

# Activity Report 2021

Computing Research Center

# 目次

## 第 I 部 研究活動

1. Geant4 .....	3
1.1 Geant4 コラボレーションの運営 .....	3
1.2 MPEXS の開発 .....	3
2. 素粒子理論における高次補正計算 .....	6
2.1 はじめに .....	6
2.2 複素質量 1 ループ積分 .....	6
2.3 数値計算関連の研究 .....	7
3. 格子ゲージ理論シミュレーション .....	8
3.1 格子ゲージ理論の大規模シミュレーション .....	8
3.2 計算科学のためのアルゴリズムとシミュレーション手法の研究 .....	9
4. 中性子用オブジェクト指向データ解析システム .....	11
4.1 データ解析フレームワーク “Manyo Library” の研究開発 .....	11
4.2 ソフトマターのシミュレータの研究開発と高分子基礎物性 .....	11
5. 統計的手法の物理解析への応用とシミュレーション .....	13
6. メニコアプロセッサ演算システムにおけるシミュレーションプログラムの 研究開発 .....	15
7. データ収集システム .....	17
7.1 MLF から KEKCC へのデータ転送性能評価 .....	17

第 I 部  
研究活動



# 1. Geant4

佐々木 節、尼子 勝哉、陳 叶、岡田 勝吾、村上 晃一

Geant4 の維持、開発は、世界中の研究機関共同による Geant4 コラボレーション組織の下で行われている。計算科学センターは、日本グループの活動のホストとしての役割を果たしている。また、ユーザサポートとして、研究会や講習会などを定期的に行っている。研究開発面では、Geant4 の高速化への取り組みや、医学応用など学際分野への展開を行っている。

## 1.1 Geant4 コラボレーションの運営

Geant4 コラボレーションでは、様々な委員会のもと、コラボレーションの運営が図られている。計算科学センターからは、村上、岡田が Steering Board の委員、佐々木が Geant4-DNA の副スポークスパーソン、岡田が Geant4-DNA の Steering Board の委員となっている。2021 年度は Geant4 v11.0 のリリースと 3 件のマイナーパッチを公開した。Geant4 v.11.0 では、タスクベースのマルチスレッドが新たに実装され、デフォルトで並列処理するようになった。

## 1.2 MPEXS の開発

2021 年度から 4 年間の研究期間で、科研費基盤研究(A)「放射線シミュレータの新展開」(研究代表者 佐々木)の研究課題が採択された。GPU を使った放射線シミュレーションの高速化と、その成果の応用的展開を継続して実施している。また、岡田が「超並列計算による高線量率超短時間照射 (FLASH) 効果の数理モデルの構築」の課題で、2021 年度から 3 年間の研究期間で科研費基盤研究(C)に採択されている。MPEXS の応用として、放射線治療装置のシミュレーションに関して、1 社の企業と共同研究を実施している。放射線治療計画の線量計算エンジンとしての開発を進めている。

### 1.2.1 MPEXS-DNA への多重イオン過程の実装

MPEXS-DNA は、GPU で動作する細胞レベルの放射線シミュレータである。細胞核内部で起きる荷電粒子の電離反応、水和電子やラジカルといった活性種の化学反応を GPU による超並列計算により高速にシミュレートできる。

MPEXS-DNA で計算される低 LET 放射線 (光子や電子など) の照射による各活性種の収率<sup>1</sup>は、実測結果や他のシミュレータによる計算結果を再現する。その一方で、炭素イオンなどの高 LET 放射線の場合、特に過酸化水素(H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>)の収率が実測結果と一致しない。こ

---

<sup>1</sup> G 値とも言い、100 eV のエネルギー損失で生成される活性種の個数を意味する。

これは、MPEXS-DNA が高 LET 放射線の物理過程を全てカバーしきれていないことを意味する。その考慮できていない物理過程の候補に多重イオン過程が挙げられる。そこで[1]を参考に、MPEXS-DNA に多重イオン過程を実装した。

多重イオン過程では、荷電粒子と水分子との間の電磁相互作用により複数個の軌道電子が反跳し、 $H_2O^{n+}(n \geq 2)$ イオンが生成する。その後、 $H_2O^{n+}$ イオンは解離プロセスを経て  $O_2^{\cdot-}$  や  $HO_2^{\cdot}$ 、 $O(3P)$ の生成が増加する。 $H_2O_2$ は主として OH ラジカル同士の結合で生成されるが、その OH ラジカルが  $HO_2^{\cdot}$ や  $O(3P)$ との化学反応により消費される。従って、多重イオン過程を考慮しない場合と比べて  $H_2O_2$ の生成量が減ることが予想できる。

図 1 に、炭素イオン照射による  $H_2O_2$ の収率の LET 依存性を示した。実線と点線のプロットが MPEXS-DNA のシミュレーション結果であり、実線が多重イオン過程を考慮した場合、点線が考慮しない場合である。多重イオン過程のない場合は、LET の増大に伴い  $H_2O_2$ の収率も増加傾向にある。多重イオン過程は、高 LET 領域（炭素の入射エネルギーが低い場合）において顕著となる。実際に LET が 200 keV/um 付近で  $H_2O_2$ の収率は最大となり、その後は減少に転じている。この傾向は、実測結果と一致している。

多重イオン過程は Geant4-DNA にも実装されておらず、コミュニティからは必要とされている。今後は MPEXS-DNA に実装したモデルを Geant4-DNA にマイグレートしていく予定である。

