston (CCDN, Saclay, France; CCDN=Compilation de Données Neutroniques =中性子データ編集センター)

K. Katsonis (IAEA/NDS, A+M Data Unit; Fontenay-aux-Roses から最近赴任)

A. Lorenz (IAEA/NDS の副長)

Yu. V. Martynenko (Kurchatov Institute, Moscow, USSR)

J. J. Schmidt (IAEA/NDS の長)

R. Seamon (IAEA/NDS, A+M Data Unit; Los Alamos Sci. Lab. から最近赴任)

F. J. Smith (Queen's University, Belfast, UK; 原子分子データに関する on-line system を作成)

H. Suzuki (上智大; 名大プラズマ研究所のスタディ・グループのリーダー)

W. L. Wiese (NBS, USA; 米国国立標準局内の原子分子データに関する3つのセンターの内の2つの長)

G. B. Yankov (Kurchatov Inst., Moscow, USSR; 前 INDC メンバー)

以上のほか, IAEA/Division of Research and Laboratories の Director の Prof. A. V. Shalnov の挨拶があったほか NDS から致名のオブザーバーが出席。

2) 会合の背景

核融合の研究開発に原子分子データが必要なことは早くから言われていたが、1974年11月のIFRC第5回会合から現存する原子データバンクについてIAEAが調査するようにとの勧告が出されたのが、この問題に関する国際協力検討の端緒となった。1975年2月にIAEA/NDSは核融合のための原子分子データについての新計画をNDSの業務範囲に組み込む提案をIAEA事務総長に出し、1975年6～7月のIAEAコンサルタント会合、同年8月のIFRC第6回会合、および同年10月のINDC第8回会合を通して審議され、IFRCとINDCの合同小委員会を設けることなどが提案された。

このような経緯の後に、1976年11月1～5日に“IAEA Advisory Group Meeting on Atomic and Molecular Data for Fusion”が、同6日にIFRC/INDC合同小委員会第1回会合が英国のCulham研究所で開催された。この時に12の各国のデータセンターあるいはグループが原子分子データに関する国際協力に積極的関心を示し今回の会合が持たれることになったのである。この12の機関に原研および名大プラズマ研究所が含まれており、今回もそれぞれから代表が出席した。

3) 開会

Prof. Shalnovの挨拶があって後Schmidtが座長に選ばれた。Schmidtはその前置きで、核融合研究開発のための原子分子データの現状が十数年前の核分裂炉のための中性子核データの状況と似ていることに言及した。中性子核データの場合、国際協力活動の開始はむしろ遅すぎた。それは中性子核データの国際的交換・流通において未だに異なるシステム間のデータ・フォーマット上の問題が完全に無いという状態には至っていないことに例示されている。核融合炉の実現までに年数があることは認めても、原子分子データについての国際協力活動開始は決して早すぎることはない。

今回の会合の意義は、先ずともかく関係者が集まることである。そして今日の核データの分野におけるように、国際会合で共通の言語（国語のことでなく、共通の専門語の意）で討議出来る状況を早く作ることである。

4) 各データセンターの報告（以下発言順）

(a) IAEA/NDSのA+M Data Unit :

Lorenzが1976年11月のCulham会合を簡単に回顧し、BeatyがBulletin（後述）の第1号のゲラ完成を主とする活動について極く簡単に報告した。同UnitのスタッフはBeaty, Katsonis, Seamonの3名である。

(b) NBS（Wieseの報告）:

NBSには関連するデータセンターに次の3つがある：

i) Data Center for Atomic Energy Levels (略称 AEL)

Martinが長, 1930年設立, 人員は専門職2名, 索引付けされた文献数約10,000,
表にされたデータ数: エネルギー単位 $\sim 10^5$, 波長が数百万個

ii) Data Center for Atomic Transition Probability (ATP)

Wieseが長, 1960年設立, 人員は次のLBとあわせて専門職2, 索引付けされた
文献数3,000,

表にされたデータ数: $\sim 10^5$

iii) Data Center for Line Shape Broadening (LB)

Wieseが長, 1970年設立, ATPとあわせて専門職2名, 索引付けされた文献数約
2,500

表にされたデータ数 $\leq 10^4$

Wieseの分類によればデータセンターには次の3つの種類がある:

