

# Activity Report 2022

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 講習会の開催 .....	3
1.3 Geant4 による ARM 系 CPU の性能評価 .....	3
1.4 MPEXS の開発 .....	8
1.5 MPEXS-DNA による FLASH-RT シミュレーション .....	8
2. 素粒子理論における高次補正計算 .....	11
2.1 はじめに .....	11
2.2 複素質量 1 ループ積分 .....	11
2.3 数値計算関連の研究 .....	12
3. 格子ゲージ理論シミュレーション .....	13
3.1 格子ゲージ理論の大規模シミュレーション .....	13
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 .....	14
4. 中性子用オブジェクト指向データ解析システム .....	16
4.1 データ解析フレームワーク “Manyo Library” の研究開発 .....	16
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 .....	16
5. 統計的手法の物理解析への応用とシミュレーション .....	18
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 .....	20
7. データ収集システム .....	22
7.1 Belle2 データ収集システムから KEKCC へのファイル転送方式の改善検討 .....	22
8. 深層学習による計算機資源の効率的活用 .....	24

8.1	はじめに .....	24
8.2	研究の目的とこれまでの活動 .....	24
8.3	GNN と深層学習モデル概要 .....	24
8.4	Parallel Workload Archive と実験結果 .....	26



第 I 部  
研究活動



# 1. Geant4

佐々木 節、尼子 勝哉、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で開催している。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 v11.1 のリリースと 3 件のマイナーパッチを公開した。

## 1.2 講習会の開催

ユーザサポート活動として、研究会や講習会を定期的で開催している。コロナ禍で対面での講習会の開催を延期してきたが、3 年ぶりに対面での開催を再開した。2022 年12 月 14 から 16 日にかけて九州大学・西新プラザにて、Geant4 初心者講習会を開催した。今回は、九州大学先端素粒子物理研究センター、高エネルギー加速器研究機構加速器科学総合育成事業、日本学術振興会研究拠点事業「ミュオン素粒子物理学の国際拠点形成」に会場提供や会議運営の協力をいただいた。高エネルギー・原子核実験、宇宙関連の大学院生や企業の研究者、43 名が参加した。[<https://wiki.kek.jp/x/TQIZDg>]

## 1.3 Geant4 による ARM 系 CPU の性能評価

HEP 実験においては、Geant4 を使ったモンテカルロ・シミュレーションなどで、非常に多くの CPU 資源を使用している。その一方で不安定な世界情勢に起因して、電気代の高騰や脱炭素化社会の実現に向けた課題を抱え、CPU に対しては演算能力だけでなく高い電力性能を有することも必要となってきた。

ARM アーキテクチャはスマートフォンやタブレット端末、組み込み系デバイスなどの省電力が求められる分野において幅広く利用されている。近年、パーソナルコンピュータやデータセンターの用途でも、x86 系と同等以上の演算/電力性能をもった ARM 系 CPU も登

場してきている。そこで、Geant4 を使って幾つかの ARM 系 CPU の性能評価を行った。

### 1.3.1 ベンチマーク

ベンチマーク環境については、x86 系と ARM 系それぞれ 3 種類の CPU を搭載する計 6 つの環境を用意した。x86 系は Intel の Core-i9 (13 世代) と Xeon (Icelake 世代)、AMD EPYC (Milan 世代)の 3 つ、また、ARM 系は Apple の M1/M2 と富士通の A64FX の 3 つである。各ベンチマーク環境の CPU、OS、コンパイラを表 1 に示す。

CPU	Intel Core i9-13900K	Intel Xeon Gold 6326 (Ice Lake)	AMD EPYC 7313P (Milan)	Apple M2 Pro	Apple M1	A64FX
Architecture	x86	x86	x86	ARM	ARM	ARM
# of cores	P-core: 8 E-core: 16	32 cores (=16 x 2CPUs)	16 cores	P-core: 8 E-core: 4	P-core: 4 E-core: 4	48 cores
Max Clock Frequency	5.8 GHz	3.5 GHz	3.7 GHz	unknown	unknown	2.2 GHz
Memory	125 GiB	503 GiB	62 GiB	32 GB	16 GB	31 GiB
OS	Ubuntu 22.04 LTS	Alma Linux 9.2	Alma Linux 9.2	mac OS 13.5 Ventura	mac OS 13.5 Ventura	Cent OS 8.1
Compiler	GCC 11.4.0	GCC 11.3.1	GCC 11.3.1	Apple Clang 14.0.3	Apple Clang 14.0.3	GCC 8.5 / Fujitsu Compiler

表 1 ベンチマーク環境 (CPU、OS、コンパイラ)

表中の P-core は高性能コア、E-core は高効率コアを示す。

ベンチマークに利用する Geant4 のアプリケーションは次に示す 2 つを用意した。これらは Geant4 ver. 10.7 patch-4 で実行した。

- 電磁シャワー・シミュレーション
  - 初期粒子: 運動エネルギー 1 GeV の電子
- マイクロドジメトリ・シミュレーション (Geant4-DNA)
  - 初期粒子: 運動エネルギー 750 keV の電子
  - 水の放射性分解で生成する活性種の拡散・化学反応をシミュレート

### 1.3.2 ベンチマーク結果

各 CPU の演算性能は EPS スコアで評価した。EPS スコアの定義は下記の通りである。

- 電磁シャワー・シミュレーションの場合： 1 秒間あたりの処理イベント数
- マイクロドジメトリ・シミュレーションの場合： 1 分間あたりの処理イベント数

#### 1.3.2.1 シングルスレッドの性能評価

図 1 は電磁シャワー・シミュレーションにおける各 CPU のシングルスレッド性能を示す。検証に用意した 6 つの CPU のうち Intel Core-i9 が最も演算性能が高い。ターボブースト時のクロック周波数は 5.8GHz に達し、EPS スコアは Intel Xeon や AMD EPYC の 2

倍以上である。次点で Apple の M1/M2 であり、Xeon や EPYC の 1.5 倍以上の演算処理速度を有する結果となった。富士通の A64FX については、OS に付属する GCC コンパイラと富士通コンパイラのそれぞれで Geant4 をビルドしてベンチマークを実施した。いずれの場合においても A64FX の演算性能は Xeon の 1/7 程度であった。

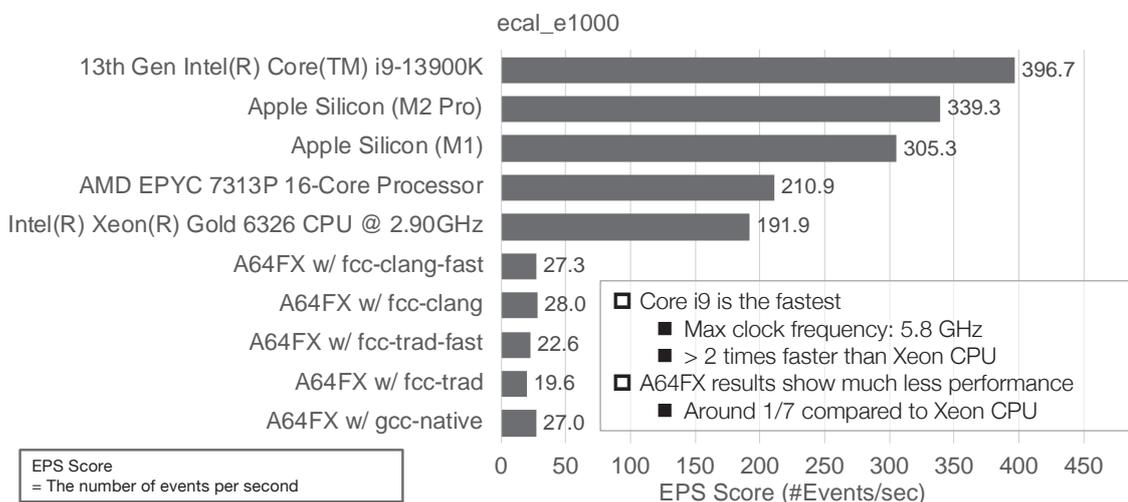


図1: 各CPUのシングルスレッド性能 (電磁シャワー・シミュレーション)

