

## J-PARCと計算科学の連携 Collaboration between J-PARC and Computing Science

(独)日本原子力研究開発機構  
J-PARCセンター 物質・生命科学ディビジョン 中性子利用セクション  
中谷 健、稲村 泰弘

大強度陽子加速器施設の物質・生命科学実験施設では世界最先端の実験装置が続々と建設され、その計算環境を利用して新しい実験手法が開発、実用化されつつある。供用促進法の下、大型供用施設として今後の展開が期待されているが、期待に応えるにはまだまだ開発すべき項目が多数ある。開発項目のいくつかは実験分野の人間だけでは解決が難しく、計算科学分野の協力が必要である。本稿では、大強度陽子加速器施設の物質・生命科学実験施設の計算環境の現状と計算科学分野とのコラボレーションにより生み出される研究成果について述べる。

### 1. はじめに

日本原子力研究開発機構 (JAEA) と高エネルギー加速器研究機構 (KEK) は共同で大強度陽子加速器施設 (Japan Proton Accelerator Research Complex, J-PARC) を建設、運営している。J-PARCは3基の陽子加速器 (線形加速器、3GeVシンクロトロン、50GeVシンクロトロン) と、これらの加速器で加速された陽子、あるいはその2次粒子を利用する4つの実験施設 (物質・生命科学実験施設、原子核素粒子実験施設、ニュートリノ実験施設、核変換実験施設) から成る実験施設の複合体である。J-PARCは日本原子力研究開発機構東海研究開発センター原子力科学研究所敷地内に2001年から建設が開始され、2009年に完成した。

これらの実験施設の内、物質・生命科学実験施設 (Materials and Life science experimental Facility, MLF) では、中性子・ミュオンをプローブとした、基礎物理、物質・材料科学、生命科学及びそれらを応用した産業・医療に至る広い領域の研究が行われる

[1]。MLFには、3GeVシンクロトロンから供給される陽子ビームライン上にミュオンを発生させるグラファイトターゲットと、その先に中性子を核破砕で発生される液体水銀ターゲットが設置されている。このMLFの中性子・ミュオン線源は、出力1MWという世界最高クラスの線源であり、米国のSNS、英国のISIS-TS2と肩を並べる実験施設である。

MLFは2004年1月に建設を開始し、2007年4月に建屋が竣工、各装置の設置の後、2008年5月に中性子ビーム、9月にミュオンビームの発生に成功し、その年の12月からユーザーへの供用を開始した。陽子ビーム強度も供用開始時は4kWであったが、すぐに20kWに増強され、2009年11月には120kWに到達し、ユーザーに安定に供給されている。また、試験運転では短時間ではあるが300kW相当の連続運転にも成功している。

MLFには、ミュオン6、中性子23のビーム取り出し口が用意されており、これらのポート数、あるいはそれ以上の実験装置が設置される。それら実験装置は、MLFの取り扱う

幅広い利用に対応して、様々なタイプのものがある。2010年5月現在14台（中性子12台、ミュオン2台）の実験装置が稼働中で、さらに5台の実験装置が建設中である。これらの実験装置はMLFの世界最高クラスの線源の性能を引き出すために、測定システム自体もこれまでに無い性能を持つ世界最高クラスのものである。実験装置のほぼすべての検出器は位置敏感型であり、その画素数も飛躍的に向上している。また、極低温冷凍機や超強磁場電磁石、電気炉等々の多種多様な試料環境機器も積極的に運用されていて、これらの機器を組み合わせた測定が実施されている。

MLFは年間200日の運転日数が予定されており、年間ユーザー数は約1万人日と予想されている。実験課題数も年間2,000件程度と予想され、施設はこれらを円滑に処理することが求められる。多数のユーザーが来訪し、多数の実験課題が実施されるMLFでは、これまで一部の専門家の利用に留まりがちだったこの種の施設の実験装置が、広い範囲の一般のユーザーに開放されることになる。すなわち、必ずしも実験装置や実験そのものを熟知しないユーザーが多数利用することが予想される。さらに、測定データは実験終了の後3年を目途に一般に公開される予定であり、実験を行わずデータ解析のみの利用も想定されている。

MLFは世界最高性能の中性子・ミュオンを利用し、様々な測定条件で実験を遂行する施設である。またユーザーは広い分野に跨り、多くは中性子・ミュオンの実験の専門家ではないことが予想される。MLFのこのような状況の下では、実験装置の計算環境に求められる機能も過去の同種の施設では経験することの無かった様々な課題に対応することが求められる。多種多様な試料周辺環境機器と数十万ピクセルに達する高画素検出器を装備したMLFの実験装置が生み出すデータは、大強度線源と相まって、テラバイトでは収まり

きらず、ペタバイトオーダーになることが予想される。MLFではフレキシブルなデータ解析を可能にするために、標準の測定データの記録方式としてイベントレコーディング方式を採用している。イベントレコーディング方式はSNSやISIS等の実験施設でも標準のデータ記録方式であり、MLFは世界に先駆けて実用化に成功しただけでなく、イベントレコーディングならではの測定、データ解析手法を開発し、実用段階にある。イベントレコーディングは検出した中性子・ミュオン一つ一つを位置と時間を要素とするイベントデータとして記録するので、線源の強度増大および検出器高画素化がダイレクトにデータ増加に繋がる。このような大容量のデータを外部からくるユーザーが持ち帰るのは現実的では無く、また持ち帰ることができたとしてもデータ解析を行う環境をそれぞれのユーザーが構築するには多大なコストが必要になる。これに対応するためには、ユーザーの所属機関からインターネット等を利用したりリモートアクセスによるデータ解析環境の提供が必要である。一方では、産業利用等の成果を公開しないユーザーに関してはセキュリティを担保したデータ管理が必要になる。我々はこれらの要件を満たす計算環境を徐々にではあるが構築しつつある。特に、データ集積システムの構築においては素粒子・原子核分野の研究員の協力を仰いで、大強度ビームに対応するシステムの開発に成功した。データ解析においても共通ライブラリを整備して開発コストの省力化を図ることに成功したが、今後予想される大容量のデータを効率的に且つセキュリティを保ちつつ処理可能なシステムを構築するところまでは至っていない。この壁を乗り越えるには計算科学分野で培われた知見が是非とも必要である。