① Information Center

主に bibliographic work をやり, data tabulation や evaluation をやらない

② Data Evaluation Center

critical table を作り出す

③ Formating Center

data format の標準化とデータのコンピュータ化を行い dissemination center の
役をする。

NBSのセンターは①が20%, ②が70%, ③が10%といった性格である。

②は非常に時間のかかる仕事で, ATPで3,000のデータを含む最初の編集物を出版する
までに6年かかり, AELでは全範囲を行うのに15年かかっている。

日常のサービスということでは, 電話と手紙によるリクエストがそれぞれ週に10~20
件程度ある。評価の仕事の妨げにならぬよう出来るだけ短時間で処理するようにしている
が, これらのリクエストに答えるのに平均1件当たり約10分ぐらいかかっている。このよ
うなサービス状況は定期的に国内組織のNSDRS(この略称未確認)に報告することにな
っている。

編集物の発行部数についてのDunfordの質問に対し, Volume 1が8千部, 2が7千部
とかであった。

(c) Controlled Fusion Atomic Data Center, ORNL (Barnett):

Barnettが長, 2nd Geneva Conference後の1958年に発足し正式には1962年
設立。

スタッフについては誰もデータセンターに full time にはしない方針である - これはセンター外での研究活動を継続させるためである。

文献の coverage は 90% 以上で Physics Abstract の 45% などに比して満足すべきものである。

新しい仕事としては反応率のデータに多項式を適合させるを行っている。

"Red Book" (このセンターの編集物の表紙の色からの通称) 編集には 3 年かかった。1950 年から 1975 年までの文献目録の磁気テープを IAEA/NDS に渡した - NDS で解読中である。

前記の Wiese の分類に従うと ORNL のセンターはどのようなタイプかとの質問に対し Barnett は「答えられない」との返答であった。

(d) Atomic Collision Information Center, JILA (Beatty):

1960 年発足

ファイル中の文献の数: 8000

Newsletter of Energy Transfer Collisions, April 1, 1977 を発行。

(e) Fontenay - aux - Roses (Drawin):

実質的には A + M Data の user である。

TFR の研究と、プラズマと壁の相互作用を実験するための新しい装置の建設という観点から A + M Data が必要。

ここでは data compilation を行う意向はない。

なお、上記の装置は Tokamak の内壁に色んな物質をはれるようにしたものようである。化学反応にも関心があるようであった。

(f) Orsay (Delcroix):

Wiese の分類に従えば、このセンターは①が 50%, ②がゼロ, ③が 50% である。①の仕事に identification of data を入れたい。

スタッフは専門職 2 名 (パートタイム)

GAPHYOR というコンピュータ化した文献目録システムを持っており、今ままで 35,000 lines の文献情報が入っており、1 年に 10,000 lines の割合で増加している。

対象は 1) structure (46%), 2) 光子衝突 (7.6%), 3) 電子衝突 (10%), 4) 重い粒子 (24%), 5) macroscopic である。() 内は現在収録されているものの割合。例えば H_6C_2 といったものも入っているが、分子の範囲を適切に限定するのが効果的である。

文献目録に地理的コードや 5 つの統計準位を使っている。isoelectronic sequences を

をどう扱うかが問題である。コンピュータと interactive なシステム（オンライン・タイプ）に取りかかっている。エネルギー範囲を 10 keV から 1 MeV まで上げたい。

3ヶ月毎に文献目録のテープを IAEA に提供する用意がある。

文献目録の誤りを調べるマンパワーが無い。

(g) CCDN, Saclay (Johnston) :

CCDN は原研核データセンターとも密接な関係にある NEA の中性子データ編集センターである。CCDN は A + M データを扱うことにはなっていないが、A + M データも logical structure においては中性子データと類似しており、中性子データにおける経験が役立つと思われる。現在のところ CCDN としては A + M データ活動の進展に興味を持って見守っていたい。

CCDN は Prof. Delcroix と相談する機会を持っている。

(h) NNDC / BNL. (Dunford) :

目下のところ A + M Data に関心はない。Dunford としてはコンピュータ・システム上の関心からこの会合に出席した。

(i) ZAED (Ebel) :

