

ポテンシャル散乱の Web オンライン計算*

On-Line Calculations of Potential Scattering for Web

勝間正彦

北海道大学知識メディアラボラトリ

M. KATSUMA

Meme Media Laboratory, Hokkaido University

Abstract

OLCoPS (On-line calculations of potential scattering for web) is made and opened to the public. OLCOPS is a kind of on-line calculation programs that are used through a Web browser. In this report, overview of OLCOPS and how to use it are shown. A typical example for usage of this program is also shown.

1. はじめに

JCPRG における核データ活動は、主に次の4つからなる [1,2]。(1) 実験データを収集する「データ収集活動」、(2) 核反応データセンターネットワークのメンバーとしての「国際協力活動」、(3) 大型計算機センター、Web を通じた「データ公開活動」、(4) 収集されたデータを評価する「データ評価活動」。(1) については、近年、オンラインエディタ"HENDEL" [3] を用いた論文データ採録システムの作成と改良を通して盛んに行われている。HENDEL を用いた採録方法の進展の結果、採録時に用いられる複雑な用語に習知することなく、論文採録作業が行えるようになってきた。(2) についても、NRDF ファイルを国際的な核データ交換フォーマット(EXFOR)に変換する作業が進んでいる。(3) については、NRDF 用データ検索・表示システム"DARPE" [4] が開発され利用されている。

しかしながら、データ評価活動については、まだ十分進展していない。高エネルギー核反応シミュレーションを Web 上で行う"JAMming on the Web" [2] が 2001 年に開発されているのみである。

今回、オンライン評価システムの第2段として、"OLCoPS (On-Line Calculations of Potential Scattering for Web)"の開発を行った。OLCoPS は、光学模型 (ポテンシャル散乱) の計算を行う Web オンライン計算ツールである。光学模型は、低エネルギー原子核弾性散乱を記述する模型で、すべての低エネルギー原子核反応の基本となる模型である [5]。論文中の光学ポテンシャルパラメータを OLCOPS に入力すると、光学模型計算が Web ブラウザ上で再現できる。この再現計算を基に、標的核や入射エネルギーなどを変更することによって、実験データが存在しないところでもある程度の予測値を求めることができる。

* Web ブラウザ上で数値計算を処理する手法を「Web オンライン計算」と呼ぶことにする。

このレポートでは、

- 2. OLCoPS の操作方法
 - ◇ 2. 1 OLCoPS の動作概要
 - ◇ 2. 2 入力データ
 - ◇ 2. 3 OLCoPS FORTRAN プログラム
 - ◇ 2. 4 出力
- 3. 実行例
- 4. まとめと議論