図2はマイクロドジメトリ・シミュレーションにおけるシングルスレッド性能を示す。電磁シャワー・シミュレーションと同様の傾向を示す。A64FXについては、富士通コンパイラで最適化オプションを課した場合において他の A64FX のケースと比較して 2 倍弱パフォーマンスが向上している。Geant4-DNA の化学過程では多重ループ処理が最も計算コストが高く、ここが最適化されて演算速度が上がったのではないかと推察する。

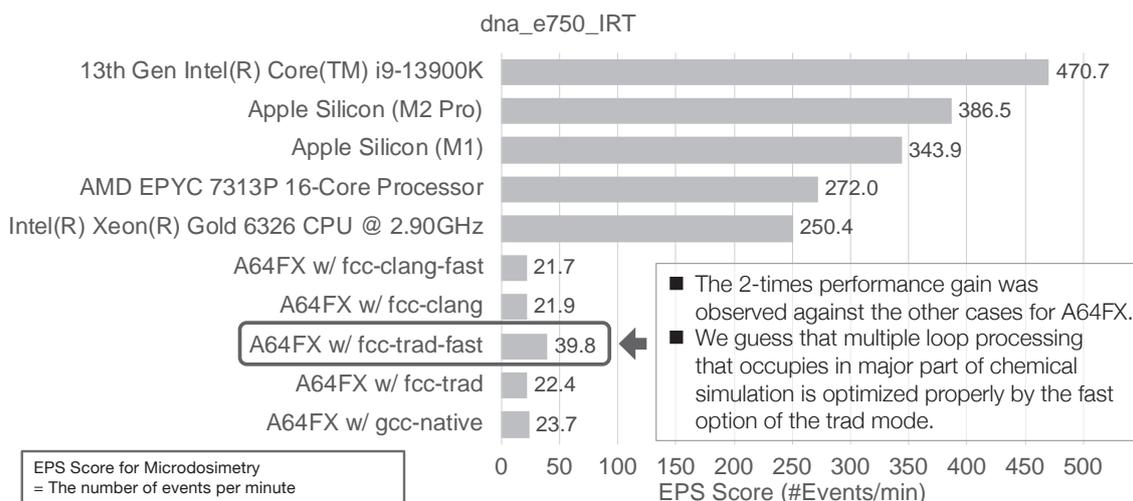


図2: 各CPUのシングルスレッド性能 (マイクロドジメトリ・シミュレーション)

### 1.3.2.2 マルチスレッドの性能評価

図3と図4は各アプリケーションでのマルチスレッド性能を示す。スレッド数に応じて演算性能は直線的にスケールしている。物理コアの範囲内においては Intel Core-9 が最も演算性能が高い。Apple M1/M2 も Xeon や EPYC よりも高い性能を示している。尚、Core-i9 と M1/M2 において、物理コアの範囲内で分布の傾きが途中で変化しているのは、高性能コアと高効率コアの二種類の演算コアが搭載されているためである。

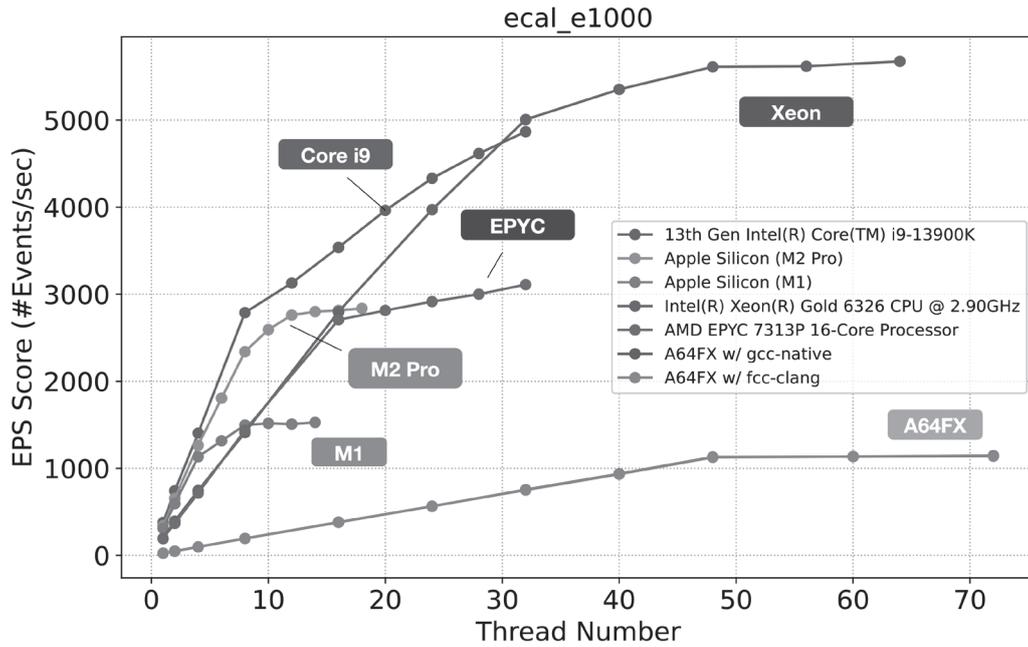


図3: 各CPUのマルチスレッド性能 (電磁シャワー・シミュレーション)

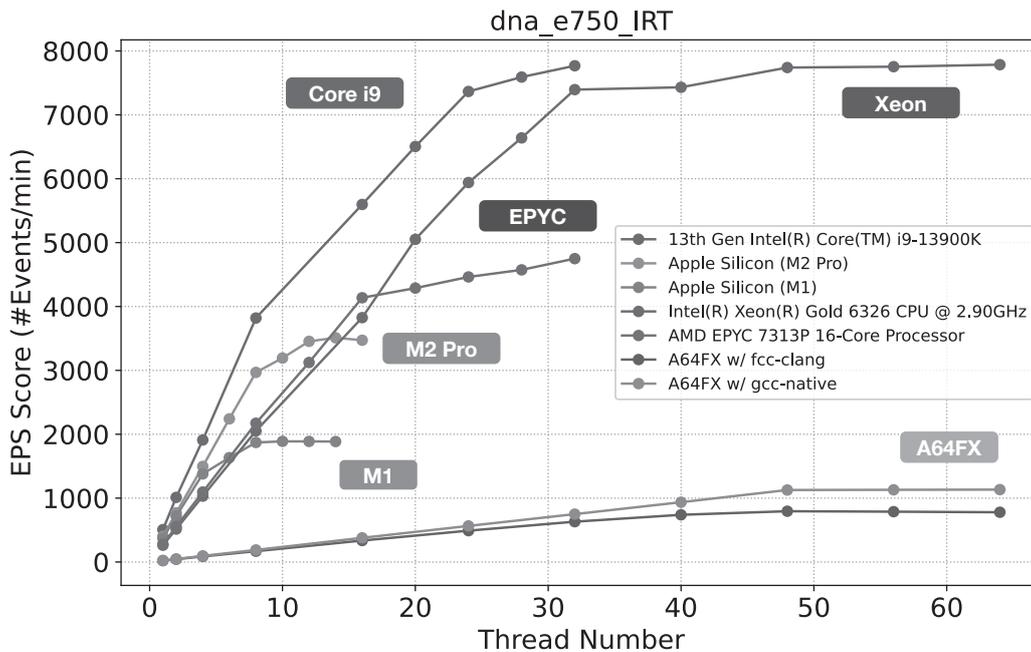


図4: 各CPUのマルチスレッド性能 (マイクロドジメトリ・シミュレーション)

### 1.3.2.3 電力性能測定の結果

電磁シャワー・シミュレーションにおいて、A64FXを除いた5つのCPU<sup>1</sup>の電力性能を評価した<sup>2</sup>。図5は各CPUの消費電力とEPSスコアの相関図である。分布の傾きが大きいほど、省電力で高い演算性能を示すことを意味する。

Core-i9とM2に注目して両者の電力性能を比較する。まず、電力を50Wに固定の下それぞれのEPSスコアを比較すると、M2の方がCore-i9よりも5倍の演算性能が出ている。更にEPSスコアを2,500で固定して両者の消費電力を比較すると、M2はCore-i9の26%の電力しか使っていないことがわかる。Core-i9の演算性能は、ベンチマークで使用したCPUの中で最も高いことは前述の通りである。しかし、それと同時に消費電力も大きい。電力性能の観点で評価すると、M1/M2は優れたCPUであることがわかった。