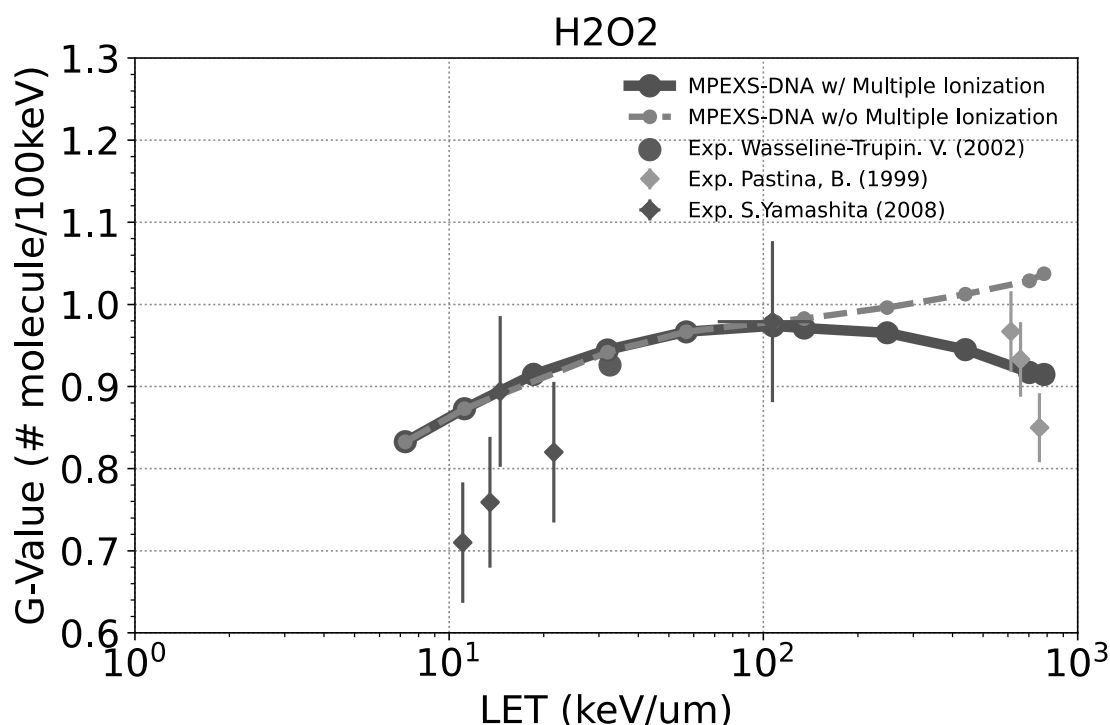


図 1 炭素イオン照射における過酸化水素水の収率 (G 値) の LET 依存性。実線が多重イオン過程を考慮した場合の MPEXS-DNA によるシミュレーション結果、点線が多重イオン過程を考慮しない場合。

参考文献

- [1] Jintana Meesungnoen and Jean-Paul Jay-Gerin, “High-LET Radiolysis of Liquid Water with  $^1\text{H}^+$ ,  $^4\text{He}^{2+}$ ,  $^{12}\text{C}^{6+}$ , and  $^{20}\text{Ne}^{9+}$  Ions: Effects of Multiple Ionization”, *J. Phys. Chem. A* 2005, 109, 6406-6419

## 2. 素粒子理論における高次補正計算

石川 正、金子 敏明

### 2.1 はじめに

素粒子物理学では、標準模型やそれを超える模型などが提唱され、物質の元となる素粒子の性質や時空の理解を進めようとしている。高エネルギー加速器による素粒子実験のデータを理解するため、これらの素粒子の模型を使って素粒子物理学の場の理論に基づき Lattice QCD のような非摂動的な扱いを行う方法と、摂動的に行う方法等があり、コンピュータを用いた理論的研究が進められている。我々は与えられた物理模型（ラグランジアン）から、摂動的に素粒子衝突反応の断面積を計算機で自動的に数値計算を行うためのシステム開発を行ってきている。近年の加速器実験（LHC、ILC）においては、高エネルギー衝突で起こる様々な現象を高精度で測定し、標準模型の厳密な検証や標準模型を超えた物理を探索することが期待されている。実験データを解析して素粒子の性質などを精密に分析するためには、多様な素粒子衝突反応の高次補正を含む精密な大規模な理論計算が不可欠で、自動計算システムの構築が進められている。自動計算システムでは、場の理論の記号処理的な取扱いから数値計算法まで様々な要素技術が必要で、これらは計算科学にも密接に関係するため計算科学センターにおいて研究開発を行っている。

摂動論で取り扱うのは、ファインマングラフの計算であり、高次の場合には、ファインマンループ積分が出現する。この積分に関する研究としては、ループ積分をマスター方程式にリダクションする部分積分方法、特異性を抽出するセクター分解法、Mellin-Barnes 変換する方法、マスター方程式を微分方程式にする方法、最も一般的な形である超幾何関数で表現する方法などがあり、世界中の多くの研究者が研究を進めている。

ここでは、進めている高次の輻射補正計算の数理的方法の拡張と数値計算法等について述べる。

### 2.2 複素質量 1 ループ積分

不安定粒子が含まれるループ積分を計算する場合には、それらの粒子の質量を複素数とし、有限の虚部を持つものとして扱う必要がある。こうした計算は、多くの場合数値積分により実行することができるが、解析的な計算を行いそれに基づきライブラリとして用意しておくことが計算効率と一般性の点で望ましい。また、解析的な計算により特異点付近での漸近的振る舞いなどの情報を得ることができる。

実数の質量をもつ粒子の場合にはループ積分の被積分関数は、通常導入される  $(-i\epsilon)$  の項のために積分領域内で発散することはないが、質量を任意の複素数とした場合には被積分関数は積分領域内に特異点を持ち、多重積分の途中で多価関数となる。特異点付近の寄与



を分離すると同時に、複素平面にカットを入れ、多価関数を一価関数にした上で積分する必要がある。こうした特異点と不連続性を持つカットは、運動量や質量の実部・虚部の値の大小により変化する幾何学的な構造により、出現場所やその寄与が変化する。これらに対応した解析的積分結果を求め、数値計算ライブラリとして整備することが求められる。

今年度は、Feynman graph の構造とループ積分の構造とのより深い関係を見るために、グラフ理論的な検討を行った。特にループ積分は、Feynman parameter と運動量と質量からなる、C と D と呼ばれる 2 つの因子の組み合わせから構成される。これらとグラフの構造との関係、C を共通にもつグラフの特徴付けについて検討した。