の順で記述する。

2. OLCoPSの操作方法

2.1 OLCoPSの動作概要

Web オンライン計算ツール OLCoPS の動作概要を図1示す。

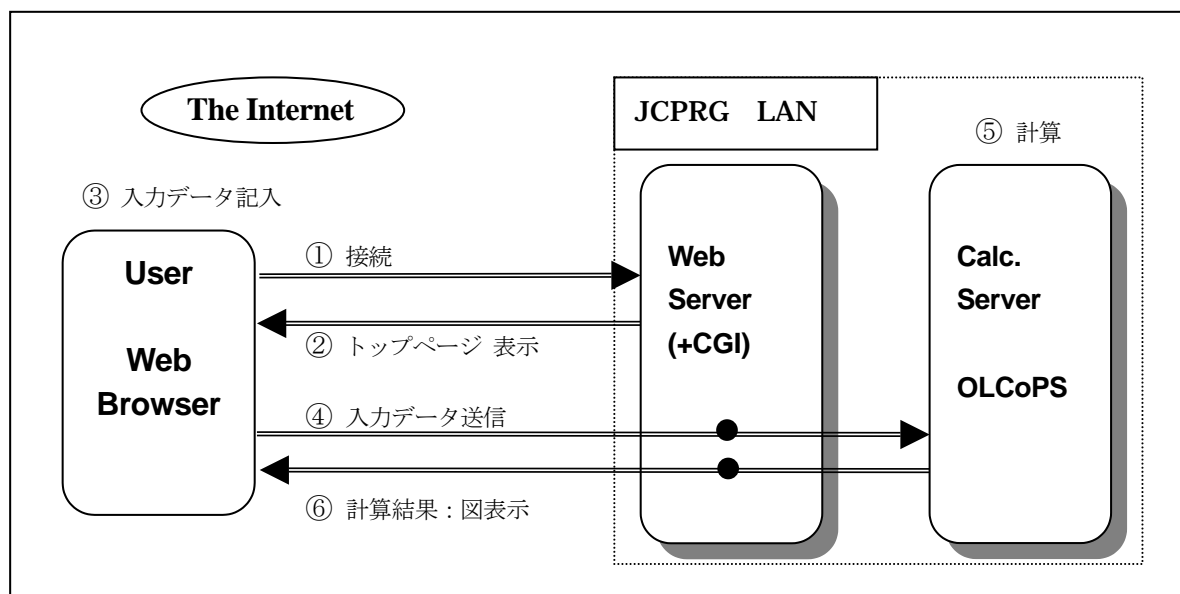


図1：Web オンライン計算ツール OLCoPS の基本動作概要

基本動作

- ① ユーザは **Web** ブラウザを通して **JCPRG** の **Web** サーバに接続する。
- ② トップページ (図2) が表示される。トップページには、光学模型計算に必要な情報を記入する入力データフォームが表示されている。
- ③ 入力データフォームに数値・チェックを入力する。(◇2. 2)
- ④ **Submit** ボタンを押し、**OLCoPS** に入力データを送信する。
- ⑤ **OLCoPS** が入力データに従って計算をする。(◇2. 3)
- ⑥ 入力データと結果の図がユーザに返される。(◇2. 4)
- ⑦ **RESET** を押すとすべてクリアされる。