一方、Intel XeonとAMD EPYCは、シングルスレッドおよびマルチスレッドの性能評価において大差はなかった。しかし、電力性能で比較すると、EPYCの方がXeonよりも2倍ほど電力性能が優れていることを確認した。

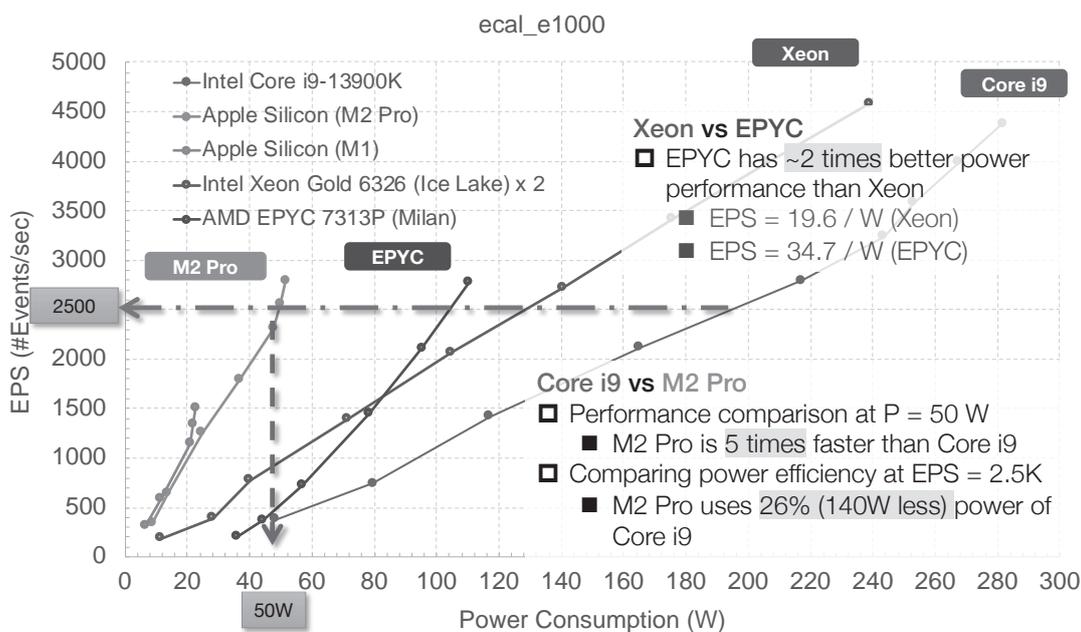


図5: 各CPUの電力性能の評価 (電磁シャワー・シミュレーション)

<sup>1</sup> 使用したワットメータが消費電力100Wのデバイスのみの対応でA64FXを搭載したFX700(消費電力:200W)は測定不可であり、除外した。

<sup>2</sup> 実際はマザーボードやファンなどの消費電力を切り離すことができずに混在しているので、厳密にはCPUだけの消費電力を評価しているのではない。

## 1.4 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ている。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。村上が、「次世代放射線治療のための超並列放射線輸送アルゴリズムの高度化」の課題で、2022 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。

## 1.5 MPEXS-DNA による FLASH-RT シミュレーション

近年、放射線治療分野においては、高線量率短時間照射 (FLASH) が注目されている。FLASH は、40Gy/s 以上の非常に高い線量率の放射線 (従来の放射線治療の線量率は 0.03Gy/s 以下) をパルス状で患部に照射するものである。FLASH の特徴は、がん細胞への殺傷能力を保持したまま正常細胞への放射線影響を顕著に抑制することである。実はこのような現象は 1960-70 年代に行われた動物実験などで既に確認されていた。しかし、当時の放射線治療機器では実現不可能と考えられて、研究は一時下火になっていた。FLASH の機序については、正常細胞内の酸素濃度が瞬間的に著しく低減し、損傷した DNA が酸素により損傷を固定化されず修復しやすくなることが示唆されている。その他にも DNA 損傷を引き起こす OH ラジカル同士の再結合が活性化してその数が低減し、DNA 損傷率が下がるという仮説もあるが、明確に理解されているわけではない。モンテカルロ法で FLASH 効果をシミュレートしてその機序に迫る試みも行われている。しかし、前述の通り FLASH は一度に大量の放射線を照射するため、これをモンテカルロ・シミュレーションするにも追跡すべき荷電粒子や活性種の数が増大となり計算時間の長大化は避けられない。

MPEXS-DNA は、GPU による超並列計算により細胞核内部で生じる荷電粒子の物理反応や活性種の拡散・化学反応を高速にシミュレートできる。2021 年度から、科研費・基盤研究(C)「超並列計算による高線量率短時間照射(FLASH)効果の数理モデルの構築」が採択された。FLASH による水の放射性分解の反応を素過程レベルで追跡できるよう MPEXS-DNA の機能拡張を行った。例えば、従前は一度にひとつの初期粒子しかターゲットに撃つことができなかったが、それを所定の線量に達するまで繰り返し初期粒子を撃てるようにした。また、溶存する分子種との化学反応を扱えるように新たなモデルを実装した。

FLASH に相当する線量率で荷電粒子を照射して活性種の G 値<sup>3</sup>の時間推移を計算した。

---

<sup>3</sup> 100 eV のエネルギー損失で生成される活性種の個数。

その一例を示す。照射粒子は運動エネルギー55MeVの陽子とし、水ファントムへの照射総線量を30 mGyに固定。線量率が0.02 Gy/sから500Gy/sとなるようにパルス幅を調整した。パルス数は1とし、この間に照射線量が30mGyに達するまで陽子線をファントムに繰り返し照射する。図6と図7はそれぞれOHラジカルとH2O2分子のG値の時間推移である。線量率の上昇に伴い、パルス照射時において前の時間に照射された陽子の反応で生じた活性種が拡散しきる前に次の陽子照射で新たに活性種が生じ、化学反応が活性化される。実際に、OHラジカルは自身の再結合( $\cdot\text{OH} + \cdot\text{OH} \rightarrow \text{H}_2\text{O}_2$ )が活発となりG値はある時点を超えて著しく減少し(図6)、逆にH2O2分子は増加する(図7)。この傾向は、既刊のFLASHに関するモンテカルロ・シミュレーションの結果と一致している。

本研究は量子科学技術研究開発機構との共同研究であり、共同研究者がサイクロトロンを使用してFLASHの実験的研究を行っている。MPEXS-DNAのシミュレーション結果が実測結果を再現するものか検証を行っていく。