## 2.3 数値計算関連の研究

摂動論の高次補正の計算に現れるファインマン積分は多次元積分であり、被積分関数は多変数の有理関数となっている。スカラー積分の場合は

$$\mathcal{I} = \frac{\Gamma(N - \frac{nL}{2})}{(4\pi)^{nL/2}} (-1)^N \int_0^1 \prod_{r=1}^N dx_r \delta(1 - \sum x_r) \frac{C^{N-n(L+1)/2}}{(D - i\epsilon C)^{N-nL/2}}$$

で与えられる。ここで、 $L$  はループの数、 $N$  はループの内線の数、 $n$  は時空の次元数で、 $n = 4$  あるいは  $n = 4 - 2\epsilon$  をとする。C および D はファインマン変数  $x_r$  の多項式で、C はファインマン変数のみから成り、エネルギーや運動量などの量は D のみに含まれる。この積分は、物理的な条件により被積分関数の分母が 0 となることによる発散、赤外発散および紫外発散などをもつ場合があり、これを取り扱う処方が必要となる。我々は、ループ積分を解析的な方法を用いず全てを数値計算で行う方法 (DCM : Direct Computation Method、直接計算法とよぶ) の研究開発を進めている。

計算機環境としては、GPU や PEZY のアクセラレータ、本機構のベクトル計算機および独自に開発した多倍長専用システムを用い、積分方法に関しては、Quadpack, QMC, Double Exponential Transformation などを使いそれぞれのシステムでの高速化を図っている。2021 年度には日本物理学会で湯浅富久子 (KEK 名誉教授) が報告を行った。、これらの研究は、湯浅富久子 (KEK 名誉教授) 他、E. de Doncker (ウェスタンミシガン大学)、加藤潔 (工学院大学)、台坂博 (一橋大学)、中里直人 (会津大学)、安井良彰 (東京経営短期大学) が参加している。

## 3. 格子ゲージ理論シミュレーション

松古 栄夫

### 3.1 格子ゲージ理論の大規模シミュレーション

素粒子であるクォークの間に働き、原子核を形作る核力の源である強い相互作用は、量子色力学 (Quantum Chromodynamics, QCD) によって記述される。QCD はその結合の強さが距離とともに増大するため、結合定数によって展開する摂動論は低エネルギー領域で破綻し、解析的な計算が困難となる。このため、ハドロンの性質や粒子衝突におけるハドロン散乱振幅などを定量的に調べるには、なんらかの非摂動論的手法が必要である。格子 QCD は場の理論としての QCD を 4 次元立方格子上で定式化したもので、経路積分を数値的に実行することにより、第一原理である QCD に基づいた計算を可能にする。

近年の理論的進展、計算機の発達、アルゴリズムの改良などによって、格子 QCD シミュレーションの精度や信頼性は大きく向上し、素粒子・原子核の物理現象を理解する上で重要な役割を果たしている。既に物理的クォーク質量での計算が実現し、フレーバー物理に現れるハドロン行列要素の精密計算が進んでいる。また格子ゲージ理論は、標準理論を構成する QCD のみならず、他の場の理論の解析にも適用できる。標準理論を超えた物理の候補として注目されている、超対称性理論やテクニカラー理論に対しても応用が進められている。

2021 年度には、以下のような研究を進めた。

#### (1) 複素ランジュバン法による有限密度系の研究

格子 QCD の有限密度系は、フェルミオン作用が複素数となることによる複素位相問題のため、モンテカルロ法の適用が困難であった。近年、複素ランジュバン法というアルゴリズムが開発され、有限密度系を扱える可能性が出てきた。この複素ランジュバン法を適用可能な条件を理解し、カラー超伝導相などの有限密度系に応用する研究を、KEK 素粒子原子核研究所の西村淳氏らとの共同研究で進めている。

#### (2) 格子 QCD コード Bridge++ の開発

C++ 言語で記述されたオブジェクト指向デザインによる格子 QCD コード Bridge++ を開発している。2012 年 7 月に最初の公開版を ver.1.0 としてリリースしたが、その後も継続的にデザインの改良、機能拡張、高速化、ドキュメントの整備等を進めている。2021 年度末現在の最新版は ver.1.6.1 である。2021 年度には、特に理研の富岳コンピュータ向け実装と高速化、線型方程式解法におけるマルチグリッド法の実装を行った。これまでの各種最新アーキテクチャ向け実装を統合した、Bridge++ 2.0 へ向けての実装を進めた。

Bridge++ サイト : <http://bridge.kek.jp/Lattice-code/>

## 3.2 計算科学のためのアルゴリズムとシミュレーション手法の研究

これまで HPCI 戦略プログラム分野 5「物質と宇宙の起源と構造」、ポスト京重点課題 9「宇宙の基本法則と進化の解明」において、計算科学の推進を図る活動として、数値計算アルゴリズムの分野横断的応用・開発、種々の計算機アーキテクチャの性能を十分に引き出すための手法の開発、計算科学に必要なデータグリッド (JLDG: Japan Lattice Data Grid) や格子 QCD 共通コードの開発などを行ってきた。これらは素粒子・原子核・宇宙のそれぞれの分野で培った技術を分野横断的に応用し、計算機科学や応用数学の専門家と連携・協同して計算手法を発展させてゆくことを目的としている。2021 年度には以下のような研究を進めた。

### 1. 超新星爆発の大規模シミュレーション

これまで並列化や線形アルゴリズムの改良で共同研究を行った、超新星爆発シミュレーションのプロジェクトに引き続き参加し、研究を行っている。本研究は沼津高専の住吉光介氏、早稲田大学の山田章一氏、岩上わかな氏、大川博督氏、国立天文台の長倉洋樹氏、東大宇宙線研の原田了氏らとの共同研究である。2次元、3次元空間での流体力学方程式と結合した Boltzmann 方程式によるニュートリノ輻射輸送方程式を用いて、理研の富岳コンピュータ、JCAHPC の Oakforest-PACS (2021 年度末で運用終了) 等を利用した大規模計算を進めた。