基本動作に続いて、「実験データを重ねて表示する」「理論再計算を重ねて表示する」ことができる。

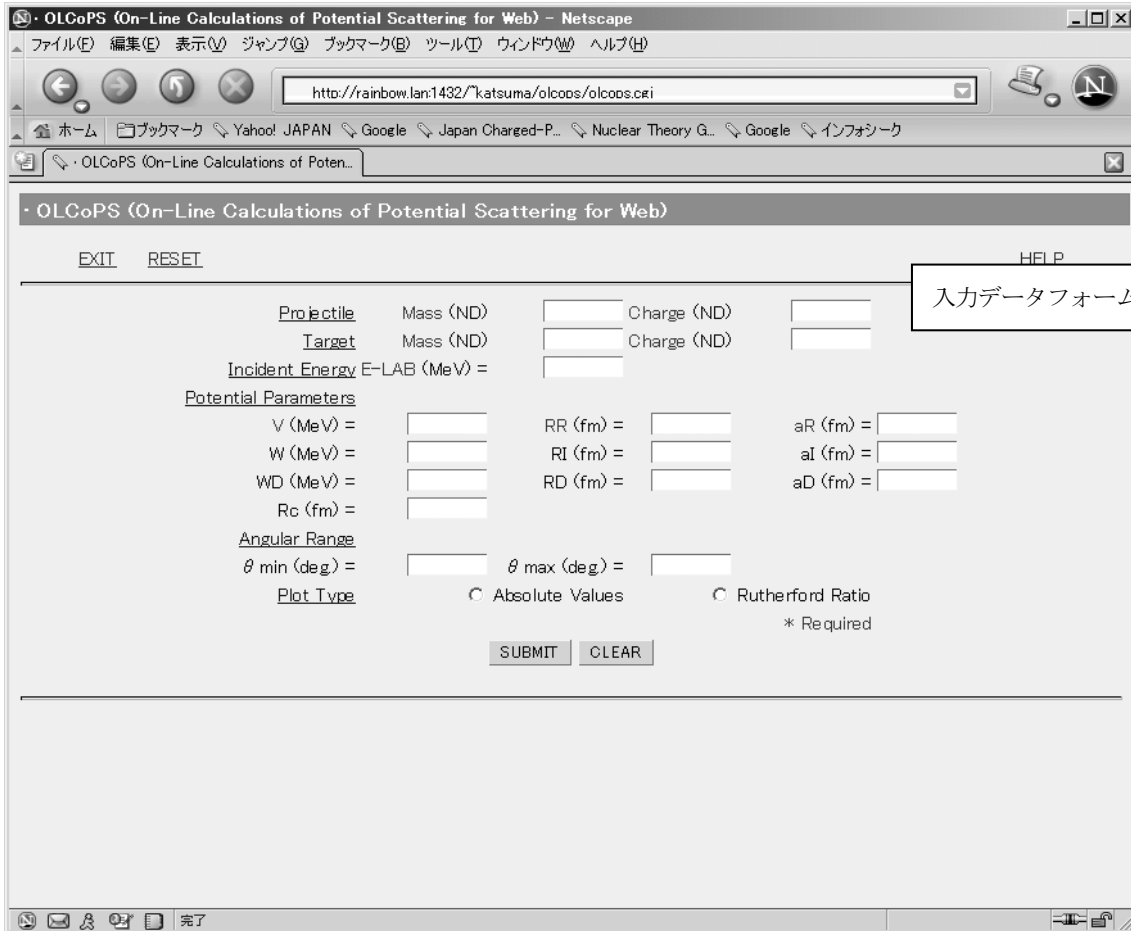


図 2 : OLCoPS のトップページ

<http://www.jcprg.org/olcops/olcops.cgi>

実験データを重ねて表示する場合

- ⑦ 実験データを実験データ入力フォームに入力する。
- ⑧ 実験データ入力フォーム下にある **Append** ボタンを押し、データを送信する。
- ⑨ 実験データの追加された図がユーザに返される。

理論再計算を重ねて表示する場合

- ⑦ 入力データフォームの値を変更する。
- ⑧ **Append** ボタンを押し、**OLCoPS** に入力データを送信する。
- ⑨ 理論再計算の追加された図がユーザに返される。

図 1 に見られるように、ユーザと **OLCoPS** の間は、**Web** サーバ(+CGI)によって橋渡しされる。従来、このような数値計算は、ワークステーションの端末マシンから **CUI** でプログラムを実行し、結果の数値を手元のパソコンに転送してグラフ表示していた。**OLCoPS** は、**Web** サーバ(+CGI)を利用することにより、このようなファイル転送、グラフ作図やワークステーションへのログイン操作などの手間を削減し、手軽に数値計算ができる利点をもっている。

2.2 入力データ

2. 1 で示した OLCoPS 基本動作③における入力データについて記述する。

フォームには、以下の項目を数値で入力する。

- 入射粒子(Projectile) の質量数(mass)と電荷(Charge)
- 標的核(Target)の質量数(mass)と電荷(Charge)
- 実験室系での入射エネルギー(Incident Energy)
- ポテンシャルパラメータ(Potential Parameters)
- 出力角度領域(Angular Range)

表示形式については、ラジオボタンで選択する。

- 表示形式(Plot type): 絶対値表示(Absolute Values)
ラザフォード比表示(Rutherford Ratio)

光学ポテンシャルのパラメータは以下の式で定義される。

$$V(R) = \frac{V}{1 + \exp\left[\frac{R - R_R}{a_R}\right]}$$
$$W(R) = \frac{W}{1 + \exp\left[\frac{R - R_I}{a_I}\right]} - 4a_D \frac{d}{dR} \frac{W_D}{1 + \exp\left[\frac{R - R_D}{a_D}\right]}$$

クーロンポテンシャルは半径 R_C の一様帯電球で定義され、以下の式で与えられる。

$$V_C(R) = \begin{cases} \frac{Z_t Z_p e^2}{2 R_C} \left(3 - \frac{R^2}{R_C^2} \right) & R < R_C \\ \frac{Z_t Z_p e^2}{R} & R > R_C \end{cases}$$

入射粒子の質量数と電荷、標的核の質量数と電荷、入射エネルギー、ポテンシャルパラメータ V , R_R , a_R は必ず入力しなければならない。その他の入力項目は、入力されない場合、プログラムの初期値が利用される。

2.3 OLCoPS FORTRAN プログラム

2. 1 で示した OLCoPS 基本動作⑤において、OLCoPS が入力データに従って計算をする。サーバ内部の計算は、FORTRAN プログラムによって作成されたバイナリ実行ファイルで実行される。

2.4 出力

2.1で示した **OLCoPS** 基本動作⑥における出力は、弾性散乱の微分断面積の図である。微分断面積は、指定された角度領域で計算される。角度が指定されなかった場合、 0° から 180° までの出力となる。結果の図は計算結果表示領域に表示される。

3. 実行例

実行例として、入射核 ^{12}C と標的核 ^{16}O の弾性散乱断面積を求める。入射エネルギーは、**76.8 MeV** とする。**DARPE [4]** によると、この核反応の実験データは、**D43/DATA51** として登録されている。