1974年に西独政府は16の Specialized Information Systems を設立する計画を通じた。ZAEDは他の documentation centers と共に the Specialized Information System for Energy, Physics and Mathematics のセンターを近く Karlsruhe Nuclear Research Center 内に作ることになる。

ZAEDの関連活動には次のようなものがある：

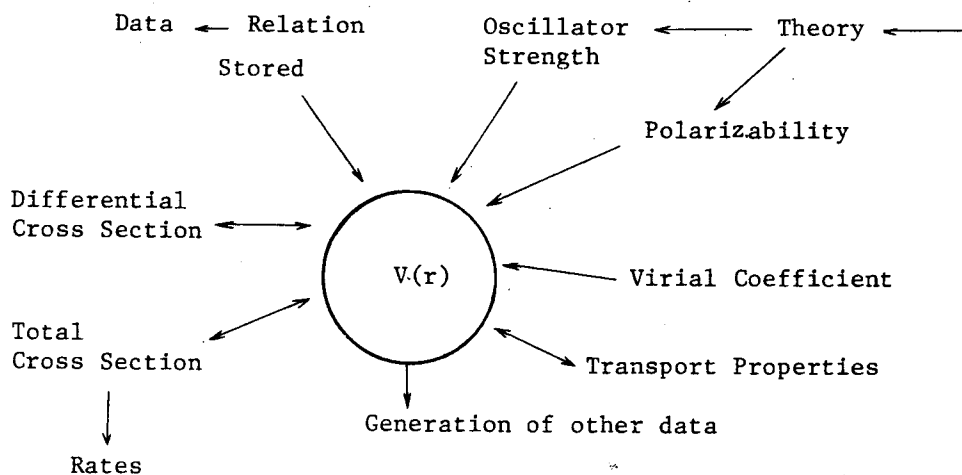
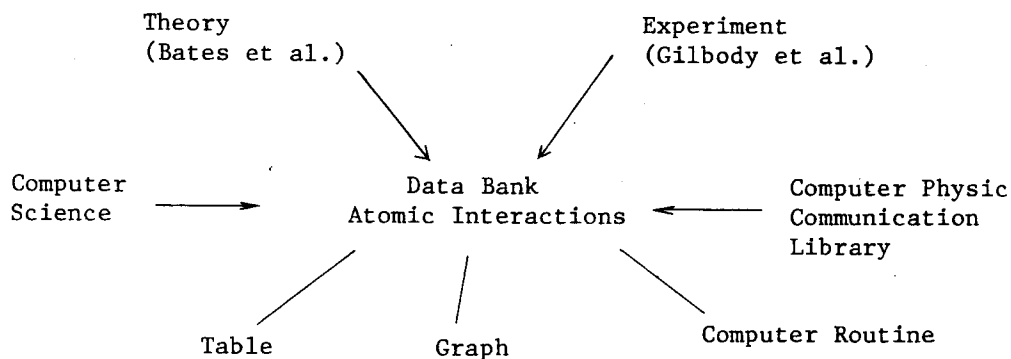
- i) 西独国内の各グループによる物理データに関する編集活動の調整や援助を行う central office の役割,
- ii) a bibliography of worldwide existing table and other data sources の編集 (いわゆる compilations の compilation ; 既に約 1500 の compilations が含まれており、近く約 500 が加わる),
- iii) 物理データの分類体系 (classification scheme) の確立 (Landolt und Börnstein の table の分類をもとに改良し拡張する),
- iv) computerized data services (目下具体的には磁気テープでデータファイルを国内利用者に提供すること),
- v) 国際協力について具体的には、1976年にIAEAによって組織された核構造データの評価に関する国際ネットワークに参加している (これには日本としてはシグマ研究委員会のワーキンググループが参加している)。A + M data に関しても核データ同様に

参加する意志があり、その手始めとして既存の Surface and Vacuum Physics Index をもととして a bibliographic index on surface interaction data を作ろうとしている。

(j) Queen's Univ., Belfast (Smith) :

原子反応 (atomic interactions) に関する data bank として on-line system を開発し使用している。

その概念を図示すると次の如くである :