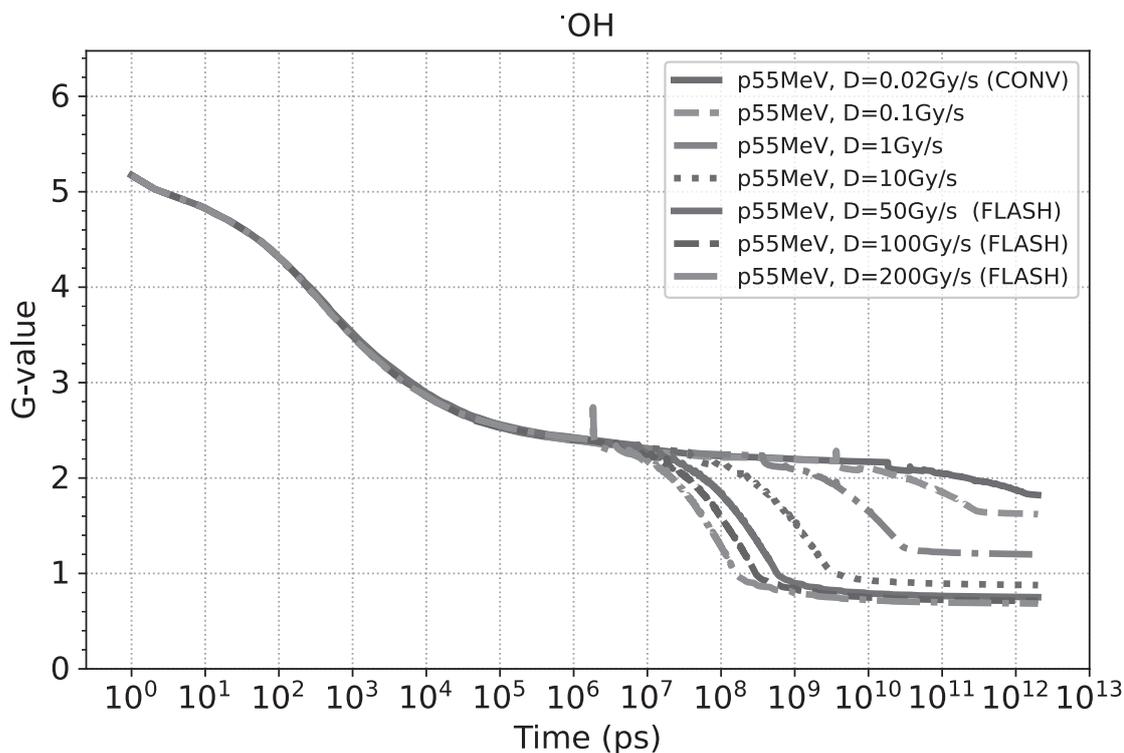


図6: OHラジカルのG値の時間推移 (MPEXS-DNAシミュレーション)

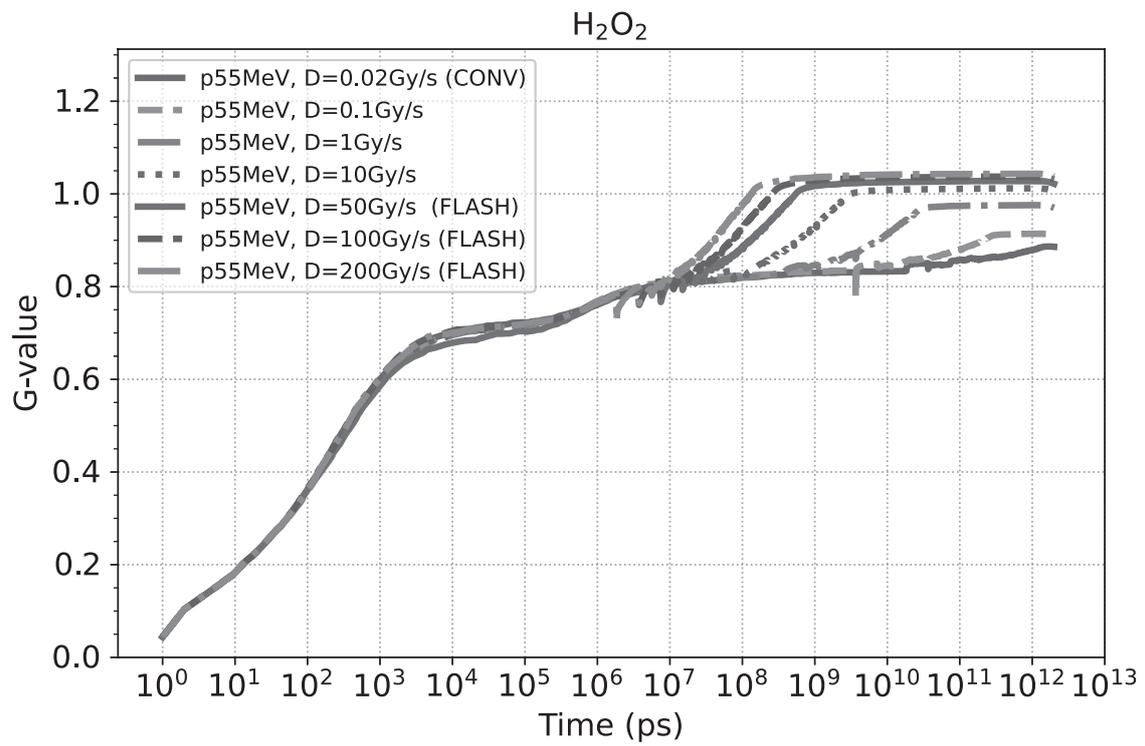


図 7: H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 分子の G 値の時間推移 (MPEXS-DNA シミュレーション)

## 2. 素粒子理論における高次補正計算

石川 正、金子 敏明、湯浅 富久子

### 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た。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、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。

2022 年度は、日本物理学会にて湯浅富久子 (KEK 名誉教授) が「数値的手法を活用した電弱理論の 2 ループ補正計算」「ファインマン積分の数値計算法: DCM による電弱高次補正計算 IV」というタイトルで報告を行った。また以下の論文を 1 つ発表した。

これらの研究では、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。

[1] Numerical Regularization for 4-loop Self-Energy Feynman Diagrams,

E de Doncker, F Yuasa, T Ishikawa

Journal of Physics: Conference Series 2438(012147) 1-6 2023 年 2 月 (査読あり)

## 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。

2022 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。特に近年の高性能計算機アーキテクチャに対応した最適化コードを組み込むことは、実際の研究で利用するために不可欠であり、これまでデザインの検討とコード開発を続けてきたが、2023 年 3 月に Ver.2.0 として公開に至った。これは線形方程式ソルバーなど計算負荷の高い部分

を最適化コードで置き換えるものであり、既存コードや他の最適化コードとの併用が可能である。2022 年度末現在の最新版 Ver.2.0.0 では、スーパーコンピュータ富岳のために開発された A64FX アーキテクチャ向けの最適化コードを組み込んでいる。GPU 向けコードや Intel AVX-512 向けコードについても公開に向けた開発作業を進めている。また大規模線形方程式の高速解法であるマルチグリッド法の開発を行っている。

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。2022 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。本プロジェクトは早稲田大学の山田章一氏、沼津高専の住吉光介氏らを中心とする共同研究である。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、理研のスーパーコンピュータ富岳、東大情報基盤センターの Wisteria 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た。またベクトル計算機である KEK の NEC SX-Aurora TSUBASA 向け最適化も進めた。

### 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。2022 年度は計 4 回の勉強会を開催し、そのうち 2 回はオンライン、2 回はオンライン+オンサイトでいった。

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

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

JLDG は計算素粒子物理学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/>

#### 5. International Lattice Data Grid (ILDG)

ILDG は Lattice QCD のためのインフラストラクチャーとして Data Grid を整備する国際的な活動であり、地域グリッドを構成メンバーとして ILDG board と 2 つのワーキンググループ (Metadata WG, Middleware WG) を中心とした開発研究を行っている。JLDG も地域グリッドの一つであり、ILDG board および WG へも JLDG チームのメンバーが参加している。松古は Metadata WG のメンバーとして、XML によるメタデータ記述の規約 QCDml (QCD markup language)や配位データフォーマットの改訂に向けての議論や、Hands-on ワークショップなどの広報活動に参加し、Web ベースでメタデータを作成するためのソフトウェアの開発などを行っている。

ILDG サイト : <https://hpc.desy.de/ildg/>

## 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与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 東海のメンバーらとともに 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 の開発を通じて MLF の要望を提案するとともに、国際規格の策定と拡がりにも貢献をしている。

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して稼働している。一方で Manyo-Lib は 2003 年より研究開発がされているが、2022 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マイクロ相分離構造の考察を行った。

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。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]。

一方で、ブレンドを行わないABCBD型において、両端のAとDが同じ長さとし、さらに2つのBが同じ長さになるように設定をした中心対称な形のペンタブロック共重合体について詳細な検討を行った。その結果、3次元周期的極小曲面の一種であるSchoen's Gyroidを骨格としたホモキラルな構造を持つことが明らかになった[2]。この構造は“Macromolecular Theory and Simulations”の表紙に採用され、さらに共通基盤研究施設のWebにおいてハイライトとして紹介された[3]。

[1] ペンタブロック共重合体ブレンドによる二次元超格子構造の構築、第71回高分子討論会(北海道大学、2022.09.07)

[2] "Helical Microdomains with Homochirality Trapped in a Gyroid Network from Symmetric AB1CB2D Pentablock Quaterpolymer Melt Studied by Monte Carlo Simulation"

