

## Raynal の ECIS から教わったこと, そして JENDL-3

ロスアラモス国立研究所

河野 俊彦

[kawano@lanl.gov](mailto:kawano@lanl.gov)

### 1. はじめに

チャンネル結合計算コード ECIS (Equations Couplées en Itérations Séquentielles) の作者として知られる Jacques Raynal 氏の訃報が5月に流れてきた。Jacques Raynal はとても変わった方で、世界中で利用されている計算コードの作者としてあまりに有名な一方、彼が執筆した論文はほんの数えるほどしかない (例えば [1, 2, 3])。元々の専門は数学とのことである。その一方、コンピュータ・プログラムの作成という形で、原子核物理学への大きな貢献を成し、実際 Google Scholar で “ECIS Raynal” で検索すれば 1000 件以上がヒットする。

そんな Jacques の業績に敬意を表し、CEA が2つの記念行事を企画しているとの連絡を受けた。まずはワークショップの開催であるが、パンデミックの広がる現状では来年以後にならざるを得ない。そして物理雑誌で追悼特集号を企画しており、そこへの論文執筆依頼である。自分の Jacques との直接の会話は限られているものの、ECIS との付き合いは長い。自分のコード作成で ECIS を参考にしているので、この依頼を受けることにした。ECIS の技術上の特徴を絡めた CoH<sub>3</sub> コード [4] の開発について書くことにしたが、通常の論文には書きにくい ECIS の変わった特徴や、Jacques 本人のエピソードも幾つか記憶に残っている。本稿ではそんな話題を提供したいと思う。ちなみに確認しようのない事柄については自分の記憶を頼りに書いているので、もしかすると記憶違いもあるかもしれないことを予めお断りしておく。

なお最近では ECIS を英語風に「イーシス」と発音する人が多いが、フランス語圏でははっきり「エシス」と読まれる。以下アルファベット表記 ECIS のままであるが、読者にはこれを「エシス」と黙読して頂きたい。

### 2. ECIS 作者との邂逅

Jacques Raynal 氏の所属は CEA/Saclay であるが、彼と最初に出会ったのはそこからほど近い CEA/Bruyères-le-Châtel のほうである。リタイア後すでに何年も経っており、もっぱら自宅でプログラムを作り続けているようだった。自分の知る限り、彼は ECIS と DWBA の2つのコード開発をライフワークにしていたようである。これらのコードにはありとあらゆる

巨視的・微視的な原子核反応理論が詰め込まれており、それが近づきにくさの理由の一つにもなっている。その近づきにくさのもうひとつの象徴が氏の風貌で、それはもう一度会ったら全く忘れられないほど印象的なものである。長髪白髪に長い白髭、フランスの友人から fakir という英単語を教えてもらったが、ポストクラが親しみを込めて呼んでいたガンダルフのほうがしっくりくる。

Jacques との会話は困難を極めた。もちろん英会話であるが、非常に聞き取りにくい話し方をされる。ところがフランスの友人らは、彼の英会話は理解しやすいと言うのである。そしてもし彼らがフランス語で会話すると、Jacques の話の内容は全く頭に入ってこないらしい。どういうことなのか。Jacques の頭の回転があまりに速すぎて、言葉がそれに追いつかないらしい。そんな時、英会話にスイッチすると会話にブレーキがかかるので、フランス人でもようやく彼の話が理解できるんだとか。

その時の Jacques との詳しい会話内容は未だに不明であるが、とにかく何かを読んでみてくれと言っていることは理解できたので、おそらく論文だろうと思って Yes と答えておいた。そしてその後、彼からどっさり届けられた紙の束はメールのやりとりを全部印刷したものであった。当時 Jacques とメルボルン大学の K. Amos 氏の間でちょっとした論争が起こっており、そのこと自体は知っていたものの、まさかその全てのやりとりを印刷してくるとは夢にも思わなかった。ぱらぱらとめくって見たものの、内容はどうやらスピン軌道相互作用の変形というかなり難解なもので、さすがに全部読む気にはなれず、今でも記念にしまっている。