Queen's University に約 100 の computer terminals がある。terminal が手近にあれば physicist は本を使わず直接 computer file に接するであろう。

このような on-line system の経済性、国際的システムとしての将来性などについて質問があり、Barnett や Wiese などは Smith の説明通りの効用には必ずしも納得していない様子であった。

(k) 原研 (更田) : (省略)

(l) プラズマ研 (鈴木) : (省略)

(m) Kurchatov Institute (Martynenko) :

これまでは特に核融合のためという方向づけはなかったが、これからは明確に核融合を志向する。データ活動は未だ starting period である。現在、専門家のスタッフは full time 1 名と part time 3 名である。

Russian works の references の編集を行っている。分類や format は Barnett の Newsletter と類似している。

Numerical data の compilation も始めた。手始めは炭素の色んなイオンの transition probabilities で、これは carbon limiter の提案や diagnostics などに関連して必要である。

Leningrad の研究所などと情報交換を主とする協力を行っている。

5) Bulletin について

NDS / A + M Data Unit のこの 2 年間の trial period における主な事業は、Bulletin および後述の Bibliographic Index の発行である。

"Quarterly International Bulletin on Atomic and Molecular Data for Fusion Vol. 1, No. 1, April 1977" (本文 28 p., annex 17 p.) の一応出来上った原稿が提出され検討された結果の要点を列挙する。

(a) Bulletin の内容は出来るだけ fusion oriented にする。初めは conservative に、入れるべきかどうか明確でないような領域は切る。この点は bibliographic index なるべく範囲を広くとっておくべきであることと対照的である。

(b) Bulletin に載せるものとしては、work in progress を first priority とし、次に nonconventional literature (laboratory report, thesis, conference paper, preprint の類) に重点を置く。日本語の文献は abstract もつけて情報を送ることが重視される。

([注] 蛇足ながら、"unconventional" が普通だが "non-" も大きな辞書にはある。)

- (c) unpublished data の載せ方について特に format は決めない。
- (d) Bulletin は "unpublished" である。しかし、Bulletin にデータを出したことによって後に journal 等に出すことが妨げられることが起らないように充分配慮する必要がある。
- (e) ORNL (Barnett) の Newsletter の発行は継続する。Barnett としては NDS の Bulletin が彼の Newsletter を無用な重複とすることを確認するまでは少なくともやめる気はない。従って、contributore は ORNL と NDS の双方に duplicate copies を送ること。
- (f) 目次をつけること、配列の順序、形式などについての今回の会合からの注文をとり入れるため、Bulletin の Vol. 1, No. 1 の発行を延ばして 7 月 1 日とする。その後の予定は
- No 2 : contribution 締め切り 8 月 1 日, 発行 10 月 1 日,
 No 3 : " 11 月 1 日, 発行 1 月 1 日,
 以後同様。(その後、No 1 の発行がさらに遅れる模様)
- (g) 日本の 2 センター (原研およびプラ研) は、Bulletin への寄与の期待出来る研究者で NDS のリストからもれている人があれば連絡し、また Bulletin への寄与を個人から直接又は 2 センターのいずれかを通して NDS に送ることを奨励し促進すること。(ただし、日本語の文献について abstract をつけること、energy range をつけること、3 カ月ずつ規則的にカバーすることが望まれる、などを考慮すると 2 センターで systematic にやった方がよいように思われる。)
- (h) 西ドイツは ZAED が、ソ連は Kurchatov Institute が、目下の A+M データ活動に関してそれぞれの国の唯一のセンター*との立場をとっているが、他の国はいずれも複数のセンターがあるか或は特にセンターと言うべきものが無いかで 1 国を唯一のセンターがとりまとめるという体制ではない。(※今回、FRG/Garching を A+M Data C Centre Network から除外することになった。)

Bulletin はソ連を除いては個々の研究者に NDS から直接送付する。

6) A+M Data の範囲と分類

"Basis for a General Classification Scheme for A+M Data for Fusion" by A. Lorenz and K. Katsonis をもとに多少細かい議論も行われた結果、原案にかなり手を加えて添付 4 のリストのような分類となった。また、次のようなリマークや決定があった。