実験の最終目的は対象となる現象の機構の解明である。それには測定したデータの解析だけでは不十分であり、現象をモデル化して

シミュレーション計算した結果との比較を行うデータ解釈が必要である。簡単なシミュレーション計算であれば実験家でも可能であるが、MLFで実施されるような複雑な系の測定結果を実験家だけでデータ解釈するのはかなりの困難が予想される。一方、計算科学は現象を計算機の中で再現する科学である。実験と計算を相補的に行うことは、単なる実験データの解釈のみに留まらず、新奇な現象の予見にも繋がると予想される。また、予めシミュレーションにより現象を効率的に測定できる測定条件を求めることができれば、測定時間の短縮にも繋がり、ひいては施設全体のスループットを向上することができる。さらには、公開データ利用から新たな角度からのデータ解釈が行われ、新しい実験のアイデアがイノベートされることも期待される。

以上のように、J-PARC/MLFにおける実験の知見と計算科学の知見が合わされば、施設の効率的な運用が可能になるだけでなく、新しい科学分野の開拓も可能である。我々は、計算科学との連携を強く期待するものである。

## 2. MLF計算環境の現状

これまでに述べたように、MLFにおける実験装置は、数万から数十万画素程度の総画素数を有する検出器群と多種多様な機器の制御とモニタリングを行いながら実験を遂行する。MLFでは、短時間（1分弱）での測定が可能になるとともに、測定条件を判断する時間も短時間化するため、データ解析を行った上で最適な測定条件を決定し、シミュレーション等による評価を実験計画に随時反映させるシステムが必要である。また、一測定条件により測定されるデータは、数ギガバイト程度になると見込まれ、データサイズに応じた高速処理が可能でなければならない。さらに、延べ数万人とも予想される膨大なユーザーの大半は実験の専門家ではないため、ユーザーが使いやすいシステムでなければならない

い。J-PARCの目的が第一級の成果を短時間で創出することと考えれば、データ集積のみならず、データ解析・解釈（シミュレーション）までを念頭に置き、計算機をフルに活用した基盤的環境を構築する必要があることは明らかである。計算環境の確固たる基盤の上に、装置毎の環境を構築すれば、計算資源の共有による組織的かつ継続的な開発、インターフェースの共通化などを達成可能である。一方で、計算機関連技術の栄枯盛衰は予測しがたいものがあり、一枚岩的な（monolithic）システムにしてしまうと変化に対応できなくなるという大きなリスクが伴う。また、巨大システムの維持管理に必要な人的資源の確保が施設として行えるかどうか不明である。これらに対応するため、我々は開発にあたって極力インターネット等で標準的に使用されているIT技術を利用することを念頭に置いている。

以上のような条件下でMLFに相応しい計算環境を整備するために、MLF計算環境検討グループが2003年より発足し、以下を目的として図1のようなMLF計算環境の検討および開発を行ってきた。

- ・大規模データを高速で扱う環境の提供
  - ▷ データ収集ソフトウェア（DAQミドルウェア）
  - ▷ データ解析ライブラリ（Manyo-Lib）
- ・ソフトウェアフレームワークによるデータ集積、機器制御、解析、可視化の統合
  - ▷ ワーキングデスクトップからすべての機能を有機的に利用可能
- ・ソフトウェアの再利用の促進
  - ▷ データベースによる知識の共有
  - ▷ 共通化による開発、維持管理の省コスト化