Jiro Suzuki, Atsushi Takano and Yushu Matsushita, Macromolecular Theory and Simulations

vol=31, page=2200015, year=2022, <https://doi.org/10.1002/mats.202200015>

[3] <https://www2.kek.jp/ar/hight/20220929/index.html>

## 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には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り、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なう。また、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ため、シミュレーションのアルゴリズム、特に、確率過程サンプル法を検討する。本年度は昨年度から引き続き、拘束条件付き確率過程サンプル法とその応用研究を行った。

### 拘束条件付き確率過程サンプル法

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、その際、方程式の中には拘束条件式がしばしば付加される。この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、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。

拘束条件付き確率過程サンプル法は、高次元空間に拘束条件として埋め込まれた拘束面（陰関数曲面）上でのシミュレーション・ランダムワークによってサンプリングする方法である。本研究では、ランジュバン方程式に基づく「拘束条件付きランジュバン法」と高速条件付きハミルトンシステムに基づく「拘束条件付き HMC 法」の 2 種類のアルゴリズムについてする。

### 高エネルギー粒子衝突実験における素粒子の反応過程への応用：

高エネルギー粒子衝突実験では、電子・陽電子を高エネルギーで衝突させて、弾性散乱のほか、終状態として初期状態と異なる多数の粒子が生成する素粒子の反応過程を研究する。終状態の出現確率は微分散乱断面積によって与えられ、その反応過程（散乱断面積）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される。ここでは、反応過程の新しいシミュレーションの方法として、確率過程サンプル法（ランジュバン法と呼ぶ）の適用する。

図 1 は、素粒子反応過程のファイマンダイアグラムの例である。電子陽電子が対消滅して  $\mu$  粒子が対生成する様子を表している。拘束条件は、始状態と終状態の間のエネルギー・運動量の保存則として付加される。拘束面上をランダムウォークによって、拘束面上の一様サンプルが実現される。

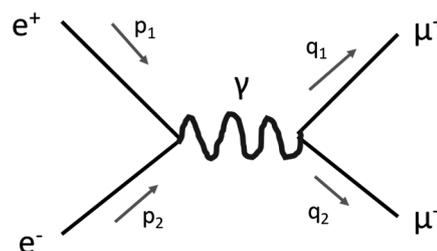


図 1 素粒子の反応過程の例

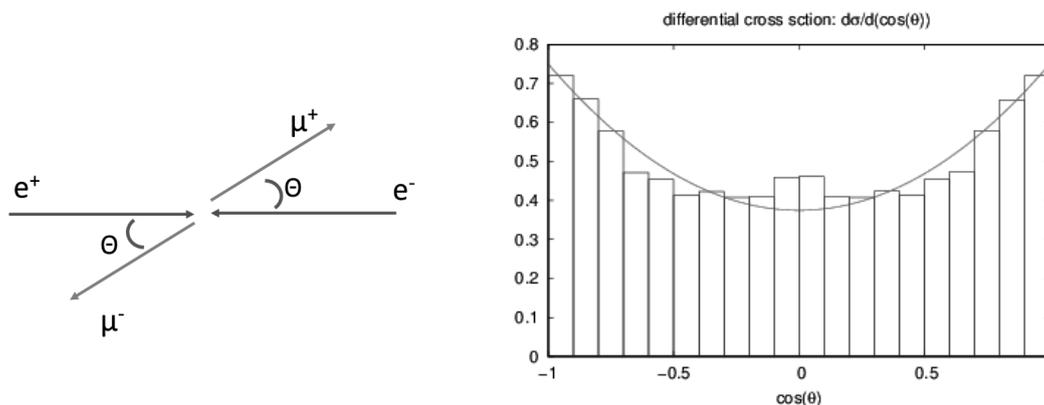


図 2 散乱確率密度関数（微分散乱断面積）

（論文[1]では、一様サンプルの性質を用いて、点レンダリングによる可視化を行った。）終状態の出現確率は、ランジュバン法では確率微分方程式にドリフト項（ポテンシャル力の項）を導入することで実現される。すなわち、終状態の出現確率に応じたポテンシャルを導入することで、ランダムウォークのトラジェクトリーが変化（陰関数面上の滞在確率が変化）して、終状態の出現確率に重みづけられたサンプリングが実現される。

図 2 は、図 1 の反応課程に対してシミュレーションを行った結果である。微分断面積を概ね再現できた。しかしながら、終状態の出現確率は微分方程式のローカルな情報に基づくため、精密な大域的な重みづけを再現することには一定の困難を伴うが、この改善は今後の課題である。

### 格子ゲージ理論に基づく数値シミュレーションへの応用：

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ある。本研究では、HMC 法を拘束条件付きの系に拡張し、ゲージ不変な質量項を有する Yang-Mills 理論格子ゲージ理論のシミュレーションに対して適用する [2]。

本年度は、拘束条件付きのシミュレーションの基礎となる格子上のゲージ非依存（ゲージ不変）なゲージ・随伴スカラーモデルのシミュレーションもコードを作成してテストを行うとともに、拘束条件付きシミュレーションを実装するためのアルゴリズムの検討を行った。

### 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 Fournal Vol.20 (2001) p.359-367
- [2] 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。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。2022 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, Suiren Blue システムは、冷媒の供給が困難になったため、2023 年 3 月末をもって運用を終了した。

これまで Suiren システムを利用して行った研究活動については、KEK Annual Report 2022 のハイライト記事として報告される予定である。

### 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特定し、デバイス上のメニーコアで多重並列実行することによって高速化される。このようなヘテロジニアスな計算を行うためには、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を記述する。

2022 年度においては、これまで **Suiren2**, **Suren Blue** システムを利用して行ってきた、以下のような課題について引き続き研究開発を行った。

#### (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) を実行する研究を進めた。

#### (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については、既に PEZY-SC プロセッサへコードを移植し、最適化と性能評価などを行った。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た。

#### (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および多次元系で、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、ブロック密行列の逆行列の解法、Boltzmann 方程式の衝突項の計算について PEZY-SC 用コードを開発し、最適化と性能評価を行った。このコードに対しても、(2) で述べたコードジェネレータの適用を目指して開発を行った。

## 7. データ収集システム

鈴木 聡

Belle2, T2K 実験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 Belle2 データ収集システムから KEKCC へのファイル転送方式の改善検討

2022 年度中盤からは Belle2 実験が長期シャットダウンに入り、様々な改修が行われた。

従来、Belle2 データ収集システムから KEKCC へのデータ転送には、パッケージの依存関係が小さく、設定等の運用コストが低いことから `rsync` (ssh なし) を使用してきた。しかし、`rsync` は二重チェックサム計算によって CPU が律速点となり 10Gbps を達成することが出来ない。また、対象となるディレクトリ階層が広い場合、転送中にもディレクトリの全探索が行われてしまうためディスクキャッシュを圧迫してしまう。CPU コアが多いからといって多数の `rsync` を同時に走らせるとシークによってディスク I/O の性能も劣化するため、2~3 個程度に抑えなくてはならず、ディスク・ネットワークの性能を十分に活用できていなかった。

オンラインでファイルが生成された後、可能な限り早く KEKCC 上にファイルをコピーし、フォーマット変換等を適用するため、`rsync` に代えて XRootD への移行を検討した。XRootD は RHEL 系統の OS では標準レポジトリでバイナリパッケージが提供されており、依存関係が小さいからである。機能が限定されており、深刻なセキュリティ脆弱性が出にくいことも選定理由の一つである。Belle2 実験のデータ収集システムは多段のプライベートネットワークで基盤ネットワークから隔離されている上、オンラインストレージは多数のアドレスを持っているため XRootD が正しくサービス用 IP アドレスを決定することが出来ない。そのため、Linux の Network Namespace 機能を使用して KEKCC へのデータ転送用のネットワークを隔離し、`systemd` からはその Namespace 中に `xrootd` を起動するという方法でこの問題を対処した。XRootD によって KEKCC へのデータ転送は 2GB のデータファイルに対して 700MB/s~1GB/s 程度まで改善した。なお、RedHat Enterprise Linux の 8 系列では `rsync` が更新され、ブロックチェックサムを 1 種類しか実施しないオプションが利用可能となり、XRootD の速度には及ばないものの CPU 負荷が低減でき次善策としては引き続き利用可能である。