- (a) 分類は open ended system とすべきである。

- (b) particle - surface interactions に関する分類は Ebel と Martynenko が関連専門家の意見を聞いて原案を作成する。
- (c) atomic and molecular collisions に関する詳細な分類とその定義に関する意見を Barnett, Delcroix, Drawin, Itikawa と Smith が 6 月 15 日までに NDS に送る。
- (d) collision について初め原子と分子とを別けていたが一諸にした方が便利である、分類が重複していると検索ミスを起こすことがある、initial state を指定すればより明確になる、cluster を入れろ、等々。

7) 原子分子衝突データの文献索引

当面国際協力により NDS が作成する文献索引 (bibliographic index) は原子分子衝突データ (A+M collision data, 添付 4 の分類の 2) に関するものに限る。これに関するリマークや決定を次に列挙する。

- (a) この bibliographic index が最初に網羅すべき原子分子の範囲 (分子の範囲は最小限としたい) について NDS が fusion community に問うこと。

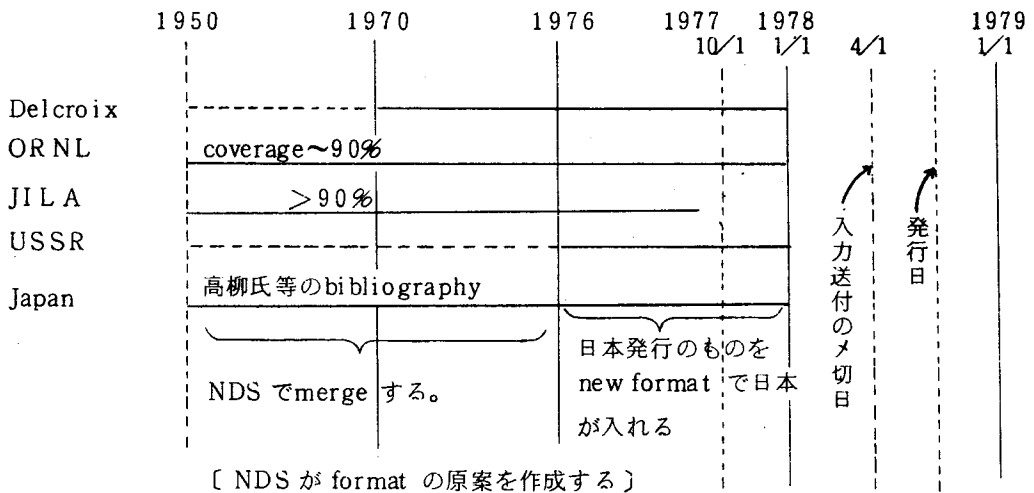
参考: GAPHYOR 中の文献数からみると、添付 4 の分類の 2 の中では collision involving photons が 17%, collision involving electrons が 23%, collision between heavy particles が 60% の割合になる。また, atom 32%, molecule 68% (diatomic 32%, polyatomic 36%) の割合である。

- (b) magnetic confinement devices に関連するものを最優先とする。この会合では inertial confinement devices (laser, electron beam および heavy ion fusion experiments) の関連を除外する意見であったが、後の IFRC/I NDC Subcommittee でこの除外は除かれた。
- (c) エネルギー範囲は、そのデータが原子物理の範囲と考えられる限りの範囲とする。但し、明らかに核融合の興味外とか、経済的に問題がある場合には範囲をより限定することもあり得る。

- (d) 討議の参考のために黒板に次のような条件が挙げられた:

1. Simple (data exchange format) for international exchange.
2. Distinguish inter - centre exchange format from centre in - house format.
(各センターのシステムではそれぞれ独自のフォーマットを使うかもしれないが、それと国際的に情報を交換するためのフォーマットとは区別すること)
3. Data classification of reasonable depth.
4. Index to data, not to references.