### 2.1 データ収集ソフトウェア

データ収集ソフトウェアは検出器が計数した中性子やミュオンの検出信号データを検出

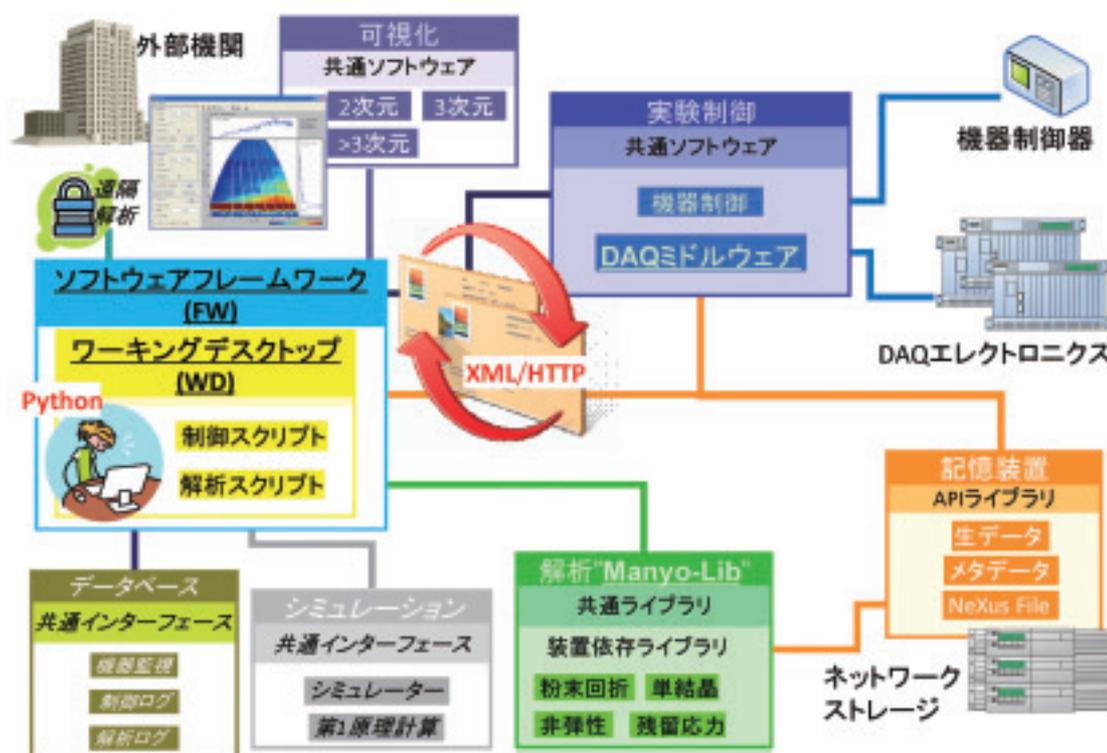


図1 MLF計算環境

器エレクトロニクスから読み出してディスクに保存するソフトウェアである。MLFではDAQミドルウェアを標準データ収集ソフトウェアとして採用している。DAQミドルウェアはネットワーク分散処理に対応したデータ収集ソフトウェアで、産業技術総合研究所において開発がすすめられているロボット用分散処理型ミドルウェア (RT-Middleware) [2] をベースに高エネルギー加速器研究機構測定開発室次世代DAQプロジェクトの中で開発されたソフトウェアである [3]。DAQミドルウェアにはDAQコンポーネントとDAQオペレータが実装されている。DAQコンポーネントは、RT-MiddlewareのRTコンポーネントを拡張して作られており、コンポーネント間のデータ転送、コンポーネントがコマンドを受信、またはコンポーネントからステータスを送信するための機能はRT-Middlewareにより実現している。DAQミドルウェア独自のものとしては、各DAQコンポーネントを制御するためのDAQオペレー

タ・コンポーネント、それが持つコンフィグレーション・ファイルによるデータ集積システム (DAQシステム) のコンフィグレーション機能およびWebインターフェースがある。DAQミドルウェアは次のような特徴を持っている。

- ・ RTコンポーネントを拡張したDAQコンポーネントを組み合わせてDAQシステムを構築
- ・ コンフィグレーション・ファイルと呼ばれるXMLファイルによりDAQシステムを記述し、構成することが可能
- ・ コンディション・ファイルと呼ばれる機器およびコンポーネント設定用XMLファイルにより、検出器やエレクトロニクス、DAQコンポーネント独自のパラメータを設定可能
- ・ リモートブート機能により、DAQコンポーネントがネットワーク分散環境下でブート可能
- ・ DAQオペレータは、Webインターフェイ

ス(XML/HTTPプロトコル)を持っており  
Webブラウザからの測定制御が可能

- ・ Webブラウザにより、測定データのオンラインモニタリングが可能

DAQミドルウェアは2008年のファーストビーム時点からMLFの実験装置のコミッショニングで使用され、数種類の検出器に対応して、MLFの多くの実験装置でユーザー利用に供されている。設計時からMLFの線源がフルパワー時のデータレートを想定していたので、供用運転開始当時と比較して30倍に達している現在の陽子ビーム強度でも十分に対応できている。また、イベントレコーディング方式によるデータ収集により、従来では不可能だった測定が可能になっている。

## 2.2 データ解析ライブラリ

中性子用オブジェクト指向データ解析ライブラリは図2のようにMLFのデータ解析環境

の中核となるソフトウェアで、Manyo-Lib (万葉集) と名付けられている。Manyo-Libは中性子実験で共通に使用される機能と各装置の仕様にあわせたソフトウェアの開発基盤を提供する。

ある一定の枠組みに基づいて多数の開発者(研究者)が並列作業で機能追加をしたり、統一的な開発方針を策定したりする方法の一つとしてオブジェクト指向がある。オブジェクト指向の利点の一例をあげると、データファイルを開く場合、予めライブラリ側でReadData (string FileName) の関数を用意し標準的な読み方を実装しておく。一方で実験装置によっては機能が不足する場合、この関数を上書きすることで、解析環境としては統一的なユーザーインターフェースとして、解析環境のユーザーからは同じ関数名で利用できる。このように、オブジェクト指向では、Manyo-Lib標準のデフォルトの動作に加

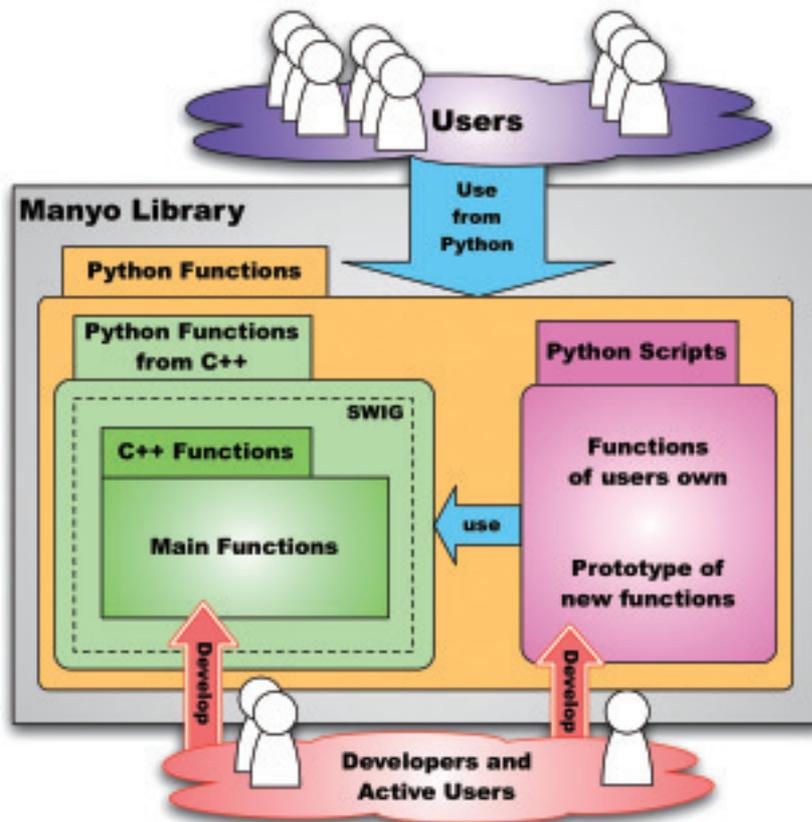


図2 Manyo-Lib

えて、実験装置や研究者依存の機能を組み込むことが容易である。このような、オブジェクト指向に基づいた基盤ソフトウェアを整備することで、解析ソフトウェアの開発が小さな人的資源で迅速に行え、維持管理が容易になり、MLF全体のソフトウェア環境の信頼性向上が望める。世界最高強度の中性子ビームを有効に使用するためには、このような研究施設レベルで整備された（技術的だけでなく、人的環境としても）堅固な基盤をもつ計算環境が必須である。