### 3. 九大での ECIS の導入と利用

#### 3.1 驚異的な FORTRAN ソースコード

「ECIS というすごいコードがある」、誰かからそう最初に聞いたのは、おそらく ELIESE-3 や GNASH を解読していた学生の頃だった。そしてその次に覚えている噂は「あのコードは動かせない」であった。おそらくは当時の原研が入手し、それを人伝に入手したのだと思う。ソースコードのコピーには寛容な時代であった。1988 年のバージョンのソースコードは 1 万 6 千行以上あり、それを九大の大型計算機センターで全部印刷した。二つ折りにして綴ると 2cm 以上の厚みになる (図 1)。一部アセンブラで書かれていることを確認したが、それは Clebsch-Gordan 係数等を高速に計算するためのもので、普通に FORTRAN で書かれた部分もあり、幾つかの簡単な変更でコンパイルできたはずである。自分の論文で最初に ECIS が出てくるのは 1993 年の核データ研究会の報文集 [5] で、1998 年の DWBA に関するもの [6] では ECIS を重点的に利用していたようである。

入力ファイルの作成に少々癖があったのも、動かせないと言われた理由だったように思う。簡単なマニュアルはあるものの、多くのキーワードが少々専門的かつ文献に限られていたので、意味の調べようもない。例えば原子核の励起エネルギーを入力するところがあるが、その基底状態にはゼロを入力するのではなく、入射粒子の実験室系でのエネルギーを書く。入射粒子の種別を書くところは無く、代わりに粒子と標的核の電荷の積 ( $Z_{\text{targ}} Z_{\text{proj}}$ ) を入力する。この数字がゼロなら中性子入射計算と推測できるが、陽子が中性子星に入射する場合と区別はつかない。

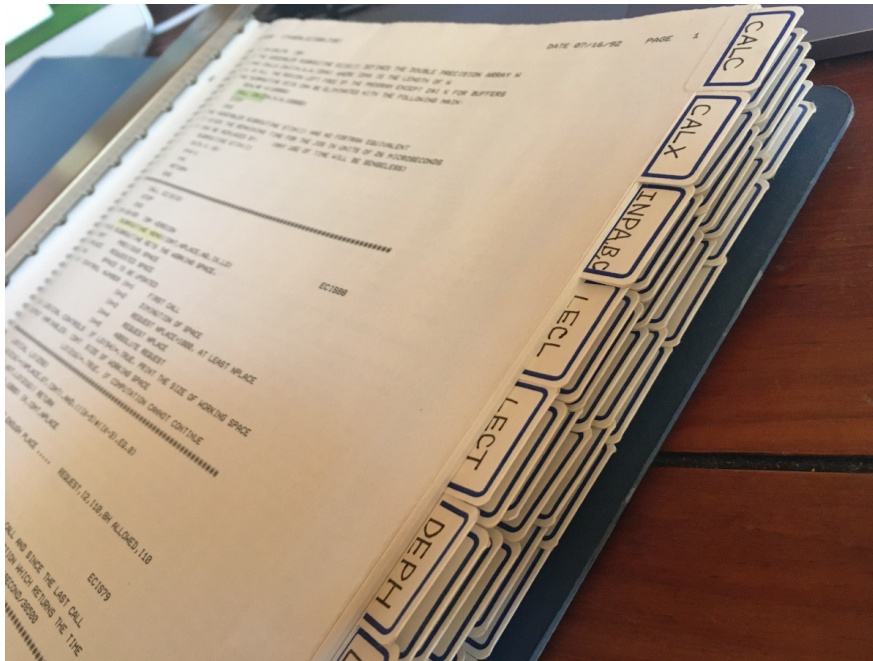


図1 ECIS88のソースコードを印刷。

入力作成を理解するのに真っ先に思いつくのがソースコードを読んで、データを理解する方法である。自分も印刷したソースを頭から読み始めて、絶望した。

GO TO 文の多い古いスタイルの FORTRAN が読みにくいのは仕方ないにしても、プログラムの書き方があまりに完璧すぎて理解できないのである。以下はソースコードの一部をランダムに切り取ったものである。

```

38 IF (LO(100)) GO TO 39
   P(27,K)=P(27,K)-ZZ(2)*C1*P(K+27,J)*B(I,K)/R**2
   P(24,K)=P(24,K)-ZZ(2)*C2*P(K+27,J)*B(I,K)/R
   GO TO 41
39 P(27,K)=P(27,K)-ZZ(2)*C2*P(K+27,J)*B(I,K)
   P(24,K)=P(24,K)+ZZ(2)*C1*P(K+27,J)*B(I,K)
   GO TO 41
40 P(I+16,K)=P(I+16,K)+ZZ(I-6)*C1*P(K+27,J)*B(I,K)