### 2. 超新星爆発シミュレーションコードの GPU による高速化

球対称近似でのシミュレーションは、爆発には至らないことが知られているが、観測データとの比較や 2,3 次元での計算の基礎として重要であり、高精度化が必要とされている。このようなシミュレーションコードを GPU や PEZY-SC 等のアクセラレータを利用して高速化する研究を、沼津高専の住吉光介氏との共同研究として行っている。またベクトル計算機である KEK の NEC SX-Aurora TSUBASA 向け最適化も進めている。

### 3. 高性能計算物理勉強会

素粒子・原子核・宇宙物理の分野において不可欠な研究手法である計算科学的アプローチに関して、分野を越えた研究者間の情報交換や協力体制構築を進めるため、高性能計算物理勉強会 (HPC-Phys) を 2018 年に開始した。この活動は計算基礎科学連携拠点 (JICFuS) が主催する活動として行っており、松古はアドバイザーとして運営に参加している。2021 年度は計 4 回の勉強会をオンライン開催した。

HPC-Phys 勉強会サイト : <http://hpc-phys.kek.jp/>

#### 4. Japan Lattice Data Grid (JLDG)

JLDG は計算素粒子物理および関連する分野のためのデータグリッドであり、グリッドファイルシステム Gfarm を利用して、国立情報学研究所が運営する SINET 上に構築されている。

JLDG の運用チームに参加し、KEK サイトの運用と、JLDG の利便性向上のための開発研究を行っている。

JLDG サイト : <https://www.jldg.org/>

## 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

### 4.1 データ解析フレームワーク “Manyo Library” 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)が共同で建設し、運用をしている施設である。J-PARC の物質生命科学研究所施設(Materials and Life Science Facility: MLF)は、陽子ビームから得られるパルス中性子/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、中性子物理など）に対応する分光器が設置され運用されてきている。KEK 計算科学センターは CROSS 東海のメンバーとともに MLF 建設期から協力してきている。オブジェクト指向データ解析システム(Manyo-Lib)は MLF 計算環境のうち、各ビームラインにおいて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。

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）を提供し、各ビームラインにおいて個々の分光器の仕様や実験対象物、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して利用がされてきている。このような基盤ソフトの整備は、物質科学分野の研究施設では初めての試みであり、メンテナンスを含めて運用されている。Manyo Lib がサポートするデータフォーマットは HDF(Hierarchical Data Format)を基盤とした NeXus (A common data format for neutron, x-ray and muon science, <http://www.nexusformat.org/>) で、物質科学の散乱実験のデータフォーマットとして国際的に策定が行われているものである。Manyo Lib の開発者は NeXus International Advisory Committee(NIAC)の委員として MLF の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。

Manyo Lib は現在 MLF にある 23 の分光器のうち、16 のビームラインでインストールされ利用され実験データ解析の基盤環境となっている。一方で Manyo-Lib は 2003 年より研究開発がされているが、2021 年度は大幅な拡張はなくメンテナンスが MLF の中性子の分光器グループによって行われた。

### 4.2 ソフトマターのシミュレータの研究開発と高分子基礎物性

ソフトマターは一般に、高分子やタンパク質などの分子それ自体が柔らかいもので、小さな外場（力学、磁場、光など）によって分子の変形がおこる。「ソフトマターの科学」の歴史は 100 年で新しい研究分野で基礎物性の研究は発展途上であるが、一方で有機 EL や

コンデンサーなどを始めとして様々な電子デバイスなどに最先端の技術として当たり前のように応用されている。

ここで研究開発をしているモンテカルロシミュレータは、高分子材料の中性子散乱実験データの解析を目的とするもので、J-PARC/MLF の解析環境に接続できるシミュレータの 1 つになる。中性子散乱実験は他の粒子線ビーム（光、X 線、電子ビーム）と比較して波長が長く（エネルギーが低い）、分子の大きなソフトマターの構造や応答を調べるには適した方法である。このシミュレータを利用して、5 つの異なる種類の高分子を連結したペンタブロック共重合体のバイナリブレンド（ABCBD 型と CBABD 型）が示すマイクロ相分離構造の考察を行った[1-2]。シミュレータからは、パラメータを変化させることで D ドメインを A と C がそれぞれ 2 つまたは 3 つが取り囲んだ正方形または正六角形をユニットとする正多角形のタイリングが得られた。正多角形のタイリングは正 3、4、6 角形だけが知られていることに対応する。さらに変化させると「四角形と三角形のタイリング」について「五角形と三角形のタイリング」が得られることがわかったが、これは正八角形、正十角形のタイリングができないことと対応する。

[1] ペンタブロック共重合体のバイナリブレンドによる 2 次元超格子構造、2021 年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会 合同討論会（オンライン）

[2] “Cylindrical Super-Lattice Structures with Three-Contrasts from Pentablock Binary Blends Studied by Monte Carlo Simulation” Jiro Suzuki, Makoto Suzuki, Atsushi Takano and Yushu Matsushita, *Macromolecular Theory and Simulations* 30, 2100015 (2021). <https://doi.org/10.1002/mats.202100015>

## 5. 統計的手法の物理解析への応用とシミュレーション

柴田 章博

本プロジェクトでは、主としてベイズ統計に基づく数値統計の技術・手法を応用し、高エネルギー物理や素粒子物理などに現れる問題の数値的な解法を研究する。近年、複雑なデータ構造もった大規模データの解析が求められ、データベース技術や数値的な方法によるデータ解析が重要である。また、シミュレーション技術や可視化技術の開発を合わせて行う。