入射核 ^{12}C 、標的核 ^{16}O 、入射エネルギー **76.8 MeV** の計算を行う場合、**OLCoPS** の入力画面は図3のようになる。ポテンシャルパラメータについては、**NRDF** ファイルに記述されているパラメータ値を入力した。ただし、**NRDF** ファイルと **OLCoPS** との間で、光学ポテンシャルの定義に違いがあるため、ポテンシャルパラメータの入力には注意が必要である。図3の画面で **Submit** ボタンを押すと断面積が計算され、計算結果表示領域に結果の図が表示される。計算結果の図の下には、結果の数値データファイルへのリンクが作成される。

The screenshot shows the OLCoPS (On-Line Calculations of Potential Scattering for Web) interface. It features a header with 'EXIT', 'RESET', and 'HELP' buttons. The main area contains input fields for projectile and target mass and charge, incident energy, and various potential parameters (V, W, WD, Rc, RR, RI, RD, aR, aI, aD). It also includes angular range settings and plot type options (Absolute Values or Rutherford Ratio). 'SUBMIT' and 'CLEAR' buttons are at the bottom.

Parameter	Value
Projectile Mass (ND)	12
Projectile Charge (ND)	6
Target Mass (ND)	16
Target Charge (ND)	8
Incident Energy E-LAB (MeV)	76.8
Potential Parameters	
V (MeV)	120
W (MeV)	53
WD (MeV)	
Rc (fm)	6.25
RR (fm)	4.42
RI (fm)	6.20
RD (fm)	
aR (fm)	0.77
aI (fm)	0.272
aD (fm)	
Angular Range	
θ min (deg)	10
θ max (deg)	40
Plot Type	<input type="radio"/> Absolute Values <input type="radio"/> Rutherford Ratio

