



Nuclear Model Code Meeting 2002

九州大学総合理工学研究院

河野 俊彦

kawano@aees.kyushu-u.ac.jp

2002年のIRMM (Geel)でのWPEC開催前2日間(5月21日、22日)、WPECと同じ場所で核反応モデルコード開発に関する会合が開かれました。この会合は今年の4月にSanta FeのLa Posadaホテルで行われたものの続きという位置づけで、IAEAのM. Herman氏が中心になって活動しているものです。前回の会合の様子は、千葉氏(原研)が核データニュース No.69, p.56 (2001)に紹介されておりますので、そちらも合わせて御覧ください。Santa Feの会合ではホテルが町中にありましたので、ちょっとだけ観光気分を味わうことができましたが、今回はIRMMの中の会議室とKasterleeという町(村?)のホテルを往復するだけでした。レストランの選択肢もあまり無く、会議参加者全員で一緒に夕食、という感じです。毎食「横メシ¹」は疲れます。

今年は日本からは、柴田氏(原研)と私の2名が参加しました。会議の趣旨は、実は少々曖昧なところあるのですが、要するにGNASHのような前平衡+Hauser-Feshbach統計模型計算プログラムを作成しているグループが、お互いに協力するための場といった感じでした。WPECと抱き合わせの形で開かれているのは、WPEC Subgroup A, “Nuclear Model Codes” (Co-ordinator: M. Chadwick, A. Koning)の活動とオーバーラップしているためですが、IAEAの元でのRIPLとの連携も大きな柱となっており、実際参加者の何人かはRIPL組を兼ねています。

昨年は核理論に関する話題に1日を割き、2日目にコードの討論を行いました。今年はプログラミングそのものに主眼が置かれ、核理論に関する議論はあまりありませんでした。理論の妥当性などを検討していたらいつまで経ってもコードができないので、とにかく技術的なトピックスに絞って開発を進めよう、ということらしいです。そのため、もっとも多く議論された内容は、コーディングに用いる言語とスタイルに関するものでした。

¹ 横向きに書く言葉を話しながらの食事。一般に消化に悪い。

ここで言うコードとは、核反応断面積計算コードの一つ、HF 統計模型計算プログラムを暗に指しています。日本では GNASH が良く知られていますが、その他に M. Herman による EMPIRE、A. Koning らの TALYS、そして GNASH の後継の McGNASH が開発されています。TNG や STAPRE などと同じ種類のコードですが、ここでは取り上げられていません。今回の会合でも、まず各コードの開発現状が報告されました。すでに GNASH のようなコードがあるのに、なぜ新たに似たようなプログラムを書く必要があるのかは諸般の理由によりますが、例えば GNASH に何か新しい機能を追加したいとき、それを改造するのが如何に困難かは、SPECTRA サブルーチンを一度でも読んだことがある方なら分かると思います。

現在、GNASH の新しい version である McGNASH が LANL の理論グループで開発されています。元々は M. Chadwick によって作られていたもので、Mc(Mac)はスコットランドやアイルランドの姓につく の息子の意味という説と、誰かさんが自分のイニシャルをちゃっかり付けたという説があります。最近になって、P. Talou が Fortran90, 95 を使って McGNASH を書き直す作業を行っており、2 つの McGNASH が存在すると言う、少々ややこしい状況になっているようです。McGNASH の簡単な紹介が、核データ部会 NDD Newsletter No.32 (2002)にあります。

JEFF 関連では、A. Koning, S. Hilaire, M. Duijvestijn が開発している TALYS コードがあります。これも GNASH と同等(それ以上?)の計算をすることができるそうです。ちなみに「タリス」とはパリとブリュッセルを結ぶ TGV の名前“THALYS”から来ているようですが、“H”が抜かれています(フランス人の発音の問題?)。TALYS のかなり詳しい紹介も NDD Newsletter No.32 に出ておりますので、そちらを参照してください。

M. Herman 氏は、すでに公開されている EMPIRE コードの開発を続けており、これを用いて実際に核データ評価を行った例が、昨年 の ND2001 でも報告されておりました。EMPIRE-II は以下の場所からダウンロード可能です。

<http://www-nds.iaea.or.at/empire/>

会合の議論では、コード開発に用いる言語に関する話題が多くを占めました。P. Talou は Fortran90 や 95 を使う利点の説明を行い、さらにコードをできるだけモジュール化してそれぞれのプロジェクトでの共有をはかり、開発の効率を上げることを提案しています。ただ、ここでの話は C や C++ では常識の事柄だったので、なぜそこまで Fortran にこだわるのか、私には今一つ理解できませんでした。とにかく FORTRAN77 はもう止めましょうという話で、TALYS と EMPIRE もできるだけ Fortran90 に移行する予定です。

もっとも、ECIS のような FORTRAN77 のコードが組み込まれているので、それらは結局 Black Box として扱わざるをえないことになり、全てを Fortran90 に移行するのは不可能です。また、開発基盤として Linux が使われており、open source の FORTRAN コンパイラが g77 しか無いという事も、コード開発の上だけではなく、コードのユーザ(核デ

ータ評価者)にとっても問題になります。

その他の議論として、コード開発に役立つようなプログラムやサブルーチン等を書いている参加者から、それらの紹介がなされました。KAERI の J. Chang はスプライン関数を計算するコードを、M. Avrigeanu は光学ポテンシャルを微視的に計算するコードを紹介しました。また、A. Ignatyuk は核分裂計算に関するモジュールを提供するそうです。私は C で書かれた光学模型、統計模型、DWBA 計算等のコードを紹介しましたが、この場においては、C は方言扱いです。

最終的には、各開発者が所有している種々のプログラムあるいはその断片をモジュール化してライブラリとして公開し、今後の開発に利用しようということで話がまとまりました。このようなコード(あるいはコードシステム)には、ECIS の様な他人が作ったものが組み込まれており、これらを安易にライブラリ化して公開するのは、copyright に関してかなり問題がある気がします。私はこの件について発言しましたが、copyright があると誰もプログラムを変更できなくなるので困るという勘違いや、GPL(copy left)にしておけば良いと言った少々安易な発言が相次ぎました。copyright について理解を得るには時間がかかりそうですが、開発されたモジュールを Web 等で一般公開しようとしていますので、この問題にはすぐに直面すると思います。なお、Web の方は LANL の P. Talou が準備中です。現在はメールにて議論が続けられています。