数値シミュレーションでは、現象を適切にモデル化した偏微分方程式を立てそれを離散化し計算機を用いて解くが、離散化された方程式をいかに効率よく解くかを考えることも課題のひとつである。その際、方程式の中に拘束条件式がしばしば付加される。更に、拘束条件は単に付加されるだけのものではなく、それを成立させるための圧力勾配や電位勾配のような項を運動方程式に同時に生じさせる。拘束条件式とそれから運動方程式に追加される項の組み合わせが多様な物理現象の大きな要因になっている。

ある種のシミュレーションでは問題のパラメータに従った確率で事象を発生させて実験や観測を模擬することが求められる。本研究では特に、モンテカルロシミュレーションのアルゴリズム、拘束条件付き確率過程サンプリング法を研究する。

### 拘束条件付き確率過程サンプリング法

拘束条件付き確率過程サンプリング法では、高次元空間に拘束条件として埋め込まれた拘束条件式で規定された拘束面（陰関数曲面）上でシミュレーションを行い、拘束面上の点を任意の重みでサンプリングする方法である（図 1）。本研究では問題に対応して、「拘束条件付きランジュバン法」と「拘束条件付き HMC 法」の 2 種類のアルゴリズムについて検討を行う。

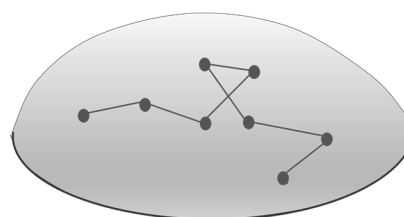


図 1 陰関数面上のランダムウォーク

### 拘束条件付きランジュバン法

拘束条件付きランジュバン法の低次元システムへの応用として 3 次元の可視化 (CG) の研究を行った [1]。拘束条件式  $F(x)=0$  の陰関数曲面で表現された物体の表面上のランダムウォークによって、物体表面を一様にサンプリングして、点レンダリングにより可視化する。物体の陰影は陰関数曲面の法線ベクトルと光源の位置及び視線ベクトルから計算することができる。さらには、 $F(x)=0$  と  $G(x)=0$  の 2 つの拘束条件を満たす陰関数曲面のサンプリングによって、2 つの物体の衝突点の検出と可視化、衝突点で物体の

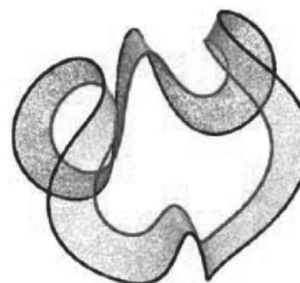


図 2 陰関数曲面同士の衝突曲線によるカッティングとエッジの可視化

カットとエッジの可視化などができる (図 2)。

高次元システムへの応用として、高エネルギー衝突実験における素粒子の反応過程に適用する。論文[2]では電子・陽電子の散乱データから入射したビームのルミノシティスペクトラムの推定法を研究した。このような解析法の研究・開発には模擬データの生成は不可欠である。素粒子の反応過程においては、反応の終状態として多数の素粒子が生成されることが知られており、その反応過程の計算には終状態の粒子数に応じて高次元積分が必要となる。ここでは、それら反応過程の模擬データ生成の新しい方法について検討する。

終状態の出現確率は微分散乱断面積によって与えられる。ランジュバン法ではドリフト項 (微分断面積に応じたポテンシャル力) を導入することで、微分散乱断面積で重みづけられたサンプリングを実現できる。また、始状態と終状態を指定するとエネルギー保存則・運動量の保存則が拘束条件として付加される。

### 拘束条件付き HMC 法

拘束条件付き HMC 法は、拘束条件付き模型の格子ゲージ理論に基づく数値シミュレーションを実行するために開発を行う。具体的な模型としてゲージ不変な質量項を有する Yang-Mills 理論格子ゲージ理論を対象とする[3]。Yang-Mills 場 (グルーオン) とスカラー場は相互作用するゲージ・スカラー系の模型においては、ヒグス機構 (BEH 機構) を通じて Yang-Mills 場に質量を与えることができる。一方、ゲージ不変な質量項を有する Yang-Mills 理論では、スカラー場の自由度は Yang-Mills 場の内部自由度の一部が担うとするもので、還元条件と呼ばれる拘束条件付きの理論として定式化される。

HMC 法は、格子ゲージ理論における数値シミュレーションにおいて広く活用されているアルゴリズムで、ハミルトン運動方程式を解いて場の配位の更新と生成を行う。本研究では、HMC 法を拘束条件付きのハミルトン方程式の系へと拡張する。その際、拘束条件は 2 種類の場の間関係式と与えられており、時空間 (格子点の数) のオーダーの連立方程式を解くことが必要となるので、拘束条件式の数値解法の開発も併せて行う。

### 文献

- [1] Generalized Stochastic Sampling Method for Visualization and Investigation of Implicit Surfaces, S.Tanaka, A.Shibata, H.Yamamotoy, and H.Kotsuru, Computer Graphics Forum Vol.20 (2001) p.359-367
- [2] An inference method of the luminosity spectrum in a future  $e^+e^-$  linear collider, A.Shibata, S.Kawabata, J.Fujimoto, Y.Kurihara, T.Watanabe, Phys.Lett. B645(2007) p.12-18
- [3] The lattice Yang-Mills theory with a gauge-invariant gluon mass in view of the gauge-invariant BEH mechanism towards confinement, A.Shibata, K.-I. Kondo, R.Matsudo, S.Nishino, presented at Asia-Pacific Symposium for Lattice Field Theory (APLAT 2020), online Aug 4-7, 2020, <https://conference-indico.kek.jp/event/113/>



## 6. メニーコアプロセッサ演算システムにおけるシミュレーションプログラムの研究開発

石川 正、松古 栄夫

超並列でかつ超低消費電力のメニーコアプロセッサは現在の高性能計算機の主流の一つである。メニーコアプロセッサを利用した素粒子関連のプログラムの研究開発を行い、高性能なアルゴリズムとチューニング技術を確立し、同時にシステムの消費電力を評価することを目的として、ExaScaler 社との共同研究を 2014 年 8 月に開始した。このため PEZY Computing 社のメニーコアプロセッサ PEZY-SC を搭載した「Suiren Blue (青睡蓮)」、第 2 世代の PEZY-SC2 を搭載した「Suiren2 (睡蓮 2)」の運用を行っている。これらのシステムは液浸冷却によって低消費電力、高密度実装を実現している。なお、令和 3 年度においては Suiren Blue は冷凍機の不調のため運用を停止していた。