図3 : D43/DATA51 入射核 ^{12}C と標的核 ^{16}O の弾性散乱断面積を求める場合の入力画面

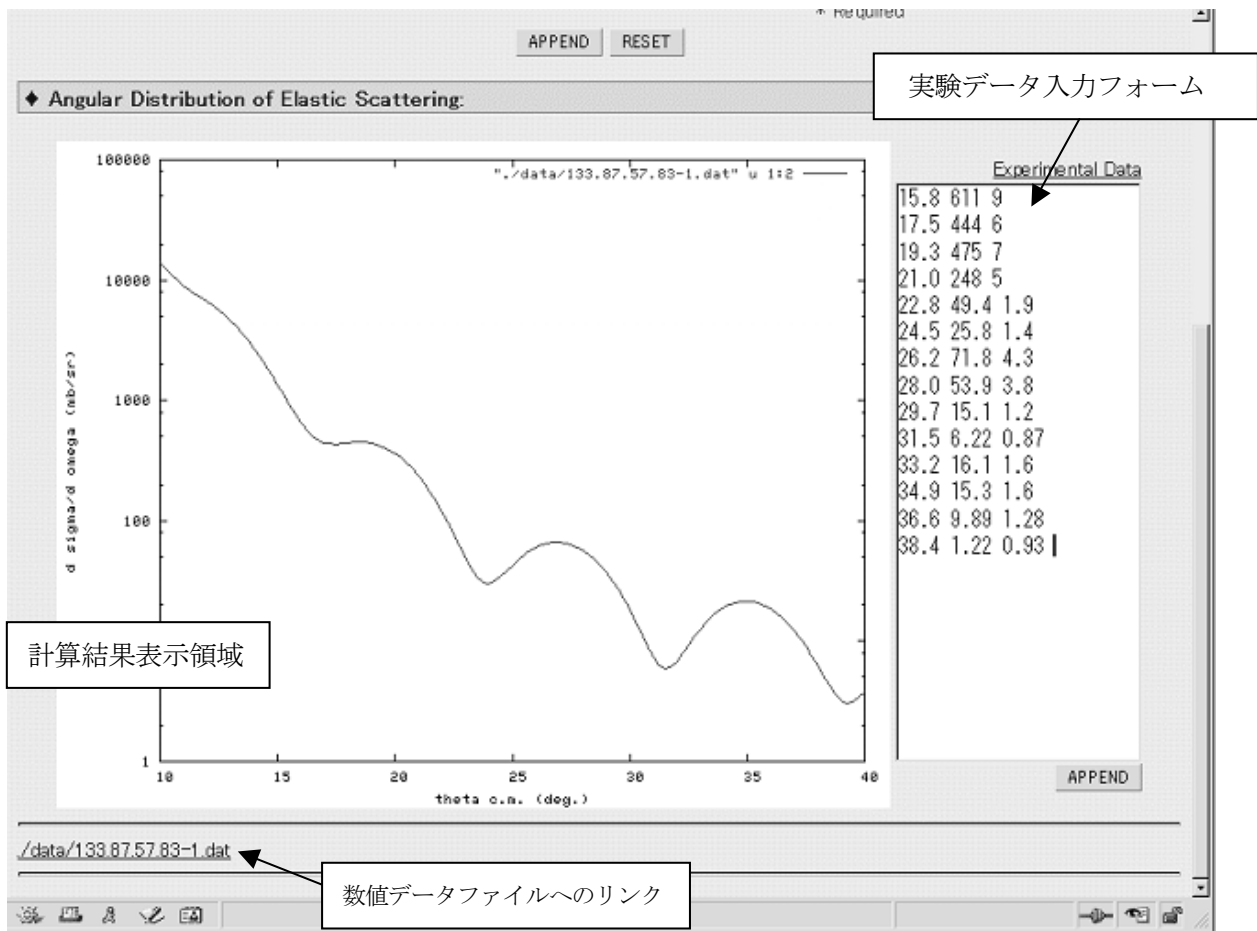


図4：図3の入力による計算結果に実験データを重ねる場合の実験値入力画面

実験データを重ねて表示する場合、図4に示すように実験データ入力フォームに実験データを入力する。実験データは、1カラム目に質量中心系での角度、2カラム目に弾性散乱の微分断面積を入力する。図4で入力した実験データは、**D43/DATA51**の実験データである。実験データ入力フォーム下にある**Append**ボタンを押しデータを送信すると、計算結果の図に実験データが追加される。誤差棒は現時点で表示できない。

上の $^{12}\text{C}-^{16}\text{O}$ 弾性散乱の計算に続いて、入射粒子を炭素同位体 ^{13}C に変更した場合を考える。入力データフォームには、数値計算で利用された入力データが表示されている。これらのパラメータのうち、入射粒子の質量数を12から13にのみ変更する。入力データフォーム下にある**Append**ボタンを押し、変更入力データを送信すると、理論再計算の結果が図に追加される(図5)。 ^{13}C 入射の場合が緑線で表示される。この場合、2つの計算結果はほとんど同じであることがわかる。

