

1.4 中性子用オブジェクト指向データ解析システム

鈴木 次郎、真鍋 篤

1.4.1 データ解析フレームワーク (Manyo-Lib) の研究開発

大強度陽子加速器施設(J-PARC)は、高エネルギー加速器研究機構(KEK)と日本原子力研究開発機構(JAEA)が共同で建設/運用を行う実験施設である。J-PARC の物質生命科学研究施設(Materials and Life Science Facility: MLF)は世界最高強度のパルス中性子/中間子ビームを用いて物質科学と生命科学実験を行う実験研究施設である。2008年5月に中性子と中間子ビームの供給が開始され共同利用が開始した。MLFには、23の中性子実験用のビームラインが整備され様々な研究分野に対応する分光器が設置され運用中である。2011年3月の震災で被害を受けたが、復旧活動が行われ2011年末にビーム供給が再開される予定である。

従来の放射光や中性子などの物質科学の共同利用に用いられている大規模な散乱装置は、研究分野と研究目的、実験手法に対応した装置制御と解析ソフトウェアが装置ごとに開発されて利用されてきたため、施設内でのデータの共有、互換性に問題があるだけでなく、ソフトウェアの長期に渡った維持管理を研究施設として組織的にサポートできない問題がある。MLFは、米国 Spallation Neutron Source (Oak Ridge National Laboratory)、英国 Rutherford Appleton Laboratory、仏国 Institut Laue-Langevin と並ぶ大強度中性子実験施設として、アジアオセアニア地区の重要な研究拠点となることが求められている。そのためには、国際協調体制が求められ、実験データのみならず計算機環境の世界標準化が不可欠であり、本研究は中性子実験のデータ解析ソフトウェアの世界標準となることを目指したものである。

MLFにおける実験装置の計算機とネットワーク環境は MLF 計算環境検討グループによって研究開発され整備されてきた。計算科学センターは、この検討グループ発足当初より参加/協力をしている。オブジェクト指向データ解析システム(Manyo-Lib)は MLF 計算環境のデータ解析システムの中核となるフレームワークである。また、次に紹介する高分子用シミュレータは、高分子分野の中性子実験の結果をシミュレートし、解釈を与えるものである。Manyo-Lib は、多人数での開発と利用が想定され、また長期間にわたって研究施設としてサポートを行えるオブジェクト指向の概念に基づいて設計と開発が行われている。Manyo-Lib は、中性子実験で共通に使用する機能(データコンテナ、ネットワーク分散処理環境、並列化機能、データ解析演算子)を提供することで、個々の分光器の仕様、研究者の目的に合致したデータ解析ソフトウェアの構築の基盤となる。このような基盤ソフトの整備は、物質科学分野では初めての試みである。ソフトウェアの骨格部分を統一的に、かつ、十分なテストを行った上で提供することで研究施設全体のソフトウェア環境の信頼性向上

に貢献でき、世界最高強度の貴重な中性子ビームの有効利用という面で重要である。このフレームワークで採用しているデータフォーマットは NeXus (A common data format for neutron, x-ray and muon science, <http://www.nexusformat.org/>)を採用している。NeXus は物質科学の散乱実験のデータフォーマットとして策定が行われている。鈴木は NeXus International Advisory Committee の委員として会議に出席し、MLF のみならずアジア唯一の委員として要望を提案するとともに、国際規格の策定に貢献をしている。

2010 年度は、Boost C++ (<http://www.boost.org/>)の `Serialization` の機能を使い、大容量の実験データとヒストグラムデータの高速な入出力機能の実装を行った。また、`asio` (Portable networking, including sockets, timers, hostname resolution and socket iostreams)の機能を使うことで、`Manyo-Lib` のネットワーク分散機能の大幅な改修を行い、処理速度の大幅な向上が達成された。

2011 年度は、分散処理環境の未改修の作業と平行して、`ver.1` のリリースにむけた作業(不要なコードの除去, コメントの挿入, リファレンスマニュアルの作成など)を行った後、リリースを行う予定である。

1.4.2 高分子用シミュレータの研究開発と高分子基礎物性

このモンテカルロシミュレータは、高分子材料の中性子散乱の実験データの解析を目的とするもので、MLF の解析環境に接続できるシミュレータの一つとなる。高分子の分子を構成するモノマー、鎖、分子のそれぞれをソフトウェアの中では階層的にオブジェクト指向を用いて記述しているため、高分子がいかなる分岐構造やトポロジーを持っていてもシミュレーションできる。

このシミュレータを利用して、バルク中や溶液中の環状高分子の中性子散乱/光散乱の実験データの解釈を試みた。その結果、バルクでは直鎖状高分子より拡がり方が抑制されておりフローリの臨界指数は $1/3$ で、実験データをよく説明することがわかった[3]。この指数は `knotted`-や `catenated-ring` でも同じ値を持つことがわかった[4,5]。溶液中の環状高分子の振る舞いについては、解析中で、2011 年度に論文発表の予定である。

学会発表

1. “Object-Oriented Data Analysis Framework for Neutron Scattering, Manyo-Lib”
New Opportunities for Better User Group Software (NOBUGS 2010)
Park Vista Hotel in Gatlinburg 米国 テネシー州 2010 年 10 月 10-13 日
2. “中性子用実験データ解析フレームワーク Manyo-Lib”
日本中性子科学会 第 10 回 年会
東北大学 片平キャンパス 仙台市 2010 年 12 月 9-11 日
3. “Dimension of Ring Polymers in Bulk Studied by Monte-Carlo Simulation”
Statistical Physics and Topology of Polymers with Ramifications to Structure

and Function of DNA and Proteins

Panasonic Auditorium, Yukawa Hall, YITP, Kyoto University

2010年 8月 2-6日

4. バルクにおける種々のリングポリマーの拡がりへのトポロジー効果 --- シミュレーション解析
第59回 高分子学会年次大会
パシフィコ横浜 横浜市 2010年 5月 26-28日
5. シミュレーション解析による種々のリングポリマーのトポロジーと拡がりの相関
第59回 高分子討論会
北海道大学高等教育機能開発総合センター 札幌市 2010年 9月 15-17日

そのほか

1. NeXus International Advisory Committee
2. 波紋 (中性子科学会 学会誌) 地区編集委員
3. 種々の環状高分子のトポロジー効果と分子鎖の拡がりの相関
科研費 若手 B 22740281 (2010年)