Suiren2 は 2017 年 11 月に HPL プログラム 788.2 TFLOPS の実行性能で消費電力 47.0 kW を記録し、Green500 リストで 2 位にランキングされた。

Suiren2 主な諸元

最大理論性能	1,082 TFLOPS
プロセッサあたりの理論性能	2.8 TFLOPS
ノード数	48
ノードあたりのプロセッサ数	8
総メモリ容量 (PEZY-SC2)	24 TB
総メモリ容量 (ノード内)	1.5 TB



Suiren2 システム

PEZY-SC プロセッサは通常の CPU (ホスト) に対し、アクセラレータ (演算加速デバイス) として働く。従って、ホスト上で実行するコードからボトルネックとなる部分を抜き出し、デバイス上のメニーコアで多重並列実行する、ヘテロジニアスな計算を行うことで高速化される。そのためには、ホストとデバイス間でデータの転送が必要であり、これを

最小化するアルゴリズムの採用が不可欠である。またデバイス上では多数のコア (PEZY-SC2 の場合 1984 個) 上でコア当たり 8 スレッドによる並列実行となり、高速化のためにはループ分割、メモリアクセス、スレッド交換、スレッド同期などを最適化する必要がある。PEZY-SC プロセッサに対しては OpenCL に準拠した PZCL というライブラリを利用して、このようなオフロードのためのコードの開発を行う。

Suiren2, Suren Blue システムを使用して、以下のような研究開発を行っている。

#### (1) ファインマンループ積分に関する数値計算の研究

既存の C/C++ 言語から指示文で PEZY-SC2 (PEZY-SC) で演算する部分のコードを自動的に生成する開発環境を整え、いくつかの 3 ループのセルフエネルギーのファインマンループ積分 (6 次元、7 次元積分) を実施して研究を進めた。

#### (2) 格子 QCD のシミュレーション

格子 QCD 計算において最も時間を要するフェルミオン行列に対する線形方程式解法の PEZY-SC プロセッサへのオフロードを既に行っている。フェルミオン演算子は疎行列であり、デバイスのメモリ帯域幅に律速されるが、そこから予測される性能値を実現するにはメモリ上のレイアウトや演算の配置について最適化することが不可欠である。格子 QCD で典型的な Wilson フェルミオン行列に対する線形方程式解法については、すでに PEZY-SC プロセッサ上で動作するコードが開発済みである。このコードをプロトタイプとして、OpenACC ディレクティブによるオフロードコードを PZCL に変換するコードジェネレータの開発を行っている。

#### (3) 重力崩壊型超新星爆発シミュレーション

重力崩壊型超新星爆発の数値計算では、ニュートリノに対する Boltzmann 方程式と高密度物質の流体方程式を結合して解く必要があるが、ニュートリノ輸送を記述する前者が律速となる。これまでに球対称系でのシミュレーションコードに対し、(1) 陰解法における発展方程式の係数行列に対する線形方程式の反復解法、(2) ブロック密行列の逆行列の解法、(3) Boltzmann 方程式の衝突項の計算、について PEZY-SC プロセッサへオフロードするコードを開発し、最適化と性能評価を行った。本年度は引き続き最適化を進めながら、(2) で述べたコードジェネレータが適用できるように、コードの変更を進めている。

## 7. データ収集システム

鈴木 聡

Belle2, T2K 等のデータ収集システムの開発・運用に計算科学センターから鈴木が参加している。

### 7.1 MLF から KEKCC へのデータ転送性能評価

J-PARC MLF で行われる g-2/EDM 実験では 400MB/s 程度のデータ生成が予定されている。最終的なデータ蓄積場所は KEKCC であるので、MLF のオンラインストレージから直接 KEKCC へ遅滞なくデータ転送を行うとどの程度の性能が達成可能かの調査に協力した。rclone で sftp プロトコルを選択し、ディスク毎にアクセスするファイルを 1 個に絞ることで 1 台のオンラインストレージサーバから 8.5Gbps でデータ転送できることが確認された。

J-PARC から KEKCC へのアクセスは制限されており、任意のアプリケーションを使用することは出来ない。過去には大量データ転送に iRODS が利用されていたが現在では ssh を介したもの (scp, rsync 等) か CIFS が一般的である。転送性能は CIFS よりは ssh を経由したものの方がよいが、ssh の 1 セッションでは 120MB/s 程度、rsync は 200MB/s 程度である。ssh は暗号化が、rsync は二重チェックサム計算が律速している。rsync は強力な認証機構を備えていないため、実際にはほとんどの場面で ssh 越しに使用されており、本来の実力は発揮されていない。

方式	速度	律速点	懸念点
ssh/scp/sftp	~120MB/s	暗号化	
rsync w/o ssh	~200MB/s	チェックサム計算	認証が弱い

その反面、400MB/s は単独のハードディスクドライブでは達成できないので、複数のファイルを同時に転送するか、SSD や RAID システム等を用いてストレージを高速化する必要がある。今回はコストを抑えて達成できるかを検証するため、並列転送で実施した。

並列数を増やすとストレージへのアクセスがランダムアクセスとなってしまう、シーケンシャルアクセスであれば 150MB/s 程度で読み出し可能なハードディスクが 5~10MB/s 程度に性能低下してしまう。KEKCC 側は分散ファイルシステムである GPFS を使用しているので全く影響はない。一方オンラインストレージ側は一般的なハードディスクのため、ディスク上のレイアウトを意識した並列送信スケジューリングが不可避である。今回は時並列転送用に rclone を使用し、KEKCC への送信には sftp プロトコルを選択した。