GRID 資源ではかつて主流だった `gsiftp` のサポートが打ち切れ、長距離データ転送も `http` ベースのものに移行している。XRootD も直接 `http` でのデータ転送が可能なので、有効にしてあるが現時点では速度の性能差は特に見えていない。

さらにオンラインストレージ側でのファイルの生成方式が大きく変更され、従来はラン中には1個のプロセスがファイルを高速に書き出しつつ2GBもしくは8GB単位でファイルを切り替えていく方式であったところ、多数のプロセスが並列処理しつつそれぞれが一時ファイルを1つずつ生成することとなった。検出器からダミーデータを流して試験してみたところ、生成されたファイルの試験中に転送性能が20MB/s~200MB/s程度に低下していることが判明した。読み出すだけファイルの転送を行わなくても性能が低いことが判明し、多数のファイルが同時に成長していくためファイルシステムの断片化が激しくなっていたことが原因と判明した。新しい方式のテストランで生成されたファイルは1つあたり5.4GBのサイズが10MB毎のフラグメントに分散しており、1ファイルが520~540個にも断片化していた。XFSに対して同様のI/O条件でファイルを並列生成すると15~17個程度の断片化で済み、元々の速度とほとんど変わらない性能を得ることが出来た。

Belle2 実験のオンラインストレージは長年の実績により ext4 でフォーマットしていたが、この問題を解決するため XFS へと移行した。XFS でも並列度が上がると症状が悪化することが想像されるため、実際にはフォーマットする際に RAID 構成と CPU コア数を勘案する必要がある。

## 8. 深層学習による計算機資源の効率的活用

岸本 巴、中村 智昭

### 8.1 はじめに

近年、様々な分野において機械学習が応用されて注目を集めている。特に、深層学習は膨大なパラメーター空間による表現能力の高さから、とても強力な技術となっている。しかし、高い表現力の反面、大量の学習データが必要になるという問題がある。一般に、学習データの収集はコストが高いため、ドメイン知識を用いるなど、限定的な学習データでも効率的に学習できるような深層学習モデルを設計する必要がある。本活動報告では、グラフニューラルネットワーク(GNN)と呼ばれる技術に注目し、バッチジョブスケジューラーのワークロードログを効率的に処理する方法の研究についてまとめる。

### 8.2 研究の目的とこれまでの活動

本研究では、バッチジョブスケジューラーにおける計算ジョブの待ち時間を予測することを目的とする。計算機クラスターの混雑具合によっては各ジョブが実際に実行されるまでに長く待たされる場合がある。ジョブの待ち時間を精度良く予測することが出来れば、ユーザーの研究計画やジョブスケジューリングの効率化に貢献できる可能性がある。特に、グリッドコンピューティングのように計算機設備(サイト)が広域に分散している環境では、ジョブ待ち時間予測に応じてどのサイトにジョブを投入すれば良いかの指標にもなる。

これまで、France Japan Particle Physics Laboratory (TYL - FJPPL)の研究課題の一つとして、KEK 計算科学センターと IN2P3 Computing Centre (CC-IN2P3)とで本研究に関する情報交換が行われてきた。先行研究として、Boosted Decision Tree (BDT)と呼ばれる機械学習手法を用いた研究が CC\_IN2P3 グループによって取りまとめられている<sup>1</sup>。

### 8.3 GNN と深層学習モデル概要

GNN とは、深層学習の入力データをノードとエッジで構成されるグラフとして扱う技術である。バッチジョブスケジューラーの任意の時間の状態(スナップショット)を切り取った際に、スナップショット内にある実行中のジョブや待ち状態のジョブの関係性をグラフ

---

<sup>1</sup> Luc Gombert & Frédéric Suter, “Learning-Based Approaches to Estimate Job Wait Time in HTC Datacenters”, [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-88224-2\\_6](https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-88224-2_6)

として自然に表現することが可能である。今回の研究では、各ジョブをノード、ジョブ同士の関係性をエッジとして状態を表現する。先行研究の BDT や単純な深層学習モデル(Multi Layer Perceptron Model, MLP)は固定長の入力データしか扱えないため、入力データの生成には制約がある。これに対し、GNN はグラフとして可変長の入力データを扱うことが可能であるため、バッチジョブスケジューラーの状態の情報を失うことなく効率的にデータを処理することが可能となる。

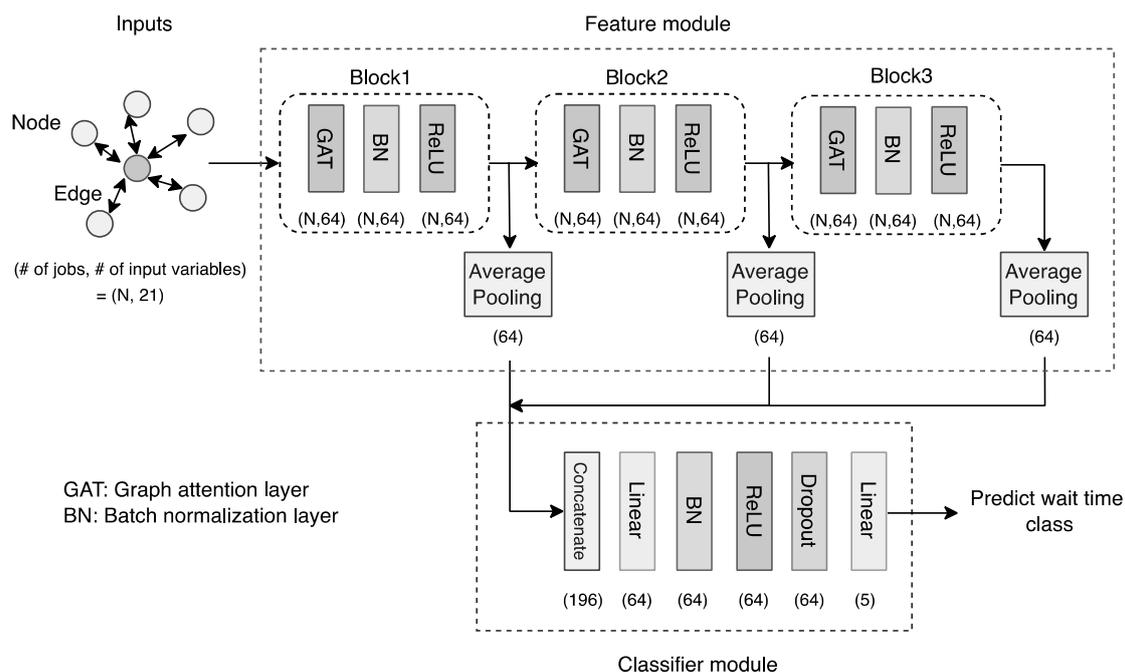


図 1 深層学習モデル概要

図 1 は入力データをグラフとして表現している様子（図中の“Inputs”）と、今回設計した GNN に基づいた深層学習モデル（図中の“Feature module”と“Classifier module”）を示している。特に、Attention 機構と呼ばれる仕組み(GAT)を採用することでジョブの関係性の重要度を学習するようになっている。ジョブの待ち時間を大きく時間で分けて、以下の表 1 の定義で 5 クラスの分類問題として学習を行う。

クラス	1	2	3	4	5
待ち時間	1 分未満	1 分以上 10 分未満	10 分以上 1 時間未満	1 時間以上 10 時間未満	10 時間以上

表 1 クラスの定義

## 8.4 Parallel Workload Archive と実験結果

有志によって公開されている Parallel Workload Archive (PWA)<sup>2</sup>にある各データセンターのバッチジョブスケジューラーのワークロードログを利用して実験を行った。PWA からスナップショットを再構成し、深層学習モデルの学習と評価に利用した。合計 6 ヶ所のデータセンターの PWA に対して評価を行い、既存の BDT と MLP と比較して 0.3%-7.9%の計算ジョブの待ち時間についての予測精度の改善が確認できた。また、ジョブの関係性の重要度を示す学習パラメータ(Attention)の出力を解析することで、計算ジョブの待ち時間予測においてはバッチジョブスケジューラーに最近投入されたジョブの情報がより重要であるという知見を得た。この結果は TYL - FJPPL workshop<sup>3</sup>で報告し、また、JSSPP 2023<sup>4</sup>に論文を投稿した。

