

記号処理によるシミュレーションソフトウェア 開発支援システムの研究

4 J-9

川田重夫、飯島邦彦、ブンミー・チュンポル、真鍋保彦

長岡技術科学大学工学部

1 はじめに

コンピュータシミュレーションは、あらゆる分野での研究や製品開発には欠かせないものである。最近では、パソコンやワークステーションの高性能化、低価格化そして高度なビジュアルライゼーションの充実と共に、そのニーズは益々高まりつつある。そこで我々は、科学技術計算の分野でのコンピュータシミュレーションを行う上で、そのソースコード生成からポストプロセスまでを支援するシステムを開発している。

本システムは、入力仕様部・偏微分方程式の離散化部・ソースコード生成部・知識及びその処理部・ポスト処理用ソースコード生成部・ヒューマンインターフェース部から構成される。今回は、本システムの基本的な思想と特徴を述べ、開発したプロトタイプについて解説する。

2 開発の背景

科学技術計算用のコンピュータシミュレーションは、そのニーズの高まりと共に大規模、複雑、専門化の一端をたどり、ソフトウェア開発には多大な労力と時間が必要とされる。シミュレーションの工程は、まず、対称とする物理現象などをモデル化し、偏微分方程式を作る。次に、数値計算を行うために、得られた偏微分方程式の離散化を行い、ソースコードを作成していく。ここまでの工程にかなりの時間を費やすこともある。そして、パラメータ等を変えながら、シミュレーション結果を得るのである。従って、ソフトウェア開発者は対象物のモデル化のための物理的知識や数値計算のための数学的知識だけでなく、コンピュータのOSや言語についての知識も要求される。そのため、このソフトウェアの開発の自動化が望まれるのも当然である。

また、この多種多様なソフトウェア開発をどこまで自動化できるのかといった疑問もある。しかし、科学技術計算用のコンピュータシミュレーションソフトウェアに限れば、共通性を見いだすことができる。

Fig.1は科学技術計算用のプログラムの大きな流れを示している。まず、メッシュ生成やパラメータの設定及び初期設定を行った後、計算と結果出力を行う。時間発展するシミュレーションであるならば、後者は時間発展に伴うループを持つことになる。出力されたデータの処理を行うポストプロセスも必要不可欠である。このような共通性をもとに、ソフトウェア開発

の完全自動化とはいかないまでも、支援するシステムは可能となる。

よって、我々はコンピュータにある程度の知識を持たせ、対話的な開発環境を作ることでシミュレーションソフトウェア開発者を支援し、それにかかる多大な労力を軽減し、時間の大幅な短縮を狙いとしている。

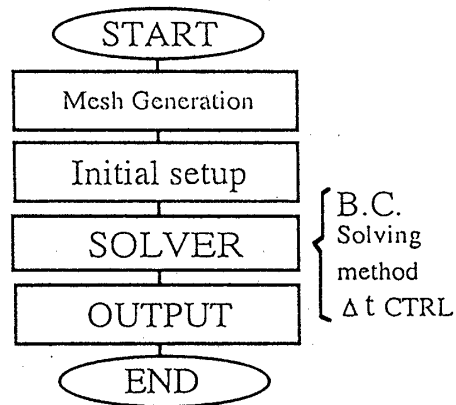


Figure 1: プログラムの大きな流れ

3 システムの概要

システム設計の祭の基本的な考え方として、できるだけ理解し易いソースコードを生成することを目標としている。従って、本システムの特徴としては、

1. ユーザとの対話的開発環境
2. システムの知識活用、変更機能
3. 分かり易いソースコード生成 (FORTRAN)
4. 充実したポストプロセッシングのソースコード生成 (C)

である。また、システム開発の実現性を高めるために、いくつかの制約を設けた。具体的には、

- 離散化→有限差分法
- ソースコード→FORTRAN、C (グラフィックス用ソースコード)
- ユーザにもシミュレーションに対するある程度の知識が必要

である。

Computer assisted Scientific Simulation Software Development based on Computer Algebra