データ収集システムとしてはデータの記録が最優先事項であり、転送のための読み出しによって書き込みが間に合わないなどが起きてはならない。アクセスパターンやファイルシステムにより性能の低下の振る舞いが異なるので調査を行っている。



# 第 III 部

## 資料



## 15. 著作

### 15.1 論文

#### 15.1.1 査読有り

- Tsukahara, H., Iwano, K., Ishikawa, T., Mitsumata, C., Ono, “Relationship between magnetic nucleation and the microstructure of a hot-deformed permanent magnet: micromagnetic simulation.”, NPG Asia Mater 12, 29 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41427-020-0210-2>
- Kentaro Baba, Tamon Kusumoto, Shogo Okada, Masayori Ishikawa, “A simulation-based study on water radiolysis species for H-1(+), He-4(2+), and C-12(6+) ion beams with multiple ionization using Geant4-DNA”, Journal of Applied Physics 129, 244702 (2021) ,DOI: 10.1063/5.0054665H.
- Wook-Geun Shin, Dousatsu Sakata, Nathanael Lampe, Oleg Belov, Ngoc Hoang Tran, Ivan Petrovic, Aleksandra Ristic-Fira, Milos Dordevic, Mario A. Bernal, Marie-Claude Bordage, Ziad Francis, Ioanna Kyriakou, Yann Perrot, Takashi Sasaki, Carmen Villagrasa, Susanna Guatelli, Vincent Breton, Dimitris Emfietzoglou, Sebastien Incerti ,  
“A Geant4-DNA Evaluation of Radiation-Induced DNA Damage on a Human Fibroblast”, Cancers 13(19) 4940-4940 2021.9.30
- P. Arce, D. Bolst, M. - C. Bordage, J. M. C. Brown, P. Cirrone, M. A. Cortés - Giraldo, D. Cutajar, G. Cuttone, L. Desorgher, P. Dondero, A. Dotti, B. Faddegon, C. Fedon, S. Guatelli, S. Incerti, V. Ivanchenko, D. Konstantinov, I. Kyriakou, G. Latyshev, A. Le, C. Mancini - Terracciano, M. Maire, A. Mantero, M. Novak, C. Omachi, L. Pandola, A. Perales, Y. Perrot, G. Petringa, J. M. Quesada, J. Ramos - Méndez, F. Romano, A. B. Rosenfeld, L. G. Sarmiento, D. Sakata, T. Sasaki, I. Sechopoulos, E. C. Simpson, T. Toshito, D. H. Wright,  
“Report on G4 - Med, a Geant4 benchmarking system for medical physics applications developed by the Geant4 Medical Simulation Benchmarking Group”, Medical Physics 48(1) 19-56, 2021.1
- Miyamori, Yuta; Suzuki, Jiro; Aoyama, Yoshitaka; Mihira, Tomohiro; Matsushita, Yushu; Takano, Atsushi  
“Triply Helical Giant Domain with Homochirality in a Terpolymer Blend System”, ACS MACRO LETTERS vol=10(7) page=978-983 year=2021.

- Jiro Suzuki, Makoto Suzuki, Atsushi Takano and Yushu Matsushita, “Cylindrical Super-Lattice Structures with Three-Contrasts from Pentablock Binary Blends Studied by Monte Carlo Simulation”, *Macromolecular Theory and Simulations* vol=30, page=2100015 year=(2021). <https://doi.org/10.1002/mats.202100015>
- Q. D. Zhou , S. Yamada , P. Robbe, D. Charlet, R. Itoh, M. Nakao, S. Y. Suzuki, T. Kunigo, E. Jules, E. Plaige, M. Taurigna, H. Purwar , et. al. “PCI-Express Based High-Speed Readout for the Belle II DAQ Upgrade”, *IEEE TRANSACTIONS ON NUCLEAR SCIENCE*, VOL. 68, NO. 8, AUGUST 2021
- H. Shishido, T. D. Vu, K. Aizawa, K. M. Kojima, T. Koyama, K. Oikawa, M. Harada, T. Oku, K. Soyama, S. Miyajima, M. Hidaka, S. Y. Suzuki, M. M. Tanaka, S. Kawamata, T. Ishida, “High Spatial Resolution Neutron Transmission Imaging Using a Superconducting Two-Dimensional Detector”, *IEEE Transactions on Applied Superconductivity*, 31, 2400505 (2021).
- Javier Aparisi, Juan Fuster, Adrián Irles, Germán Rodrigo, Marcel Vos, Hitoshi Yamamoto, André Hoang, Christopher Lepenik, Michael Spira, Seidai Tairafune, and Ryo Yonamine, “ $m_b$  at  $m_H$ : The Running Bottom Quark Mass and the Higgs Boson”, [10.1103/PhysRevLett.128.122001](https://arxiv.org/abs/10.1103/PhysRevLett.128.122001)
- M. Arimoto et al. (53 authors including Hideo Matsufuru), Gravitational wave physics and astronomy in the nascent era, *Prog. Theor. and Exp. Phys.* 2021, ptab042 (83 pages), DOI: 10.1093/ptep/ptab042

### 15.1.2 査読なし

## 15.2 Proceedings

### 15.2.1 査読有り

- Issaku Kanamori, Ken-Ichi Ishikawa, Hideo Matsufuru, “Object-oriented implementation of algebraic multi-grid solver for lattice QCD on SIMD architectures and GPU clusters”, *Lecture Notes in Computer Science* book series 12953, pp 218–233, Proceedings of 21st International Conference



on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2021),  
DOI:10.1007/978-3-030-86976-2\_15

- Y. Akahoshi, S. Aoki, T. Aoyama, I. Kanamori, K. Kanaya, H. Matsufuru, Y. Namekawa, H. Nemura, Y. Taniguchi (Bridge++ Project), “General purpose lattice QCD code set Bridge++ 2.0 for high performance computing”, J.Phys.Conf.Ser. 2207 (2022) 1, 012053, Proceedings of 32nd IUPAP Conference on Computational Physics (CCP 2021), DOI:10.1088/1742-6596/2207/1/012053

