

## 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/運用を行う加速器施設である。J-PARCの物質生命科学施設(Materials and Life Science Facility: MLF)は、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り、世界最高強度の1MWでの運転を目指している。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(結晶、磁性体、ソフトマターなど)に対応する分光器が設置され運用中である。従来の物質科学の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、互換性に問題があり、また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ていない。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、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ている。

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、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。

2011年度は、各分光器のユースケースに適用させた場合に生じる不具合の調整や未整備の機能の新規開発を行った。また、より効率的な分散処理を可能にする修正を行った。平行して、Manyo-Lib 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, 各種マニュアルの作成, Web ページの作成, など)を行い, 2012年度半ばのリリースを目指して作業中である。2011年度から, Manyo-Lib コアミーティングを隔週で行い, ユーザグループからの意見の吸い上げや将来計画の策定を進め, 効果を上げている。

#### 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たとし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[1]。希薄溶液中の環状高分子の振る舞いについてシミュレーションを行い、末端がないトポロジー効果によって、環状高分子の $\theta$ 温度が直鎖状よりも低いことがわかり、中性子散乱実験の結果を説明できる[2,3]。現在は、様々な環状高分子の拡がりの普遍性について、特に $\theta$ 溶媒の条件下で検討を行っている。

#### 原著論文

- [1] "Dimension of Ring Polymers in Bulk Studied by Monte-Carlo Simulation"  
Jiro Suzuki, Atsushi Takano and Yushu Matsushita  
Prog. Theor. Phys. Suppl. vol=191, page=130 (2011). (査読付き)
- [2] "The Theta-Temperature Depression Caused by Topological Effect in Ring Polymers Studied by Monte-Carlo Simulation"  
Jiro Suzuki, Atsushi Takano, and Yushu Matsushita  
J. Chem. Phys., vol=135, page=204903 (2011). (査読付き)  
URL: <http://link.aip.org/link/?JCP/135/204903> DOI: 10.1063/1.3663383

#### 学会発表

- [3] "Theta-temperature depression caused by topological effect in ring polymers."  
American Mathematics Society, 2012 Spring Western Section Meeting  
University of Hawaii at Manoa, Honolulu, HI, March 3-4, 2012 (招待講演)

- “Object-Oriented Data Analysis Framework for Neutron Scattering, "Manyo-Lib"”  
1<sup>st</sup> Asia-Oceania Conference on Neutron Scattering, Epocal Tsukuba, Ibaraki,  
Tsukuba 2012年 11月 20-24日
- “中性子用実験データ解析フレームワーク Manyo-Lib”  
第3回 MLF シンポジウム, 茨城量子ビーム研究センター 茨城県 東海村  
2012年 1月 19-20日
- "カテナン型リングポリマーのトポロジーと分子の拡がりの相関"  
第60回 高分子学会年次大会  
大阪国際会議場 大阪市 2011年 5月 25-27日
- “希薄状態における環状高分子のトポロジーと拡がりの相関”  
第60回 高分子討論会  
岡山大学 津島キャンパス 岡山市 2011年 9月 28-30日

### そのほか

1. NeXus International Advisory Committee ( <http://www.nexusformat.org/> )
2. 波紋 (中性子科学会 学会誌) 地区編集委員 (～2011年度)
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・)