Manyo-Libにおいて、実験データの読み込み、ヒストグラム化、データ解析の各種演算子、分散処理環境などの機能は、オブジェクト指向に基づきC++言語で開発されておりC++環境だけで独立して動作する。そして、個々の実験装置で別途必要な解析機能は、C++のモジュールとして追加することができる。更に、C++の対話的利用（キャラクターベース、グラフィカル）は、オブジェクト指向のスクリプト言語であるPythonを用いて開発が進められている。C++のデータ解析環境を柔軟なスクリプト言語から利用するため、C++の高い機能と速度性能を、ユーザーに親和的な環境で利用が可能になる。この解析環境は、C++だけのバッチモードと、Pythonを使ったインタラクティブモードを有効に使い分けできる特徴を有している。

Manyo-Libはオブジェクト指向の概念に基づいた様々な次元のヒストグラムを入れる容器、データコンテナを中心として構成されている。多次元ヒストグラムのエラー伝搬機能付きの四則演算、イベントデータのヒストグラム化、データコンテナのファイルの読み書きなどがその主な機能である。様々な解析演算子は、このデータコンテナを入出力として扱うことで、Manyo-Libのソフトウェア上でのデータフォーマットを規定できるだけでなく、演算子を連結することで解析ソフトウェアを作成することができる設計である。

データ解析においては、測定データだけでなく実験メタデータ（試料名や実験者名、測定時の機器の状態等々）も合わせて必要である。この実験メタデータ保存のための標準ファイルフォーマットとして、NeXus (Data Format for Neutron, X-ray and Muon Science) を採用している [4]。実験データを世界中の研究者が共有できる環境を提供できるだけでなく、HDF (Hierarchical Data Format) を基盤とした様々な周辺ソフトウェアが利用可能である [5]。NeXusを利用するだけでなく、年1-2回開催されるNeXus International Advisory Committeeに委員として出席することで、国際規格としてのファイルフォーマットの策定にも関わっている。

MLFの中性子ビームは、昨年度の120kWに到達し、一台の実験装置の生成する実験データは、一日で数~数十ギガバイトオーダーに達することもある。これは、単独の計算機でのデータ処理能力を明らかに超えている。そのために、Manyo-Libには、複数台の計算機でネットワークを使った分散処理の機能が実装されている。他の計算機で行わせる解析処理のプログラムはPythonスクリプトで与えるため、多段階の分散処理を行うことができ計算能力の増強に柔軟に対応できる。

以上のように、Manyo-LibはMLF標準のデータ解析ライブラリとしてMLFの実験装置データ解析環境の開発に使用され、ユーザーによる利用が開始されている。一方で、以下に示すように様々な問題点も指摘されている。

- ・データコンテナをNeXusファイルへの変換速度の向上
  - ・ネットワーク分散処理におけるデータコンテナの転送速度の向上
  - ・データコンテナの四則演算やそのほかの演算子のマルチスレッド化
  - ・より大きなデータを扱えるように、データコンテナのメモリの有効利用
- これらの項目は言うまでもなく計算科学分

野で培われた技術であり、解決するための開発においては計算科学分野との連携を期待している。

### 2.3 ソフトウェアフレームワーク

MLFでは実験装置における実験制御、データ解析・可視化等々の計算機による処理をネットワーク分散環境下で実行可能にするソフトウェアフレームワークを導入している。2006年度から2008年度にかけての開発により以下のソフトウェアフレームワークを構成するソフトウェアコンポーネントが製作された。

- ・統合的なユーザーインターフェース (UI) となるワーキングデスクトップ
- ・実験装置の運転状態を管理するデバイス管理サーバー
- ・解析/可視化の実行管理を行う解析制御サーバー

これらのソフトウェアコンポーネントはオブジェクト指向スクリプト言語であるPythonで記述されている。また、ソフトウェアコンポーネント間の通信はhttpを使ったXML形式のメッセージをやり取りすることで行われている。httpによる通信を利用して各ソフトウェアコンポーネントはシームレスにネットワーク分散処理が可能で、ユーザーは特に意識することなくネットワーク分散環境を利用することができる。

ソフトウェアフレームワークにおいては、実験制御、データ解析・可視化の各機能はPythonの関数として実行することが可能である。ユーザーはワーキングデスクトップを使用してこれらの機能をキャラクターユーザーインターフェース (CUI) およびグラフィカルユーザーインターフェース (GUI) から実行可能である。CUIはPythonのコマンドラインを使用した実行環境であり、GUIはPythonのGUIライブラリwxPythonを用いて構築される実行環境である。実験装置のUIは装置ごとあるいは研究目的ごとに異なっ

ているが、ソフトウェアフレームワークとしては共通のUIとして装置状態表示、ランチャ、認証を提供する。装置状態表示は実験装置の運転状態、データ集積システム等のデバイスの状態、およびMLFの施設の状態を常時表示するものである。ランチャは測定、解析、可視化、メンテナンス等々の個別プログラムの起動、およびデータ集積システムの直接制御を行うものである。認証はユーザーを特定し、チケットを利用して装置の排他制御を実現している。各装置は、ランチャから呼び出されるプログラムをカスタマイズすることで、その装置に合ったUIを構築することができる。

デバイス管理サーバーはワーキングデスクトップと個々のデバイスを制御するサーバーの仲立ちをする。ここでやり取りされる情報はXML形式のメッセージの形を取っている。また、デバイス管理サーバーを通して各デバイスに行われた指示は動作ログとしてXML形式で記録される。また、デバイス管理サーバーは運転制御スクリプトにより測定条件を変更しながらのデータ収集といった自動測定をバックグラウンドで実行可能である。各条件で設定されたパラメータは一元的に管理され、動作ログと同様にXML形式で記録される。