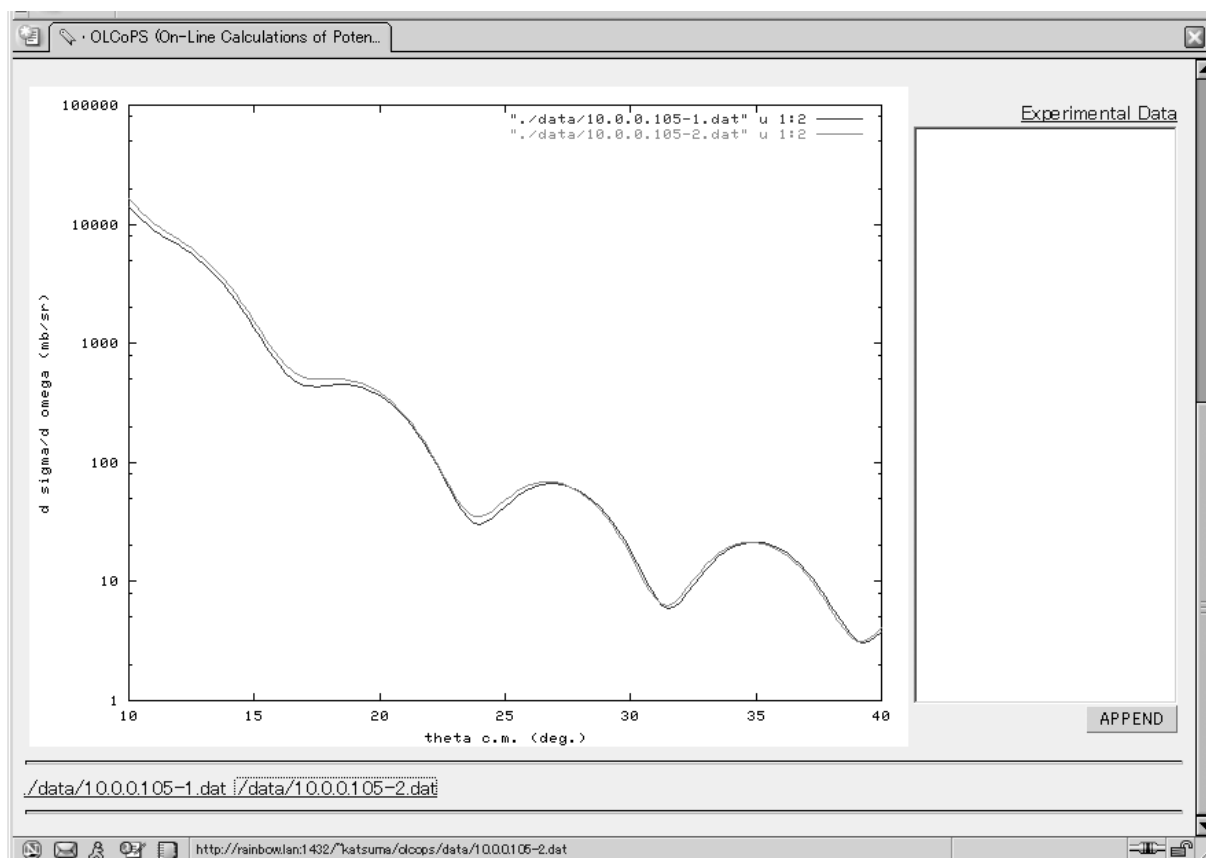


図5：入射粒子が ^{12}C 原子核と ^{13}C 原子核の場合の比較画面

4.まとめと議論

今回、NRDF データ評価活動として、低エネルギー原子核弾性散乱の光学模型計算を Web ブラウザ上で処理する Web オンライン計算ツール OLCoPS の開発を行った。このレポートでは、OLCoPS の操作方法と実行例を記述した。Web オンライン計算は、Web サーバ(+CGI)を利用することにより、手軽に数値計算ができる利点をもっていることも記述した。

図1に示したように、OLCoPS の場合、内部で光学模型計算の FORTRAN プログラムが実行されている。しかし、この内部プログラムは、特に、光学模型計算プログラムでなければならないという訳ではない。内部の計算プログラムを別の数値計算プログラムに置き換え、入力フォームを作る HTML を変更すれば、どのような数値計算プログラムであっても Web オンライン計算ツールとなりえる。

原子核物理分野では、これまで優秀な数値計算プログラムが開発されてきた。(たとえば、旧原子

核研究所の数値計算ライブラリ[6]など。)これらの過去の数値計算プログラムを、**Web** オンライン計算ツールとして利用できれば、原子核物理分野の発展につながると考える。

また、**NRDF** データベースの有効利用をする上でも、**JAMming on the Web** や **OLCoPS** のような **Web** オンライン計算ツールの手助けは欠かせない。実際、独立に測定された実験データはバラツキが存在したり、利用したい入射エネルギー、入射粒子、標的核での実験データが存在しなかったりするため、データベースを利用する上で、何らかの評価値、あるいは、**Web** オンライン計算ツールの利用が必要となってくる。したがって、**NRDF** 評価活動の一つとして、**Web** オンライン計算ツールの開発を今後も続けていかなければならないと考える。

謝辞

北海道大学知識メディアラボラトリ **COE** メンバーの合川正幸氏、須田拓馬氏、内藤謙一氏、吉尾圭司氏には、共同開発・技術提供など日々の議論でお世話になり感謝します。吉田ひとみ氏には、日々の活動で多大なる支援を頂きその厚遇に大変感謝いたします。加藤幾芳教授、大西明助教授には、開発企画や評価活動の意義・目的など多くをご教授いただき大変感謝いたします。また、末筆ながら2003年8月より **JCPRG** グループメンバーとして活動する間、支えていただいたすべての方にお礼申し上げます。

参考文献

- [1] 加藤幾芳, 荷電粒子核反応データファイル年次報告 No. 15, p.1 (2001).
- [2] 大西明, 大塚直彦, 荷電粒子核反応データファイル年次報告 No. 15, p.7 (2001).
<http://www.jcprg.org/jow/>
- [3] 大塚直彦, 荷電粒子核反応データファイル年次報告 No. 15, p.12 (2001).
<http://www.jcprg.org/editor/>
- [4] S. Korennov, K. Naito, 荷電粒子核反応データファイル年次報告 No. 16, p.39 (2002).
<http://www.jcprg.org/darpe/>
- [5] 高木修二, 丸森寿夫, 河合光路, 現代物理学の基礎 10 原子核論, 岩波書店, p.335 (1973).
- [6] 今西文龍、private communication.