

核構造データ・ファイルの高度利用

原 研 田 村 務

コンピュータの技術的發展過程はほぼ指数関数的で、6年当り動作速度は10倍、メモリ容量20倍、信頼度10倍部品数1/10倍、価格1/2.5倍となっている。この傾向は新たな技術成果がさらに新しい技術開発のための投資を促し、この分野の成長率がいぜんとして鈍化していないことによると考えられています。このような技術革新は、コンピュータを単なる計算処理のためではなく、データの有効な蓄積・管理へ利用の比重を高めています。科学技術のほとんどすべての分野で、コンピュータ化された文献ファイルが運用されています。BNLや阪大蛋白研究所のProtein Data Bank, ケンブリッジ結晶データ・センターのCrystallographic Fileや多くの化学研究機関で利用されている分子構造情報システムのように数値や文字データのみでなく立体構造の表現を含む高度情報ファイルが情報関係資料に紹介されています。これらのシステムでは多目的利用のための複雑なデータ構造を表現し、多様なアクセスの可能性をもつファイル群をデータベース技法で運用しているようです。

核データの分野でも、文献ファイルとしてCINDA, 数値データとしてNEUDADA, NESTOR, ENDF-Bなどコンピュータ化された多数のファイルにより、この分野の情報流通に大きな役割を果たしておりますが、データベース的に総合化されたシステムはまだないようです。核構造・崩壊データについては従来Nuclear Data SheetsやTable of Isotopes が用いられてきたが、1976年に国際的な評価・普及のためのネットワークが作られEvaluated Nuclear Structure Data File (ENSDF)を採用し、4年のup-datingを決め、現在、定常化をめざして評価に大きな努力が払われております。シグマ研究委員会核構造WGでも質量数118-129を分担し、作業を進行させています。このファイルは多年ORNL核データプロジェクトで刊行が続けられてきたNuclear Data Sheetsをコンピュータ化する過程で作られたもので、現在のファイル規模は 2.5×10^5 レコード(80カラム・カード・イメージ)であり、定常化する1981年頃には $1 \sim 2 \times 10^7$ レコードになると予測されます。ファイル構造はエネルギー単位や崩壊様式図から個々のレベルや放射線に分解し、それらの順序、崩壊のモード、従属関係など図形的な表現を含め、さらに半減期、スピン、パリティ、エネルギー、強度などの属性データ、文献キー・ワード、コメントなどを附加したもので構成され、ほぼすべての核構造情報を網羅しています。

このファイルのもっとも直接的な利用は Nuclear Data Sheet の発刊のための崩壊様式図やレベル、 γ 線などの表の作成でありますが、様々の計算や処理に必要な入力データを直接得るためのマスタ・ファイルとしての役割を果し得ると考えられます。原子力分野での応用としては崩壊熱評価、燃料サイクル評価、環境安全性評価、生物・医学における線量評価など、このファイルを直接あるいは間接的に利用することができ、線量評価では MEDLIST プログラムが供用できます。核物理研究の分野では、データ検索によって、バンド構造、B(E2)、logft、半減期などの系統性を調べることに試みられています。さらに核種の分析では、ファイルからのデータを用いた自動的な解析を行うプログラムも考えられます。

以上のように多様な目的を意図したマスタ・ファイル利用では入力データの均一性や、統一的な up-dating が可能であるなどいくつかの有利な条件があります。しかしながら特定の計算や処理を目的とした個別ファイルに比べて、データが複雑な構造をもち、記憶容量の増大に伴うコンピューターへの負担の増加も無視できません。この点、マスタ・ファイルから適当なフィルタを通して必要な核データセット、核データ項目だけを再編集したサブ・ファイルの利用が有効と考えられます。核分裂生成物の崩壊データ・ファイルや超アクチニウム核種の崩壊データ・ファイルなどの作成が有用と思われれます。

ENSDFへアクセスは PL/I やアセンブラ言語に有利ですが、最近 FORTRAN による出力サブルーチンが作られ、ENSDF 処理コードのいくつかが運用できるようになりました。しかしながら様々な目的でのデータ検索では、ENSDF よりメイン・プログラムへデータを移すための柔軟なデータ変換システムが作られ、メイン・プログラムを含めて、効率の高い運用をはかっている必要があります。

このファイル固有の問題ではありませんが、コンピューターからの出力では、大文字、小文字、ギリシャ文字特殊記号などの印字能力をもつプリンターの整備が望まれます。

以上、核構造データ・ファイルの有効な利用を計って行くうえでの問題点を探ってみました。現在、利用のためのソフトウェアは皆無に近く、今後の整備にかかっています。はじめの部分で紹介しました Protein Data Bank や結晶あるいは分子構造データ管理システムなどの例が非常に参考になると思われれます。今後の進め方について、核データ関係の方々をはじめ周辺分野の方々からの御助言や御支援を希望いたします。