解析制御サーバーは様々な解析モジュールを組み合わせイベントデータのヒストグラム化、補正、可視化、といった一連の解析処理を直列および並列に実行可能な環境を提供する。一連の解析処理により解析モジュールに設定されたパラメータや結果についてはデバイス管理サーバーと同様に解析ログとして一元管理され、XML形式で記録される。解析制御サーバーによる解析処理は、MLF計算環境におけるネットワーク分散処理モードだけでなく、ユーザーが自分の所属機関に持ち帰って解析を行うことができるようにスタンドアロンモードも備えている。

## 2.4 データベース

MLFでは様々な測定条件で測定が行われ、膨大な測定データが生成される。これらのデータの管理を従来のように個人のノートにのみ実験ログを残すような形ではデータの再利用に支障を来すことが容易に予想される。また、今後予想される公開データに対する解析のみの利用においても、公開されているデータがどのような測定条件で取得されたものが判らなければ、満足の行く知見を得ることは不可能である。我々は測定条件のログ（実験メタデータ）と測定データを結合した形で実験データとして取り扱うためにデータベース（MLF実験データベース）を導入する。MLF実験データベースは実験データ再利用のための検索機能だけでなく、実験データへのアクセス制御、実験データの管理（ストレージ間移動）といった機能も必要である。前述の通り、データ収集ソフトウェアのコンフィグレーション・ファイルおよびコンディション・ファイル、ソフトウェアフレームワークがやり取りするメッセージや実験制御の

動作ログ、解析ログはXML形式で記述されている。また、実験メタデータを記述するNeXusフォーマットもXMLを基本としている。以上のようなデータを取り扱うために、MLF実験データベースはXMLデータベースである必要がある。

我々はMLF実験データベースのプロトタイプとしてキャトルアイ・サイエンス社製RCM System Software [6] を利用した図3に示すデータベースシステムを構築した。現在、このデータベースシステムには我々がデータベースに求めている以下の基本的な機能が実装されている。

- ・実験データの自動データベース化
- ・測定時に付与されるRun番号による実験データの検索
- ・測定データのデータ解析(ヒストグラム化)
- ・Run番号によるヒストグラム化データの検索
- ・ユーザー・グループ単位のアクセス制御
- ・Run番号ごとのデータ転送

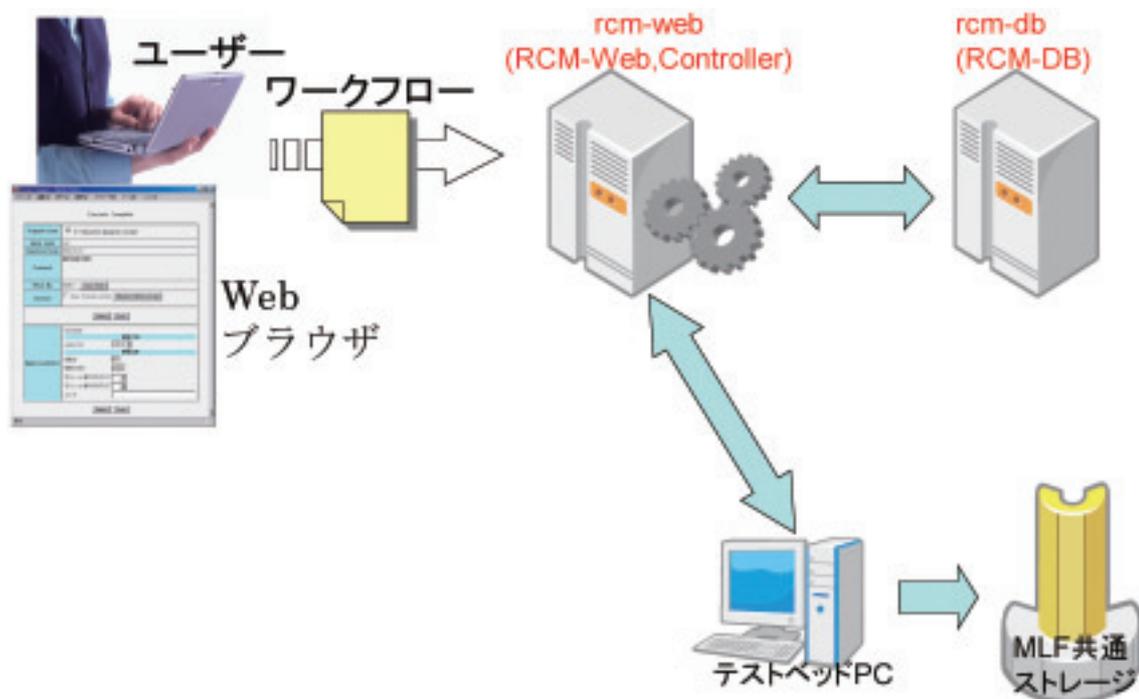


図3 プロトタイプデータベースシステム

## 2.5 計算機資源

MLF建屋内にはMLF共通ストレージが設置されている。このストレージに全実験装置の実験データが集約され、ユーザーのオフラインデータ解析に利用される予定である。MLF共通ストレージには2010年5月現在4TBの容量があり、これは現在MLFに設置されている実験装置が出力するデータを約1ヶ月保存できる容量であるが、今後新たな実験装置が建設や線源の強度増加にしたがってデータ量は急激に増えることが予想される。

MLF共通ストレージはMLF内でのオフラインデータ解析用のストレージであり、実験装置に直付けされているストレージをオンラインストレージとすると、いわゆるニアラインストレージにあたるものである。最終的に実験データはKEK共通計算機のストレージに送られ、テープアーカイブされ、永久保存されることになっている。ユーザーが自分の所属機関から保存された実験データにアクセスする際は、前述のデータベースを経由することになる。公開データ利用についても同様の手順で実装される予定である。

ユーザーが利用可能なオフラインデータ解析計算機も整備されつつあり、マルチCPU、大容量メモリ、高速テンポラリディスクを装備した計算機が設置され、MLF共通ストレージと直結して実験装置のユーザーへの供用が開始されている。