```

変数の説明も無く、何をしているのかさっぱり分からないが、24と27番目になにか意味がありそうである。そして文番号38, 39, 40に見られるように、全ての文番号が1から順番に振られている。通常は将来のプログラム修正を見越して380, 390とかにしておかないと、番号がずれたときに全部の文番号を修正する必要が生じる。なので当初、これはきっと何か統合開発環境を使って、自動的に番号を付けているんだと理解していた。ところがフランス人の友人が言うに、あれは全部手で付けているとのこと。修正があれば全部直しているのかもしれないが、おそらく Jacques の頭の中ではキーボードをタイプする段階で既にプログラムは完成しているのではとのこと。

もう一点、ECIS の驚異的な所は、コードマニュアルである。データ入力最初の行に DESCRIPTION とだけ書いて ECIS を走らせると、自動的に整形された(それが理解可能かどうかはさておき)マニュアルが出力される。これが実は FORTRAN の FORMAT 文だけで作られている。コードの最初の部分だけ示すと、以下のようになっている。

```

1000 FORMAT ('C 05/03/07',62X,'ECIS-000'/15X,'DESCRIPTION OF INPUT OF E
1CIS06',27X,'ECIS-001'/15X,'*****',27X,'EC
2IS-002'/72X,'ECIS-003'/72X,'ECIS-004'/72X,'ECIS-005'/' CARDS READ I
3N SUBROUTINE CALX',43X,'ECIS-006'/'*****',
443X,'ECIS-007'/72X,'ECIS-008'/' CARD 1',34X,'FORMAT (18A4)',19X,'EC
5IS-009'/'*****',66X,'ECIS-010'/6X,'TITLE OF THE RUN WHICH WILL BE
6 PRINTED AS HEADING OF RESULTS.',5X,'ECIS-011'/72X,'ECIS-012'/6X,'

```

これをコンパイルして走らせると、以下のような整形されたマニュアルが印刷される。

```

C 05/03/07          DESCRIPTION OF INPUT OF ECIS06          ECIS-000
                   *****          ECIS-001
                   ECIS-002
                   ECIS-003
                   ECIS-004
                   ECIS-005
CARDS READ IN SUBROUTINE CALX          ECIS-006
*****          ECIS-007
                   ECIS-008
CARD 1          FORMAT (18A4)          ECIS-009
*****          ECIS-010
                   TITLE OF THE RUN WHICH WILL BE PRINTED AS HEADING OF RESULTS. ECIS-011
                   ECIS-012

```

これを見て、まずマニュアルのテキストファイルを用意し、それを FORTRAN の FORMAT 文に整形するスクリプトを書いているものばかり思っていたが、どうやら本当に全て手入力らしい。どうせならマニュアルをコメント文としてソースコードの中に埋め込めばとも思うが、常人には理解できないところである。

ちなみに入力ファイルの終わりには、FIN と入力する。END でも QUIT でも無いところが、フランス人の面目躍如たる部分である。CoH コードは END を読んだ時点で入力終わりとして認識して計算を開始するが、OWARI もしくは KEIGU への変更を検討中である。

### 3.2 JENDL-3 での ECIS の利用

JENDL-3.2 の  $^{238}\text{U}$  の低エネルギー領域の評価は ECIS 計算である [5]。ECIS はチャンネル結合法による直接反応だけでなく、複合核反応もある程度できるので、それを非弾性散乱と捕獲反応評価に利用することにした。回転バンド準位のみならず振動準位も同時に結合したり、チャンネル結合法で得られる非対角要素を含む  $S$  行列から一般化透過係数を計算したり [7]、その  $S$  行列を対角化した上で幅の揺らぎの補正を行う、いわゆる Engelbrecht-Weidenmüller 変換 [8] を行うオプションを用いたり、当時としてはかなり凝った計算であった。もともと実際は ECIS を走らせただけの話であり、画期的なのは ECIS に含まれる物理である。

CoH は ver.2 の時代から、一般化透過係数を用いた複合核反応を行っている [9]。Engelbrecht-Weidenmüller 変換を用いた直接過程を含む複合核反応の正確な計算は、ここ数年になってようやく核データ評価にも簡単に利用できるようになってきた手法である。CoH<sub>3</sub> にもようやくこの変換が搭載されたが [10]、ECIS はその数十年前に実現していたのである。もちろん ECIS の複合核反応計算機能は限られているので、同列に扱うものではないが、Jacques の先見性を垣間見る一つの例である。