---

<sup>2</sup> Parallel Workloads Archive, <https://www.cs.huji.ac.il/labs/parallel/workload/>

<sup>3</sup> FJPPL — Japan-France workshop on computing technologies  
<https://indico.in2p3.fr/event/28953/>

<sup>4</sup> JSSPP 2023, <https://jsspp.org/>

# 第 III 部

## 資料



## 18. 著作

### 18.1 論文

#### 18.1.1 査読有り

- Jiro Suzuki, Atsushi Takano and Yushu Matsushita, “Helical Microdomains with Homochirality Trapped in a Gyroid Network from Symmetric AB1CB2D Pentablock Quaterpolymer Melt Studied by Monte Carlo Simulation”, *Macromolecular Theory and Simulations*, vol31 p2200015,2022, <https://doi.org/10.1002/mats.202200015>
- E de Doncker and F Yuasa, “Regularization of Feynman 4-Loop Integrals with Numerical Integration and Extrapolation”, *CCSA 2022, LNCS 13378*, pp. 388–405, 2022, [https://doi.org/10.1007/978-3-031-10562-3\\_28](https://doi.org/10.1007/978-3-031-10562-3_28)
- E de Doncker, F Yuasa and T.Ishikawa, “Numerical Regularization for 4-loop Self-Energy Feynman Diagrams”, *Journal of Physics: Conference Series 2438(012147) 1-6*, 2023.2, <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2438/1/012147>
- Seokhee Park , Ryosuke Itoh , Diptaparna Biswas , Nils Braun , Markus Tobias Prim , Daniel Jacobi , Karim Trabelsi , Satoru Yamada , Soh Y Suzuki , Mikihiro Nakao , Takuto Kunigo , Dmytro Levit, “Upgrade of Online Storage and Express-Reconstruction System for the Belle II Experiment”, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 10.1109/TNS.2023.3253517
- D. Levit, M. Bessner, D. Biswas, D. Charlet, O. Hartbrich, T. Higuchi, R. Itoh, E. Jules, P. Kapusta, T. Kunigo, Y.-T. Lai, T. S. Lau, M. Nakao, K. Nishimura, S.-H. Park, E. Plaige, H. Purwar, P. Robbe, R. Sugiura, S. Suzuki, M. Taurigna, G. Varner, S. Yamada, Q.-D. Zhou, “Trigger Timing Interface for the Read-Out Upgrade of the Belle II DAQ”, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 10.1109/TNS.2023.3240161
- Y.-T. Lai, M. Bessner, D. Biswas, D. Charlet, T. S. Lau, D. Levit, O. Hartbrich, T. Higuchi, R. Itoh, E. Jules, P. Kapusta, T. Kunigo, M. Nakao, K. Nishimura, S. Park, E. Plaige, H. Purwar, P. Robbe, R. Sugiura, S.Y. Suzuki, M. Taurigna, G. Varner, S. Yamada, and Q.-D. Zhou, “Commissioning and Operation of the Upgraded Belle II DAQ System with PCI-Express-Based High-Speed Readout”, *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 10.1109/TNS.2022.3228288

- R. Akaho, A. Harada, H. Nagakura, W. Iwakami, H. Okawa, S. Furusawa, H. Matsufuru, K. Sumiyoshi, S. Yamada, “Protoneutron Star Convection Simulated with a New General Relativistic Boltzmann Neutrino Radiation Hydrodynamics Code”, *Astrophys.J.* 944 (2023) 1, 60, DOI:10.3847/1538-4357/acad76
- K-I. Ishikawa, I. Kanamori, H. Matsufuru, I. Miyoshi, Y. Mukai, Y.Nakamura, K. Nitadori, M. Tsuji, “102 PFLOPS Lattice QCD quark solver on Fugaku”, *Comput.Phys.Commun.* 282 (2023) 108510, DOI: 10.1016/j.cpc.2022.108510
- W. Iwakami, A. Harada, H. Nagakura, R. Akaho, H. Okawa, S. Furusawa, H. Matsufuru, K. Sumiyoshi, S. Yamada, “Principal-Axis Analysis of the Eddington Tensor for the Early Post-Bounce Phase of Rotational Core-Collapse Supernovae”, *Astrophys.J.* 933 (2022) 1, 91, DOI: 10.3847/1538-4357/ac714b
- 藏重 久弥、村上 晃一、 “放射線シミュレーション・ツールキット Geant4 の最近の発展”、*日本物理学会誌*、*Butsuri* 78 (3), 120-124, 2023-03

### 18.1.2 査読なし

## 18.2 Proceedings

### 18.2.1 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
- T. Kishimoto, M. Morinaga, M. Saito and J. Tanaka, “Application of transfer learning to event classification in collider physics”,

PoS(ISGC2022)016, <https://pos.sissa.it/415/016/>

- Akihiro Shibata, Seikou Kato, Kei-Ichi Kondo, “Magnetic monopole dominance for the Wilson loops in higher representations”, Published in: PoS LATTICE2021 (2022) 085, DOI: 10.22323/1.396.0085
- K-I. Ishikawa, I. Kanamori, H. Matsufuru, “Multigrid Solver on Fugaku”, PoS LATTICE2021 (2022) 278, Proceedings of 38th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2021). DOI: 10.22323/1.396.0278
- I. Kanamori, K. Nitadori, H. Matsufuru, “Wilson matrix kernel for lattice QCD on A64FX architecture”, HPC Asia '23 Workshops: Proceedings of the HPC Asia 2023, 55–64, DOI:10.1145/3581576.3581610

#### 18.2.1 査読なし

- 與那嶺 亮、  
「KEKにおける脆弱性自己点検 PDCA サイクル高速化」、情報処理学会  
第 57 回 IOT 研究会、  
[https://ipsj.ixsq.nii.ac.jp/ej/?action=pages\\_view\\_main&active\\_action=repository\\_view\\_main\\_item\\_detail&item\\_id=217897&item\\_no=1&page\\_id=13&block\\_id=8](https://ipsj.ixsq.nii.ac.jp/ej/?action=pages_view_main&active_action=repository_view_main_item_detail&item_id=217897&item_no=1&page_id=13&block_id=8)

### 18.3 KEK 出版物

- Activity Report 2021 Computing Research Center, KEK Progress Report 2022-8, February 2023 D
- 金子 敏明、「Python3 プログラム：例題と問題」、KEK Internal 2022-1, <https://lib-extopc.kek.jp/preprints/PDF/2022/2226/2226001.pdf>

### 18.4 その他

特になし

## 19. 会議発表

### 19.1 国際会議

- T. Nakamura, G. Iwai, T. T.Sasaki, “The History of the Accept and Rise of Geant4, The History of the Accept and Rise of Geant4”, International Symposium on Grids & Clouds (ISGC) 2023 in conjunction with HEPiX Spring 2023 Workshop, 2023.3.23, Taipei Taiwan, (~100 参加)
- Kishimoto, K. Murakami, S. Suzuki, “KEK site report”, HEPiX Autumn 2022 , 2022.10.31-11.3, Umea Sweden
- T. Nakamura, “KEK and KEK-CRC general report”, Japan-France workshop on computing technologies, 2023.1.31-2.1, Lion France
- Tomoaki Nakamura on behalf of the operation team, “KEK Grid CA Report”, APGridPMA meeting at ISGC2023, 2023.03.21, Taipei Taiwan
- T. Nakamura, P. V. D. Reest, “HEPiX Spring Workshop 2023 in Taipei Closing Remarks”, HEPiX Spring Workshop 2023, 2023.3.27-3.30, Taipei, Taiwan
- G. Iwai, S. Kaneko, T. Kishimoto, T. Nakamura, T. Sasaki, and S. Suzuki, “KEK Site Report”, HEPiX Spring 2022 online Workshop, 2022.4.25-4.29, <https://indico.cern.ch/event/1123214/>
- G. Iwai, T. Kishimoto, T. Nakamura, and S. Suzuki, “Site report on KEKCC and Grid system”, FJPPL - Japan-France workshop on computing technologies (2022). 2022.5.16-18, online , <https://indico.in2p3.fr/event/26306/>
- G. Iwai, T. Kishimoto, K. Murakami, T. Nakamura, and S. Suzuki, “KEK Site Report”, HEPiX Spring 2023 Workshop (2023), 2023.3.27-31, <https://indico.cern.ch/event/1222948/>
- Akihiro Shibata, “Study on the quark confinement based on the dual superconductivity”(poster), The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba, 2022.10.13-14, Tsukuba
- H. Nemura, Y. Akahoshi, T. Aoyama, I. Kanamori, K. Kanaya, H. Matsufuru, Y. Namekawa, “Implementation of Lattice QCD common code to large scale parallel supercomputer with manycore and GPU architecture” (poster presentation), 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba, 2022.10.14, Tsukuba, Japan
- Kishimoto Tomoe, Morinaga Masahiro, Saito Masahiko, Tanaka Junichi, “Decay-aware neural network for event classification in collider physics”,