実験装置が接続するネットワークはJ-PARCが管理するLAN(JLAN)である。MLF建屋内のJLANはGigabit Ethernetで構成されており、JLANと外部とはSuperSINET3で接続している。各実験装置のネットワークにはそれぞれVLANが設定されており、JLANのアクセスポリシーの範囲内で実験装置の利用形態に合わせたアクセスポリシーが設定可能である。他には、ユーザーが持ち込んだノートパソコンをインターネットのみに接続可能なゲストネットが整備されている。ユーザーは自身のノートパソコンを事前の登録無しに無線LANを使用してインターネットに接続可能である。

## 3. 実験装置における活用例

中性子非弾性散乱は原子やスピンの空間・時間的な相関を直接観測できる手法として、物質科学の研究に欠かせない実験手段である。MLFにおいても複数の非弾性散乱装置が計画、建設されているが、そのうちのいくつかは建設フェーズから利用フェーズへと移行しつつある。既に利用フェーズとなった装置のうち、チョッパー型非弾性散乱装置(チョッパー型分光器)におけるソフトウェア活用例を示す。図4は実際の実験装置で使用されているソフトウェア群のスクリーンショットである。

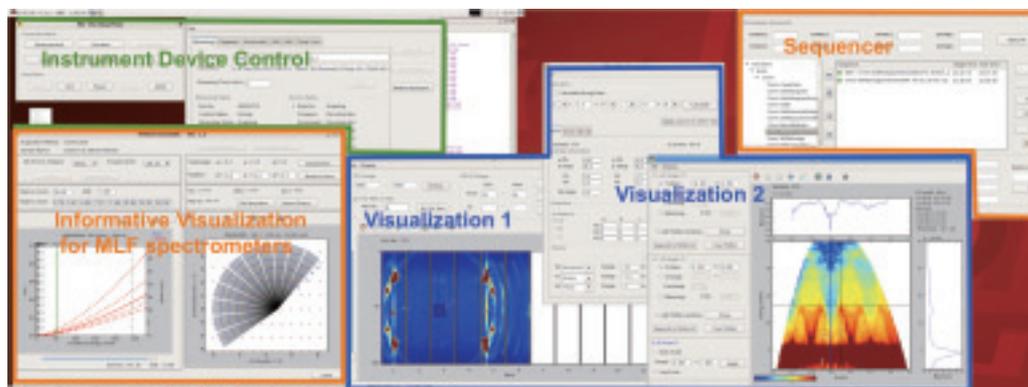


図4 チョッパー型分光器ソフトウェアのスクリーンショット

### 3.1 チョッパー型非弾性散乱装置の概要

MLFのパルス中性子源からは一定の周期(40ms)で白色中性子ビームが生成され、線源を囲む放射線用遮蔽体を貫通したガイド管を通り、試料にて散乱され検出器にて検知される。検出器自体は検知した中性子のエネルギーを識別することは出来ないが、DAQシステムにより中性子一つ一つの到達した位置と時刻がイベントとして記録されるため、その飛行経路と飛行時間から検知された中性子のエネルギーを知ることが出来る(飛行時間法)。チョッパーは中性子用のスリットを高速回転させ、その開口のタイミングにあった速度を持つ中性子のみを通過させることで白色中性子を単色化する装置である。こうして単色化された中性子が試料に入射されるが、そのいくつかは試料中の原子やスピンの運動と運動量とエネルギーをやり取りする(非弾性散乱過程)。その速度変化を飛行時間法で観測することになる。

### 3.2 実験遂行に必要なソフトウェア機能

非弾性散乱装置に必要とされるソフトウェアの機能は、装置制御、測定条件の検討、測定データリダクション、解析・可視化であり、これらの機能を横断的に統合し、測定のプロチャートに沿って実行するための環境が必要とされる。我々はこれらの項目のそれぞれに対し開発を進めてきた。また前述のソフトウェアフレームワークとの結合も進んでおり、主に装置制御においてソフトウェアフレームワークを活用している。

### 3.3 装置機器制御

実験装置において使用される機器として、以下のようなものを挙げることができる。

- ・位置敏感型検出器(PSD)およびエレクトロニクスからなるDAQシステム
- ・チョッパー(ディスクチョッパーおよびフェルミチョッパー)

- ・試料環境温度制御機器
- ・試料ゴニオメータ、ビームナローなど回転軸制御系機器

DAQシステムは既に2.1節で述べられているので割愛する。非弾性散乱装置の重要機器であるチョッパーは装置にもよるが数台以上をオンラインで設定する必要がある。チョッパーを制御している制御盤上のPLCとはFL-net経由で接続されているので、FL-netのドライバを持つWindows PC上で制御ソフトウェアとそれと結合したゲートウェイソフトウェアを起動し、ソフトウェアフレームワークからオンライン制御を行えるようになっている。試料環境温度制御としてはLakeShoreシリーズをGPIB-Ethernet変換機を介して制御するが、こちらもWindows PC上で動作するGPIB-Ethernet変換機のドライバをゲートウェイソフトウェアと結合し、ソフトウェアフレームワークからの制御に対応している。回転軸制御機器はツジ電子製のコントローラにて制御されているが、これも同様の仕組みでソフトウェアフレームワークと結合される。

以上の制御ソフトウェアは全てソフトウェアフレームワークのデバイス管理サーバーの管理下に置かれ、ユーザーインターフェース用PC上のPython環境およびGUIから制御される。現時点では、個々の機器に対し、個別の制御を行うことや、自動運転スクリプトを後述するコマンドシーケンサより連携させて実行することができる。

### 3.4 測定条件検討

非弾性散乱装置では、入射中性子のエネルギー、検出器のカバーする範囲、試料の向きなどの条件によって、測定できる領域が大きく変わる。したがって測定を始める前に、ユーザーが求める物理量を得るのに必要な測定領域を満たすために必要な条件(入射する中性子のエネルギーや試料の角度)を十分に検