ECIS という名前はチャンネル結合方程式を反復法を用いて解くことに由来している。チャンネル結合計算では大量の記憶と計算量が必要となるが、Jacques は反復法でそれを効率的に減らすことに成功している。他方、反復計算の収束に少々コツが必要で、うまくいかないときは通常のチャンネル結合計算に戻らざるを得ない。JENDL-3.2 評価当時、MIPS 社の R3000 を搭載した Sony NEWS を利用していたが、反復法ならエネルギー一点あたり数分で終わる計

算が通常のチャンネル結合法だと1時間以上かかることもあり、夜を徹しての計算だったことを覚えている。

図2の実線は当時 ECIS で計算して JENDL-3.2 の評価値とした  $^{238}\text{U}$  の第一励起準位と第二励起準位への非弾性散乱断面積である。自分なりに凝った計算をした積もりであったが、JENDL-4 [11] では CCONE [12, 13] による普通の計算に置き換えられてしまった。参考まで  $\text{CoH}_3$  の計算値(一点鎖線)も比較してプロットしてあるが、低いエネルギーで非弾性散乱を1割ほど高く見積もる傾向がある。 $\text{CoH}_3$  の計算値が CCONE より高く出るのは、以前行われたコード比較でも確認されている [14]。

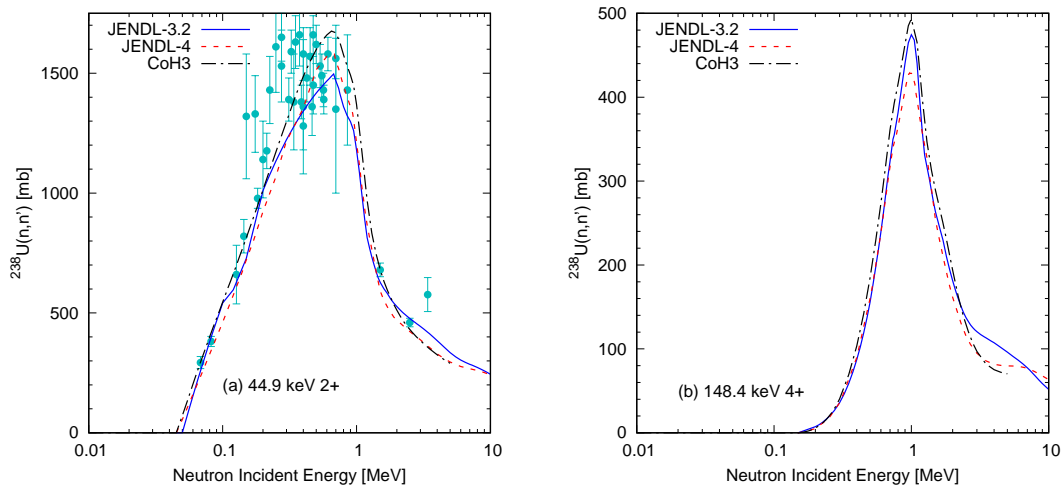


図2  $^{238}\text{U}$  の第一励起準位，第二励起準位への非弾性散乱断面積計算値と評価値。

ところで JENDL-3.2 の  $\beta$  版が公開された後のある日のこと、この非弾性散乱評価について原研からの問い合わせの電話がかかってきた。ベンチマーク計算の結果がよくないから、非弾性散乱断面積を下げられないかという内容である。その根拠は ENDF/B-VI の数値に比べて JENDL が高いからということであった。純粋に計算に基づく評価だったのでそれなりの調整余地はあり得るものの、何故か当時の自分は調整を潔しとせず、かなり強くこれはこうなるべきだと主張した。電話会議は3時間以上にわたって紛糾したが、結局ベンチマークに合わせるという妥協はせず、ECIS の計算結果を押し通した。博士課程出たての青二才の根拠曖昧な主張に、電話の相手はさぞや苛ついたことと思われる。ちなみにその相手は、海外の研究者からサムライと恐れられた核データセンターの室長である。

#### 4. おわりに、教科書としてのコンピュータ・プログラム

ECIS の物理を解説した記事は、Saclay のレポート [15] くらいしか見当たらないが、微分方程式の数値解法や Dirac 形式から Schrödinger 形式への変換など、計算物理学のアイデアが詰まったものである。自分が  $\text{CoH}$  にチャンネル結合計算を追加したとき、最初 ELIESE-3 のように Fox-Goodwin 法を用いて波動関数を積分する方法を試みたものうまくいかず、ECIS を参考に修正 Numerov 法に切り替えた。