#### 15.2.2 査読なし

### 15.3 KEK 出版物

- Activity Report 2020 Computing Research Center, KEK Progress Report 2021-9, January 2022 D

### 15.4 その他

特になし

## 16. 会議発表

### 16.1 国際会議

- Tomoe Kishimoto, Masahiro Morinaga, Masahiko Saito, Junichi Tanaka, “Application of transfer learning to event classification in collider physics”, International Symposium on Grids & Clouds (ISGC) 2022 Virtual Conference, 21-25 March 2022, Academia Sinica, 145 名参加
- Tomoaki Nakamura, Sari Kaneko, Takashi Sasaki, “KEK Grid CAGeneral Report”, APGridPMA meeting at APAN52, 2021.8.5, Virtual
- T. Nakamura, G. Iwai, K. Murakami, T. Sasaki, S. Suzuki, “KEK site report”, HEPiX Autumn 2021 online Workshop, 2021.10.26, Virtual
- Tomoaki Nakamura on behalf of the operation team, “KEK Grid CA Report - self audit”, APGridPMA meeting at ISGC2022, 2022.03.24, Virtual
- Akihiro Shibata, Seikou Kato and Kei-Ichi Kondo, “Magnetic monopole dominance for the Wilson loops in higher representations”, The 38th International Symposium on Lattice Field Theory (LATTICE2021), 2021.7.26-30, Zoom/Gather@Massachusetts Institute of Technology
- Akihiro Shibata, “Lattice Study of confinement mechanism based on the dual superconductivity”, 13th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences (CCS International Symposium 2021), 2021.10.8 online
- Hideo Matsufuru for Bridge++ project, Dattice QCD code set Bridge++ 2.0 and its performance tuning on Fugaku, Dhe 4th R-CCS International Symposium, February 7-8, 2022 (online), Doster (short talk)

### 16.2 国内会議

- 鈴木 次郎, 鈴木 真琴, 高野 敦志, 松下 裕秀,  
“ペンタブロック共重合体のバイナリブレンドによる二次元超格子構造”  
2021 年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会合同討論会、2021.12.8-9、オンライン開催、参加者数 100 人規模
- 一井 信吾  
“KEK サイトレポート”、共同利用期間における Security Work Shop 2021、核融合科学研究所主催 virtual 開催、2021.12.9

- 鈴木 聡  
“open LDAP と back\_sql”、共同利用期間における Security Work Shop 2021、  
核融合科学研究所主催 virtual 開催、2021.12.9

### 16.3 その他 広報等

特になし

## 17. 会議出席（招待、座長等）

### 17.1 国際会議（招待・座長）

- H.Matsufuru, F.Yuasa, (workshop chair)  
International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2021), Workshop on Large Scale Computational Science, Univ. Cagliari, Italy, 2021.9.13-16 (hybrid) <https://2021.iccsa.org/>
- T.Nakamura (session chair)  
HEPiX Autumn 2021 online Workshop, 2021.9.25-29, online
- T.Nakamura (session chair)  
International Symposium on Grids & Clouds (ISGC) 2022, 2022.3.21-25, online

### 17.2 国内会議（招待・座長）

なし

## 18. 会議開催

### 18.1 国際会議開催

#### 18.1.1 開催（主催者）

なし

#### 18.2.1 組織委員会委員等

- T.Nakamura (International Convener)  
Asian Forum for Accelerators and Detectors 2021, 2021.3.16-18, online (BINP)
- T.Nakamura (Program Committee)  
International Symposium on Grids & Clouds 2021, 2021.3.22-26, online (ASGC)
- S.Ichii (Program committee and reviewer)
  - ・ The 35th International Conference on Information Networking (ICOIN 2021)
  - ・ 2021 Twelfth International Conference on Ubiquitous and Future

Networks (ICUFN2021)

- ・ International Conference on Artificial Intelligence in Information and Communication (ICAIIIC 2021)

## 18.2 国内会議開催

### 18.2.1 開催（主催者）

- Exa スケールストレージ研究会 第1回会合  
2021.12.2、オンライン、20名、<https://kds.kek.jp/event/40307/>  
大規模ストレージに関する技術動向、システム運用に関する技術情報交換

### 18.2.2 組織委員会委員等

- 松古 栄夫（世話人）  
高性能計算物理勉強会（HPC-Phys: <http://hpc-phys.kek.jp/>)  
第11回 勉強会：2021.6.10-11 online  
第12回 勉強会：2021.8.26 online  
第13回 勉強会：2021.11.25 online  
第14回 勉強会：2022.2.4 online
- 中村 智昭（世話人）  
粒子物理コンピューティング懇談会、2021.9.16, online  
粒子物理コンピューティング懇談会、2022.3.18, online
- 一井 信吾  
情報処理学会 2021年度第3回(IOT 通算第55回)インターネットと運用技術研究会、2021.9.6 オンライン開催 座長  
第14回情報処理学会インターネットと運用技術シンポジウム (IOTS 2021)  
2021.11.25～26 オンライン開催 プログラム委員  
情報処理学会 2021年度第4回(IOT 通算第56回)インターネットと運用技術研究会、2022.3.7～8 ハイブリッド開催（京都大学+Zoom） 座長

## 18.3 講習会等開催

### 18.3.1 機構外対象

なし

### 18.3.2 機構内対象

- 一井 信吾
  - ・ 高エネルギー加速器研究機構 DMZ ユーザー会 2021.12.23, 2022.1.12
- 中村 貞次、橋本 清治、高瀬 亘、前田 裕文、大森 このみ

- ・ 高エネルギー加速器研究機構 技術職員初任者研修 2021.5.26

## 18.4 その他

### 18.4.1 展示等

- Super Computer 2021、KEK 展示ブース、Virtual Exhibits  
<https://sc21.supercomputing.org/>