討し、その結果に合わせて装置パラメータを変更する必要がある。一方、入射中性子のエネルギーを決めるためにチョッパーの設定を変更し、試料の向きを変更するためにゴニオメータを回転させる必要があり、装置制御との連携も必要となる。そこで、測定条件検用ソフトウェアの作成を行った。このソフトウェアはチョッパーの条件と試料の情報から、試料位置での入射中性子の強度と分解能を計算し表示する機能と、同時に運動量-エネルギー空間内の測定領域を算出し視覚化する機能を持つ。ここで検討され最終的に決まったパラメータを装置制御ソフトウェアへ送り、測定を開始することが最終的な目的であるが、現状は視覚化するところまで完成している。

### 3.5 データリダクション

DAQシステムが記録したイベントデータをヒストグラム化し、各種補正を行って物理的な量である動的構造因子を算出するための一連の関数群である。データフォーマットと使用関数はManyo-Libを積極的に利用している。特に速度が要求される場所はC++で書き下した関数をManyo-Libの一関数として登録して利用している。特にMLFの解析として最も特徴的であるイベントデータのヒストグラム化では、かなりの計算機リソースが必要となっているのが現状である。

### 3.6 イベントデータのヒストグラム化

イベントレコーディングされたデータは、各中性子の検出された絶対時刻情報が記録されているという点で解析において非常に大きな柔軟性を示す。従来、中性子散乱データは飛行時間のヒストグラムとして記録されていた。つまり前もってある時間幅で分割した箱を用意し、検出された中性子の飛行時間に対応した箱に積算していた。この方法の場合、測定中に機器や試料環境で異常が発生した場

合、取得したデータは汚染されたものとなり正しい結果は得られない。一方でイベントデータであれば不要な中性子を省くことが出来る。

また、経過時間とともに変化する現象（過渡現象）を観測するためには、従来なら特定の時間毎に測定の開始と終了を繰り返す必要があったが、イベントデータであれば一連の過渡現象を一度に観測し、解析段階で柔軟に時間分割することが可能となる。

さらに、飛行時間のヒストグラム化の時間幅も測定後に自由に設定できるので、計算機リソースを効率的に利用することが出来る。特に単色化された中性子を利用する非弾性散乱測定では、必要とされる飛行時間領域は比較的狭いため、より柔軟な運用が可能となる。その一例がMulti-Ei測定であるが、その成果は各種文献に出ているので参照されたい [7,8]。

### 3.7 可視化

一口に可視化と言っても、実験遂行の各段階で必要とされる機能が異なるため、実際には多岐にわたる。特にここでは、データをユーザーが理解できる形（プロット等）で表示するための機能全般を指すことにする。飛行時間法による中性子散乱実験で得られるデータとして、最初に扱う必要があるのはPSDの各位置での時間軸に対する強度のヒストグラムであり、まずはこのデータを表示する必要がある。その次にPSD 1本、もしくはX、Y軸と強度の表示が必要となる。さらに複数のPSDによって測定された非弾性散乱のデータは、運動量空間3軸（Q1, Q2, Q3）とエネルギー軸（Energy）の4軸に強度を持つため、これらの多次元データをユーザーが理解できる次元に落とし、表示する必要がある。

以上に述べた可視化機能の必要性は非常に高く、同時にそのデータを必要な場所でスラ

イスした結果を表示する機能も必要とされる。そこで、Manyo-Libを利用し、データリダクションや解析されたデータフォーマットからの可視化を行うソフトウェアを開発した。いずれもGUIはwxPythonを利用し、Python上から起動・利用できる。

- ・1Dプロット

Manyo-Libのヒストグラムデータをプロットするソフトウェアである。マルチプロット、ラインやマークの変更、描画範囲の変更、テキストデータの書き出し読み込みが可能である。

- ・2Dプロット (M2Plot)

特定の条件で関連する複数のヒストグラムデータを2軸+強度のカラーマップで表示する。プロット上の任意の点をクリック、ドラッグ、もしくは直接数値の指定などでデータのカット(切り出し)が可能となっている。他のソフトウェアからの起動も可能な形で実装されている。主に、PSD一本分の位置と時間軸のプロットや、粉末試料や液体・ガラス系試料のデータリダクション結果等を表示するのに使用される。

- ・単結晶データ用プロット

特定の条件で準備された4軸+強度を持つ複数のヒストグラムデータを、指定する軸で射影した後、必要な領域をスライスし、上記の1Dおよび2Dプロットにて表示するソフトウェアである。試料の構造情報と試料の設置方向、入射中性子のエネルギーなどの情報が必要である。

- ・検出器マップ表示用ソフトウェア

PSDを並べた実験装置にて使用できる、検出器位置と強度、その情報を表示するためのソフトウェアである。GUI(マウスクリック)もしくは数値の直接入力で指定したPSDを2Dプロットで表示したり、選択した領域内のヒストグラムの総和を1Dプロットで表示したりするなどの機能を持つ。現在、PSDは順序よく配置されている

ものしかないため表示は限定的だが、将来はより複雑な配置にも対応することを目的としている。

以上のソフトウェアは一部連携しているものの、可視化機能に特化しており、たとえばスライスしたデータを再びManyo-Lib環境へ戻すなどの機能は持たないため、汎用性に欠けている。将来の目標は外部関数の利用に対応させることである。

### 3.8 コマンドシーケンサ

登録されたPythonコマンドをGUI上で選択しコマンドリストとして登録し、登録されたおのおののコマンドに対し引数を個別に与えることで実行可能なスクリプトを作成すると同時に、そのコマンドリストを直接実行するためのソフトウェアである。作成されたスクリプトはコマンドラインからの実行も可能である。登録するコマンドは、装置制御からデータリダクション、可視化にいたるまでの全てのPythonコマンドが使用できるので、自動測定、自動解析などを行うことが可能である。現在のところ、繰り返し、条件分岐などの機能はないため、複雑なスクリプトは書けないが、ひな形となりうるスクリプトを容易に作成できる。簡易のヘルプシステムも搭載しているので初心者でも比較的容易にスクリプトを組むことができる。

## 4. 計算科学との連携に期待するもの

前項までに述べてきたように、MLFにおける計算環境は徐々に整いつつあり、ユーザーもこれらのソフトウェアを利用し始めるようになった。しかし同時に、以下に述べるような多くの問題点、課題点もあらわになってきている。これらの解決のため、計算科学との連携の重要性と期待が高まっている。

