

物質・材料設計のための仮想実験システム - ワークベンチ部 -

4 R - 9

西川 宜孝 永野 千恵美 井 信之 小池 秀耀
株式会社 富士総合研究所 計算科学・小池クラスター

1 はじめに

コンピュータを用いた物質・材料設計を実現するためには、数値シミュレーション、データベース、知識情報処理、ヒューマン・インターフェース等の要素技術を統合化する必要がある。我々は、物質・材料設計のための数値シミュレーション、データベース等を統合化した仮想実験システムのプロトタイプを試作している [1][2][3]。

一方、一般的にシミュレーション・ソフトウェアやデータベース等の解析ツールは、最新のものを一元的に管理することが望ましく、コンピュータ・ネットワークが発達した現在では、ユーザがこれらの解析ツール群をネットワークを介して、仮想的に一つのシステムのように使用できることが望まれる。最近、ネットワークを介してシミュレーション・ソフトウェアの実行が可能なシステムが開発されているが、複数の数値シミュレーションやデータベースの解析データを統一的に扱えるシステムは実用化されていない。

我々は、仮想実験システムの一機能として、解析ツール群をネットワークを介して、分散、協調的に使用できるワークベンチを試作している。現在、仮想実験システムに組み込んでいる解析ツール群を対象にプロトタイプを作成しているが、汎用的に設計および実装しているため、物質・材料設計以外のシミュレーション・ソフトウェアやデータベースに対しても適用可能である。本論文では、仮想実験システムのワークベンチの概要、機能、実装方法について述べる。

2 仮想実験システムの概要

仮想実験システムは、物質・材料設計のための要素技術であるシミュレーション・ソフトウェア、データベース、知識情報処理等のツール群からなるプラットフォームと、「作業フロー」という概念に基づく、一連の材料設計を支援する材料設計システム [4]、ネットワークを介して解析ツール群を分散・協調的に使用できるワークベンチから構成される。図 2.1 に仮想実験システムの全体構成を示す。

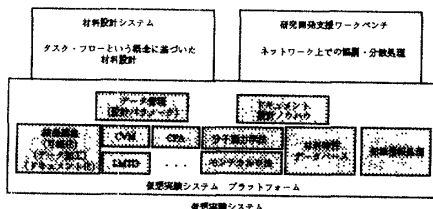


図 2.1 仮想実験システムの全体構成

3 ワークベンチの概要

仮想実験システムのワークベンチは、ネットワーク上に分散しているシミュレーション・ソフトウェアやデータベース等の解析ツールを分散・協調的に使用するためのシステムである (図 3.1)。ワークベンチの主な特徴を以下にあげる。

- ネットワーク上に分散している解析ツールを分散・協調的に使用できる。
- 解析対象、機能等によるツールの検索機能を有し、目的に応じた解析ツールの選択が可能である。
- 解析ツール間において解析結果等のデータの相互参照が可能でデータ管理機能をもつ [5]。
- シミュレーションの計算結果やデータベースの検索結果から、必要なデータを抽出し、これを可視化、あるいはドキュメント化する結果編集機能をもつ。
- 仮想実験システムのプラットフォームとして WWW サーバを用いており、ユーザ・インターフェースは WWW ブラウザを使用するため、クライアント側は多機種の計算機上で使用できる。

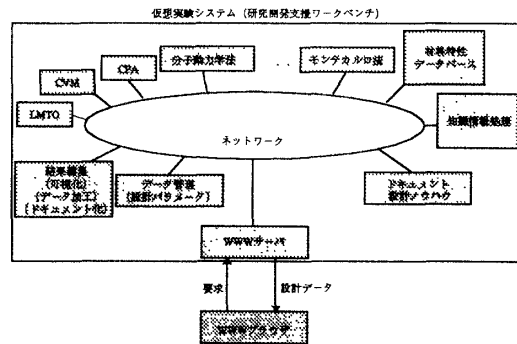


図 3.1 仮想実験システム ワークベンチの概念

4 ワークベンチの機能

4.1 シミュレーション・ソフトウェアの登録

シミュレーション・ソフトウェアの解析対象、機能、入出力データ、実行プログラム等を定義した定義ファイルを用いてシミュレーション・ソフトウェアの登録を行う。定義ファイルを基に、ワークベンチの解析ツール群の検索情報の更新、入力画面の作成を行う。ワークベンチ用の入出力インタフェース・ルーチンを提供している。ユーザは、プログラムへの入出力インタフェース・ルーチンの組み込み、定義ファイルの作成を行うことにより、プログラムをワークベンチに組み込むことが可能である。