量子力学的な計算には、Clebsch-Gordan 係数や Racha 係数などの角運動量合成が必ず含まれるが、これを一般式で計算すると非常に時間がかかる。ECIS では巧みに場合分けを行って予め係数を簡単な式に書き直して計算を高速化しているが、これは非常に参考になった。学生時代に書いた角運動量合成計算コードは、現行 CoH<sub>3</sub> のみならず、DeCE コード [16] の中で共鳴パラメータから角度分布を計算する際にも使われている。

先にも書いたように、ECIS そのものはあまりに整然となりすぎて逆に非常に読みにくいコードではあるが、丁寧に読めばそれなりに理解できる。30 年前に ECIS を解読しようと努力した形跡も残っている (図 3)。以前、チャンネル結合法の飽和が問題になり [17]、Thompson 氏の FRESCO、自分の CoH<sub>3</sub>、それに Dietrich 氏が ECIS を走らせて、数値計算結果を詳細に比較したことがあった。結果は、ECIS と CoH<sub>3</sub> がほぼ同一の結果を与え、FRESCO は僅かにずれているように見えた。これは FRESCO に問題があるというわけではなく、おそらく数値計算上の誤差である。Coulomb 関数の問題かもしれないと話ただけで、深入りはしなかった。

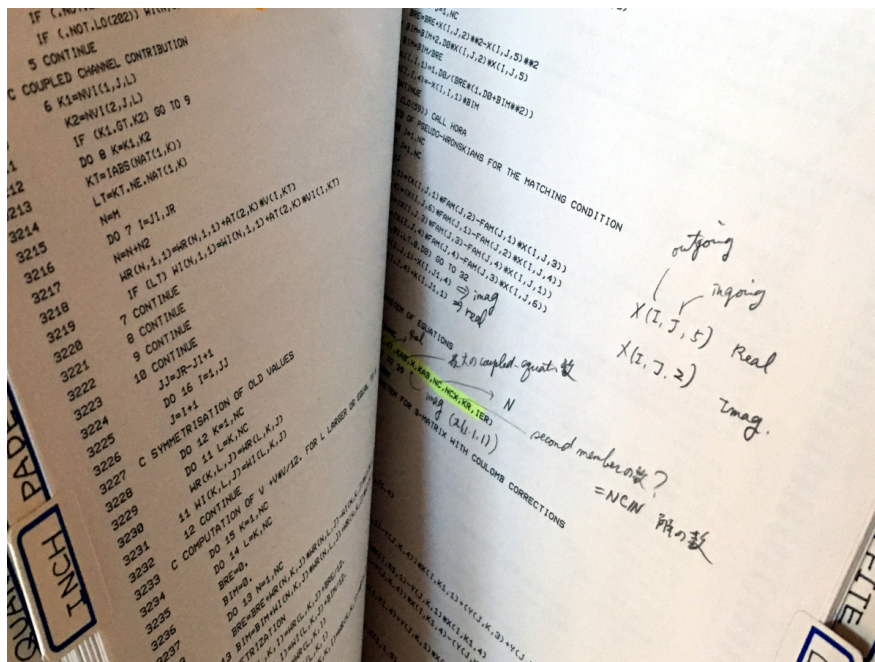


図 3 ECIS を解読。

実はその時、ちょっとばかりカンニングした。CoH<sub>3</sub> は荷電粒子入射での閉じたチャンネルには対応していなかった。負のエネルギーでの Coulomb 関数は Whittaker 関数と呼ばれ、計算に少々テクニックを要するものである。チャンネル飽和问题のときのコード比較では中性子のみ考慮したので Coulomb 関数は関係ないが、ふと ECIS はどうやって Whittaker 関数を計算してるのかとソースコードを再び追いかけた。それなりの忍耐は必要であるが、ソースコードが物理の教科書となる格好の例である。

Jacques が日本を訪れたときのこと。彼がお土産にと吉田思郎教授に手渡したのは一枚のフロッピーディスクだったらしい。そこに入っていたのは、Coulomb 関数の計算コードだったんだとか。

Jacques との通常の会話は簡単ではなかったが、プログラムという言葉を通じて彼から理論物理学を学ぶことができた。かつて Karlsruhe に滞在し F.H. Fröhner 氏と仕事をしていた時のこと。何かの折りに彼が「実際に何かのプログラムを書いて自分で計算してみて、初めて自分はその理論を理解できたと言える」と語ったことがある。少々遠回りかもしれないが、本当にそうだと思う。今では後輩らに CoH<sub>3</sub> のソースコードを読むよう激励しているが、皆あまり気が乗らないようである。