Machine Learning and the Physical Sciences, 2022.12.3, New Orleans (Hybrid), <https://ml4physicalsciences.github.io/2022/>

- Tomoe Kishimoto, “Offline resource evolution for ML/DL”, ML(Machine Learning) at HEP workshop in Japan, 2023.2.23-24, KEK Japan, <https://kds.kek.jp/event/44830/>, 119 名参加
- Tomoe Kishimoto, “Report on the study of optimization of batch job scheduler with Deep Learning”, FJPPL — Japan-France workshop on computing technologies, 2023.1.31-2.1, CC-IN2P3 France, <https://indico.in2p3.fr/event/28953/>, 15 名参加

## 19.2 国内会議

- 一井 信吾  
“KEK サイトレポート”、第 25 回共同利用期間における Security Work Shop 2022、滋賀医科大主催、滋賀医科大 online Hybrid, 2022.12.13
- 鈴木 聡  
“DNS クエリとレスポンスのログ取り”、第 25 回共同利用期間における Security Work Shop 2022、滋賀医科大主催、滋賀医科大 online Hybrid, 2022.12.13
- 柴田 章博、近藤 慶一、“ゲージ非依存な BEH 機構に基づく Yang-Mills 理論の質量ギャップとクォーク閉込め”、日本物理学会 2022 年秋季大会、2022.9.6-8、岡山理科大学（岡山キャンパス）
- 柴田 章博、近藤 慶一、“ゲージ非依存な BEH 機構に基づく Yang-Mills 理論の質量ギャップとクォーク閉込め (II)”、日本物理学会 2023 年春季大会、2023.3.22-25, online
- 鈴木 次郎、高野 敦志、松下 裕秀、  
“ペンタブロック共重合体ブレンドによる二次元超格子構造の構築”、第 71 回高分子討論会 2022 年 9 月 7 日 北海道大学 参加者 4000 人程度
- 松古 栄夫、  
“High Performance Computing for Lattice QCD”, Workshop on Nonperturbative Analysis of Quantum Field Theory and its Applications, 2022.9.22、大阪大学会館、豊中市
- 與那嶺 亮、鈴木 聡、一井 信吾、  
“KEK における脆弱性自己点検 PDCA サイクル高速化”、情報処理学会 第 57 回 IOT 研究会、2022.5.20, <https://www.iot.ipsj.or.jp/meeting/57-program/>
- 岸本 巴、“加速器実験における転移学習の応用”、Machine Learning at High Energy Physics, 2020.7.8-9、東京大学、114 名参加、<https://indico.cern.ch/event/1162214/>

- 湯浅 富久子、  
“ファインマン積分の数値計算法：DCMによる電弱高次補正計算 IV”、日本物理学会 2022 年秋季大会、2022.9.6 – 8、岡山理科大岡山キャンパス

### 19.3 その他 広報等

特になし

## 20. 会議出席（招待、座長等）

### 20.1 国際会議（招待・座長）

- H.Matsufuru, F.Yuasa, (workshop chair)  
Workshop on Computational Science and HPC - CSHPC 2022, 2022.7.4-7,  
online, <https://www.cs.wmich.edu/hpcs/cshpc22/>
- T.Nakamura (track convener, session chair)  
HEPiX Spring 2022 Workshop, 2022.4.25-29, online  
HEPiX Autumn 2022 Workshop, 2022.10.31-2022.11.03, Umea Sweden  
HEPiX Spring 2023 Workshop, 2023.3.27-31, Taipei Taiwan
- T.Nakamura  
2022 Joint workshop of FKPPL and TYL/FJPPL, 2022.5.16-18, online
- T.Nakamura (Meeting convener)  
HEPiX Board Meeting, 2023.3.28, Taipei Taiwan  
HEPiX Preparing Meeting, 2022.12.15, 2023.1.17, 2023.2.21, online
- T.Sasaki (invited keynote talk),  
“The History of the Accept and Rise of Geant4, The History of the Accept  
and Rise of Geant4”, International Symposium on Grids & Clouds (ISGC)  
2023 in conjunction with HEPiX Spring 2023 Workshop, 2023.3.23,  
Taipei Taiwan, (~100 参加)

### 20.2 国内会議（招待・座長）

- 柴田 章博(座長)  
日本物理学会 2023 年春季大会、2023.3.25 25p2 後半

## 21. 会議開催

### 21.1 国際会議開催

#### 21.1.1 開催（主催者）

特になし

#### 21.1.2 組織委員会委員等

- T.Nakamura (Program Committee)  
International Symposium on Grids & Clouds 2023, 2023.3.19-24,

Taipei Taiwan

- T.Nakamura (board member)  
HEPiX Spring 2022 Workshop, 2022.4.25-29, online  
HEPiX Autumn 2022 Workshop, 2022.10.31-2022.11.03, Umea Sweden  
HEPiX Spring 2023 Workshop, 2023.3.27-31, Taipei Taiwan
- F.Yuasa, H.Matsufuru (共同主催者)、  
Workshop on Computational Science and HPC - CSHPC 2022, 2022.7.4-7,  
online, <https://www.cs.wmich.edu/hpcs/cshpc22/>

## 21.2 国内会議開催

### 21.2.1 開催 (主催者)

特になし

### 21.2.2 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 15 回 勉強会: 2022.7.1 online,  
第 16 回 勉強会: 2022.9.16 online,  
第 17 回 勉強会: 2022.12.14 online  
第 18 回 勉強会: 2023.2.8 online
- 中村 智昭 (世話人)  
粒子物理コンピューティング懇談会、2022.9.7, online  
粒子物理コンピューティング懇談会、2023.3.25, online
- 一井 信吾  
第 15 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 2022)  
2022.12.8~9 オンライン-九州工業大学 hybrid 開催 プログラム委員  
情報処理学会 2022 年度第 5 回 (IOT 通算第 60 回)インターネットと運用技  
術研究会、2023.3.16 オンライン-前橋工科大学ハイブリッド開催 座長

## 21.3 講習会等開催

### 21.3.1 機構外対象

- 佐々木 節、村上 晃一、岡田 勝吾  
Geant Japan 主催 Geant4 講習会、2022.12.14-16、九州大学西新プラザ、  
<https://wiki.kek.jp/display/geant4/Geant4+Japanese+Tutorial+for+Detector+Simulation+2022>  
<https://www2.kek.jp/ar/hight/20230215/index.html>、参加者約 50 名

### 21.3.2 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 2022.12.23, 2023.1.12
- 與那嶺 亮
  - ・ KEK 情報セキュリティセミナー online 各回概ね 70 名参加  
講師：九州工業大学情報基盤センター副センター長 中村 豊教授、2022.7.8  
講師：茨城県警本部、2022.12.19  
講師：株式会社ラック、2023.2.21
- 真鍋 篤
  - ・ DX 推進室との共同開催 Microsoft Power Platform 説明会、2023.3.22,  
online 約 60 名参加

## 21.4 その他

### 21.4.1 参加組織

特になし

### 21.4.2 展示等

- Super Computer 2022、KEK 展示ブース、Virtual Exhibits, 2022.11.14-17  
<https://sc22.supercomputing.org/>