5. Economy and convenient use of printed bibliography.
 6. User orientation of the index.
 7. Are titles to be included in the printed product ?
 8. Literature scope
- (e) "List of Information Items Proposed to be Included in Bibliographic Index File for A+M Collision Data" の原案が提出され、討議の結果これに幾つかの修正を加えた。これをもとにNDSが10月1日までにフォーマットの原案を作成して各センターの意見を求める。
- (f) IFRC/INDC Joint Subcommittee に index の網羅すべき年代の範囲と、文献の表題を入れるか否か、および全体の量について意見を求めること。
 全著者名と表題をファイルに入れるが、ファイルの中味をどれだけ全面的に本にするかが問題である。
- (g) 日本は、遅くとも1978年4月1日までに1976年および1977年中の日本発行の文献についての bibliographic references をコンピュータ入力の形でNDSに送ること。
- (h) index 発行に関する time schedule :



8) Collision 以外の A+M Data の文献索引

(a) A+M structure については NBS の文献索引が完備するはずで、これについての情報を Wiese が NDS 及び各センターに送る。

(前の collision index の所で Wiese から、energy level については Fe まだが

完了して残っているのは Ni, Mo, W であり, Wiese の分野で 200~300 文献/年との発言あり。)

- (b) Plasma interaction with surfaces に関しては, Max-Planck-Institut für Plasmaphysik at Garching が 1966 年以来 "Surface and Vacuum Physics Index" (月刊) を発行しており, ZAED が協力してこれを拡張して bibliographic index for surface interaction を来年から作成する計画である。これに関して Ebel からその scope, format, classification scheme, keywords などについて各センターに意見を求めることになっている。

data set の identification において表面の化学的組成を考慮に入れるべきこと, 表面の条件の定量化に問題があること, などのコメントがあった。

- (c) データの調査と評価

データの調査 (review) と評価 (evaluation) に関しては, 各センターが核融合研究者と接触して要求を調べる必要がある。critical review などの仕事を奨励するために IAEA の Report Series を出すことが提案された。"Atomic and Nuclear Data Table" に critical review を投稿することも一つの avenue として考えられる。

この討議の過程で 1976 年 11 月の Culham 会合のような会合が 2 年以内に計画されていることが述べられた。

各国の調査や評価の状況に関する情報を NDS に送ることが要請されている。

10) A+M Collision data の編集と交換

数値データの交換が国際的に定常化するとすれば, それは先ず collision data からであろうが, collision data についてもデータ交換のためのフォーマットを議論するなどはまだ時機尚早とする意見と, 実際に多量のデータが交換されるようになるまでに間があるとしても交換のためのフォーマット (exchange format) は今から考えるべきとする意見がともに述べられた。

評価データについての議論が主で, 実験データの交換についてはより消極的であった。データの交換を早くから促進すべきであるということについて, どちらかと言うと原子分子データの専門家の方が核データ専門家よりも消極的であると思われた。

ここでも exchange format と各センターのシステムの format とは別の問題であることが注意された。

ORNL では Red Book のデータをこの 2~3 か月中にコンピュータ化する予定であるので, そのフォーマットを Barnett から各センターに送る。これに対し出来るだけ早く ORNL と NDS に返事を出すことが要請されている (Barnett としては全てを年内に完了させるた

め)。(なお、Red Book のデータは recommended data である。)

11) Collision 以外の A+M Data の編集と交換

(a) Structure data : Wiese , Martynenko , Suzuki の間で structure data compilation に関する今後数年間のそれぞれの仕事の範囲と計画について詳細を手紙で交換し、重複をさけるようにする。(ただし、或程度の重複は有用な場合も少なくない。)

(b) Surface interaction data および Macroscopic data については討議が省略された。

12) Data Centre Services この議事項目の討議は省略された。

13) 会合のまとめ

各センターに対し、evaluation の計画について NDS へ連絡することを欠かさないようにと重ねて要請された。

Index の重要性について chairman から特に更田にコメントが求められ、CINDA とのアナロジーにおいてその重要性を指摘した。この関連で、要は NDS の manpower が問題であるとのコメントがあった。

この会合から IAEA に対し次の主旨の勧告が出された：

- ① NDS は fusion community と密接に連絡をとるべきである。(NDS のスタッフが fusion laboratories を訪問せよとのコメントあり)
- ② NDS が critical evaluation の具体的奨励(誰かにやらせること)を考えること。

今回の会合は 1978 年 5 月にウィーンで開催の予定であったが、その後 1 年延期することになった模様である。