## 参考文献

- [1] J. Raynal, “Multipole expansion of a two-body interaction in helicity formalism and its applications to nuclear structure and nuclear reaction calculations,” *Nucl. Phys. A*, **97**, 572 (1967).
- [2] J. Raynal, “Recurrence relations for distorted-wave born approximation coulomb excitation integrals and their use in coupled channel calculations,” *Phys. Rev. C*, **23**, 2571 (1981).
- [3] J. Raynal, “Ambiguity on the imaginary potentials in the dirac formalism for the elastic and the inelastic scattering of nucleons,” *Phys. Lett. B*, **196**, 7 (1987).
- [4] T. Kawano, “CoH<sub>3</sub>: The coupled-channels and hauser-feshbach code,” (2019), Proc. CNR2018: International Workshop on Compound Nucleus and Related Topics, LBNL, Berkeley, CA, USA, September 24 – 28, 2018, J. Escher (Ed.).
- [5] T. Kawano, N. Fujikawa, and Y. Kanda, “Evaluation of <sup>238</sup>U Inelastic Scattering Cross Section,” *JAERI-M*, **94-019**, 290 (1994), Proc. of the 1993 Symposium on Nuclear Data, 18 – 19 Nov., 1993, JAERI, Tokai, Japan, Eds. M. Kawai and T. Fukahori.
- [6] T. Kawano, Y. Watanabe, and M. Kawai, “Validity of DWBA calculations for neutron inelastic scattering from molybdenum isotopes,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **35**, 519 (1998).
- [7] G. R. Satchler, “Average compound nucleus cross sections in the continuum,” *Phys. Lett.*, **7**, 55 (1963).
- [8] C. A. Engelbrecht and H. A. Weidenmüller, “Hauser-Feshbach theory and Ericson fluctuations in the presence of direct reactions,” *Phys. Rev. C*, **8**, 859 (1973).
- [9] T. Kawano, P. Talou, J. E. Lynn, M. B. Chadwick, and D. G. Madland, “Calculation of nuclear reaction cross sections on excited nuclei with the coupled-channels method,” *Phys. Rev. C*, **80**, 024611 (2009).
- [10] T. Kawano, R. Capote, S. Hilaire, and P. Chau Huu-Tai, “Statistical Hauser-Feshbach theory with width-fluctuation correction including direct reaction channels for neutron-induced reactions at low energies,” *Phys. Rev. C*, **94**, 014612 (2016).
- [11] K. Shibata, O. Iwamoto, T. Nakagawa, N. Iwamoto, A. Ichihara, S. Kunieda, S. Chiba, K. Furutaka, N. Otuka, T. Ohsawa, T. Murata, H. Matsunobu, A. Zukeran, S. Kamada, and

- J. Katakura, “JENDL-4.0: A new library for nuclear science and engineering,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **48**, 1 (2011).
- [12] O. Iwamoto, “Development of a comprehensive code for nuclear data evaluation, CCONE, and validation using neutron-induced cross sections for uranium isotopes,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **44**, 687 (2007).
- [13] O. Iwamoto, N. Iwamoto, S. Kunieda, F. Minato, and K. Shibata, “The CCONE code system and its application to nuclear data evaluation for fission and other reactions,” *Nucl. Data Sheets*, **131**, 259 (2016), Special Issue on Nuclear Reaction Data.
- [14] R. Capote, S. Hilaire, O. Iwamoto, T. Kawano, and M. Sin, “Inter-comparison of Hauser-Feshbach model codes toward better actinide evaluations,” *EPJ Web Conf.*, **146**, 12034 (2017), Proc. ND 2016: International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Bruges, Belgium, September 11 – 16, 2016, A. Plompen, F.-J. Hamsch, P. Schillebeeckx, W. Mondelaers, J. Heyse, S. Kopecky, P. Siegler and S. Oberstedt (Eds.).
- [15] J. Raynal, “Note on ECIS94,” Tech. Rep. CEA-N-2772 (1994).
- [16] T. Kawano, “DeCE: the endf-6 data interface and nuclear data evaluation assist code,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **56**, 1029 (2019).
- [17] F. S. Dietrich, I. J. Thompson, and T. Kawano, “Target-state dependence of cross sections for reactions on statically deformed nuclei,” *Phys. Rev. C*, **85**, 044611 (2012).