Virtual Experiment System for Materials Design - Workbench -
Nobutaka Nishikawa, Chiemi Nagano, Nobuyuki I, Hideaki Koike
Koike Cluster : Computational Science Engineering
Fuji Research Institute Corporation
2-3 Kandanshiki-cho, Chiyoda-ku, Tokyo 101, Japan
nishikawa@crab.fuji-ric.co.jp

4.2 データベースの構築

データベースのテーブル作成が可能であり、作成したテーブルを基に検索・登録画面等が生成される。データベースの登録内容を定義した定義ファイルを用いてワークベンチのツール群の検索情報の更新する。

4.3 シミュレーション・ソフトウェア、データベースの検索

ワークベンチに組み込まれている解析ツール群に対し、解析対象や機能、登録内容等によって解析ツール群の検索が可能であり、を目的に応じて適当な解析ツールを選択することができる。

4.4 シミュレーション・ソフトウェアの実行

ワークベンチに組み込んであるシミュレーション・ソフトウェアの入力データの入力、およびプログラムの実行、計算条件および結果等の画面表示が可能である。

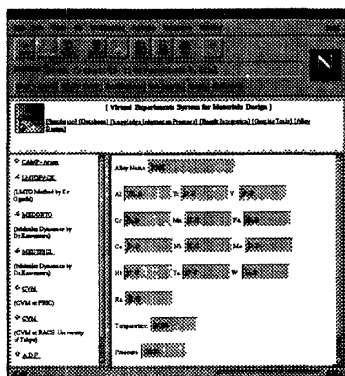


図 4.1 シミュレーション・ソフトウェアの入力画面例

4.5 データベースへのアクセス

データベースの検索、登録、更新、削除が可能である。

4.6 データ管理機能

シミュレーション・ソフトウェアの計算結果、データベースの検索結果から必要なデータを抽出し、新たにデータベースに登録できる。ワークベンチで行った計算等の計算条件、計算結果等をデータベースによって管理することにより、異なる条件による同一解析ツールの実行時、または他の解析ツールの実行時に参照できる。

4.7 結果編集機能

シミュレーション・ソフトウェアの計算結果やデータベースの検索結果の編集、ドキュメントの作成支援として、データ抽出、可視化、文書変換、画像変換等のツール群を提供している。

5 ワークベンチの構成

ワークベンチのプラットフォームは、WWW サーバを基に作成されており、数値シミュレーションの実行およびデータベースへのアクセスは、CGI 機能を用いて

実現している。ユーザー・インターフェースに WWW ブラウザを使用することにより、クライアント側は Netscape 等の WWW ブラウザが動作する計算機上で使用することが可能である。

データベース・マネジメント・システムとして、Postgres95 を採用しており、WWW サーバから Postgres95 のインタフェースは PSQL を用いている。

6 ワークベンチを用いた材料特性予測

現在ワークベンチは、仮想実験システムに組み込まれたツール群である LMTO 法、分子動力学法、第一原理分子動力学法、CVM 法等の数値シミュレーション・ソフトウェア、材料特性データベース等を用いて材料特性予測を行い、ワークベンチの評価を行っている。

7 おわりに

物質・材料設計のための仮想実験システムの一機能として、仮想実験システムに組み込まれているシミュレーション・ソフトウェア、データベースをネットワークを介して、分散、協調的に使用できるワークベンチを試作している。現在、仮想実験システムに組み込んである解析ツール群を対象にプロトタイプを作成しているが、汎用的に設計および実装しているため、物質・材料設計以外のシミュレーション・ソフトウェアやデータベースに対しても適用可能である。物質・材料設計のためのシミュレーション・ソフトウェア、材料特性データベース等を用いて材料特性予測を行い、ワークベンチの評価を行っている。

謝辞

本研究は平成 7 年度科学技術振興調整費による総合研究「物質・材料設計のための仮想実験技術に関する研究」の一環として、(株)富士総合研究所が科学技術庁より委託を受けて実施したものである。

参考文献

- [1] N. Nishikawa, C. Nagano, and H. Koike. Development of virtual experiment system for material design. In *International Workshop on Computer Modelling and Simulation for Materials Design*, 1996.
- [2] 小池, 永野, 西川. 物質・材料設計のための仮想実験システムの開発. 第 2 回 物質・材料設計のための仮想実験技術シンポジウム, 1996.
- [3] N. Nishikawa, C. Nagano, and H. Koike. Integration of virtual experiment technology for material design. In *Computerization and Networking of Materials Databases, ASTM STP 1311*, 1997.
- [4] 小池, 永野, 西川. 物質・材料設計のための仮想実験システムの開発. 情報処理学会 第 53 回 全国大会 講演集, 1996.
- [5] 西川, 永野, 井, 小池. 物質・材料設計のための仮想実験システム - データ管理部 -. 情報処理学会 第 55 回 全国大会 講演集, 1997.