Shigeo KAWATA, Kunihiko IJIMA, Choompol BOONMEE and Yasuhiko MANABE

Department of Electrical Engineering, Nagaoka University of Technology

4 システム構成

本システム構成が Fig.2 に示されている。以下、各部について解説する。

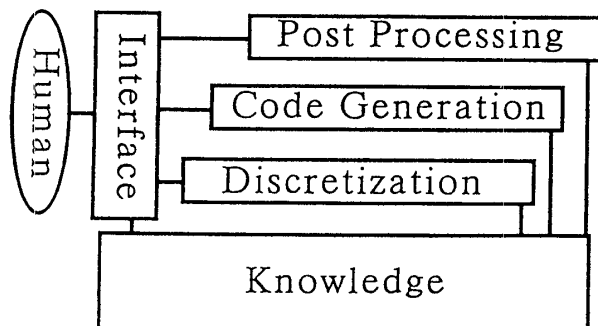


Figure 2: システム構成

4.1 差分化部

本システムの差分化部 [1][2] では、与えられた偏微分方程式を、記号変換処理により差分商で置き換えて差分方程式に帰着させ、この差分方程式を代数方程式としてコンピュータで計算できるような形に変換する。

差分近似を行う操作は元来解析的なもので Taylor 展開法や積分法などから適当な精度で近似するものである。しかし、いづれにしても精度が同じであるならば得られる差分近似も同じである。そこで本システムは、記号処理により差分化を行う上で、次の制約を設ける。

- 空間偏導関数については二次精度の中心差分
- 時間偏導関数については一次精度の前進・後退差分

また、差分近似を決めただけでは偏微分方程式から差分スキームを得るには不十分である。偏微分方程式を陽的に解くのか陰的に解くのか、被導関数(変数)のセルの境界で定義されているのか中心で定義されているのかの情報を得てはじめて差分スキームが得られる。特に、陰解法での ADI 法等では、1つの偏微分方程式から2つの差分スキームが得られる。

4.2 入力仕様及び FORTRAN ソースコード生成部

FORTRAN ソースコード生成部 [3] は、Fig.3 に示すように決められた書式で諸情報の書かれた入力仕様と、差分化部より得られた差分スキームをもとに、FORTRAN ソースコードを生成していく。

科学技術計算シミュレーション用のソースコードを開発する上では、かなり共通性のあるものが出てくる。こういったものを予め知識として用意し、提供している。しかし、その知識だけでプログラム生成を行うには、無理がある。そこで、ユーザと対話的に開発

を行うことで、コンピュータの持つ知識と人間の知識と経験をうまく利用でき、十分な開発支援ができると考えられる。

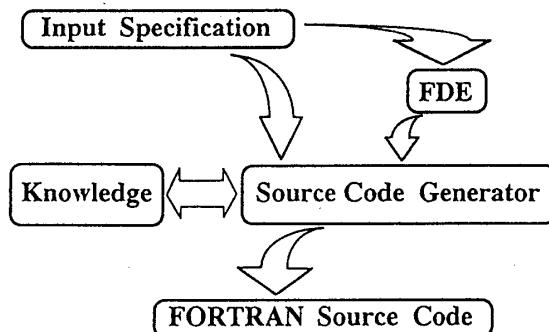


Figure 3: FORTRAN ソースコード生成

4.3 ポスト処理コード生成部

ポスト処理用ソースコード生成部では、すでに生成された FORTRAN ソースコードの出力ルーチンなどを解析し、それに合ったグラフィックスの入力書式を作成し、結果をコンピュータグラフィックス用ソースコードとして出力する。グラフィックスルーチンそのものは、マシンや OS に依存して、非常に一般的に用意できると考えられるので、知識としてシステムに与えることができる。

従って、ポスト処理において、解析の中心となるのが、計算結果の入出力部分である。FORTRAN ソースを解析することにより、この入出力がどのように行われているのかを知り、それをもとに、計算結果のデータファイルからデータを読み、結果をグラフィック表示する。ポスト処理に使う言語は C 言語とした。

5 まとめ

シミュレーションソフトウェア開発における、ソースコード生成支援システムのプロトタイプを開発した。現在、空間二次元多変数のシステムを開発中である。コンピュータシミュレーションのニーズが高まる中で、本研究が多少でも貢献できることを願っている。

References

- [1] 下地貞夫: 数式処理, 森北出版, (1991).
- [2] R. Liska and L. Drska: "A REDUCE package for automation of Finite difference method for solving pDE", *ISSAC-90, Int. Symp. on Symbolic and Algebraic Computation*, Tokyo, August 20-24, (1990).
- [3] R. Liska: "Numerical code generation for finite difference scheme solving" *Computational and applied mathematics I*, Proc. 13th IMACS Congress, July 22-26, (1991).