### 4.1 データ解析

第一の問題点として、データ量の増大に伴う解析処理に対する計算環境のリソース不足

が挙げられるであろう。その原因として、まず線源の将来にわたる増強計画がある。現在、主に解析処理に用いられている計算機は、市販されている汎用デスクトップ型PCであり、1測定あたり数GBのイベントデータに対し、単純な一条件での解析作業、例えばヒストグラム化や単位変換、数種類の補正等を行った場合、数分から十数分の処理時間がかかっている。ユーザーから見れば、結果の考察および次の測定の条件といった判断に余裕ができるため、データの処理時間は短ければ短いほどよい。Manyo-Libの一部の関数には処理のマルチスレッド化やマルチプロセスを行う機能が搭載されてはいるが、いまだ未完成な部分も多く、現在も改良が続けられている。

また、すでに実用段階であるMulti-Ei測定などの技術を有効に活用するためにも、現状よりも多くのデータ量を扱うための計算環境の増強、改良が急務である。

データ量の増大は、測定対象の物理に応じて発生する。一般に非弾性散乱実験において得られる物理量である動的構造因子 $S(Q, E)$ は、ある一つの条件での測定により運動量方向 $(Q)$ の軸が3つとエネルギー方向の軸が一つの4次元のデータとして得られる。対象となる物質が低次元系であれば、運動量方向の情報を1次元鎖方向、もしくは2次元面内に射影できるため、データ量の圧縮や測定効率の向上を得ることができる。しかし三次元系となると、一つの条件では4次元空間のうちのごく限られた2次元平面を走査するだけであり、例えば Brillouinゾーン内の全情報を得ようとするれば、多くの異なる入射エネルギーと様々な試料角度での測定を繰り返すことが必要となる。その結果、数十から数百回の測定を行うこととなり、その際の処理が必要となるデータ量は膨大なものとなることは明らかである。

さらに、処理を終えたデータをいかにユー

ザーが理解しやすく可視化させるかという問題もある。多次元かつ大量のデータを様々な見せ方で取り扱うことで、一度に大量の情報を得られるのみならず、これまでにない新しい視野、視点を引き出す可能性がある。しかし、ここに挙げたような巨大なデータを十分な速度で取り扱うための技術的な知識や経験が不足していることは否めない。

加えて、新しい解析手法への試みも始まりつつあることが挙げられる。例えば十分な統計をもつデータを得るには大型の試料を用いるのが最も重要であるが、大型の試料、特に単結晶試料の作成に困難があり、粉末試料しか準備できない場合も多々生ずる。粉末試料から得られる情報は運動量の軸が平均化されてしまうのだが、そこから元の3次元の情報を得る試みが進められている。また運動量の情報をフーリエ変換によって実空間での運動の情報へ移行させ、原子のダイナミクスを直接測定しようとする試みもある。また多重散乱など解析的に解く事が難しい補正項目を算出したり、ヒストグラム化を行わずにイベントデータのまま補正したり、解析したりする真のリアルタイム測定、in-situ測定を行いたいという要望もある。これらの新しい手法には実験的手法の改良だけでなく、新たな解析アルゴリズムの構築が重要であり、この分野でも計算科学の技術的、理論的な力を借りることができないかと考えている。

## 4.2 データの解釈

一方で、得られたデータの物理的解釈にも計算科学の力が必要と考えられる。なぜなら、MLFで得られるデータが、理論モデル計算と直接比較ができるだけの質を持ち始めているからである。これまで中性子実験に携わる研究者は、単純な関数、簡単なモデル計算によって得られる $S(Q, E)$ の一部とカットやスライスした実験データとの比較を低次元のフィッティングなどにより行い実験データ

を解釈してきた。しかし、実際の中性子散乱による情報が増えてくると、より複雑、高度なモデルを用いた多次元のフィッティングが必須となる。さらにRandom Phase Approximation、第一原理計算などの手法で計算されたS (Q, E) との直接比較も行えるようになるであろうし、物性の過渡現象などのシミュレーションによる研究に対してもイベントレコーディングによる中性子散乱実験との親和性が高いと考えられる。これらの分野における専門的知識を持つ研究者には、是非とも中性子散乱に興味を持っていただき、積極的な交流を行いたいと考えている。

## 5. まとめ

以上のように、J-PARC/MLFでは世界最先端の実験装置が次々と建設され、その計算環境を利用して新しい実験手法が開発、実用化されている。しかしながら、今後予想される線源の大強度化、多種多様なユーザーに対応するためには、まだまだ開発すべき項目が多数ある。開発項目のいくつかは我々実験分野の人間だけでは解決が難しく、計算科学分野の協力を切に願うものである。実験と計算科学の協力によって、実験家だけでなく計算科学分野の人々にとっても使いやすい計算環境が構築されれば、実験と理論のコラボレーションによる研究成果の創出のみならず、公開データを利用した理論研究の成果創出にも

繋がると予想される。

## 6. 謝辞

MLF計算環境の構築にあたってはMLF計算環境検討グループの方々にご協力いただきました。特に高エネルギー加速器研究機構の大友季哉教授、鈴木次郎助教には全体の構想から始まりManyo-Libの開発に多大なるご尽力をいただきました。深く感謝いたします。

## 参考文献

- [1] 藤井、新井、“大強度加速器施設J-PARC—物質・生命科学実験施設を中心として—”、応用物理、第78巻、第8号、758-764 (2009)
- [2] <http://www.openrtm.org/OpenRTM-aist/html/index.html>
- [3] <http://daqmw.kek.jp/>
- [4] <http://www.nexusformat.org/>
- [5] <http://www.hdfgroup.org/>
- [6] <http://www.i4s.co.jp/rcm/rcmabs.html>
- [7] Nakamura, Kajimoto, Inamura, Mizuno, Fujita, Yokoo, and Arai, J. Phys. Soc. Jpn. 78, 093002 (2009)
- [8] 梶本、中村、稲村、水野、横尾、中谷、新井、藤田、固体物理、Vol. 45、79 (2010)