

科学技術シミュレーションプログラム合成支援 I

2S-5 設計思想とシステム構成

川田重夫、飯島邦彦、真鍋保彦、Choompol Boonmee

長岡技術科学大学工学部電気系

1、はじめに

本研究では、科学技術数値シミュレーションプログラムを合成支援するためのソフトウェアシステム [1, 2] の研究と開発を行っている。本稿では、本システムの特徴と研究の現状について報告する。

科学技術数値シミュレーションは、さまざまな分野において需要が非常に多く、物理/工学現象の解析、新しい物理の発見、新製品の設計/テストなど、広く用いられている。利用されている分野も広く、電磁界解析、電磁界中の荷電粒子のふるまいの解析、流体シミュレーション、構造解析、熱輸送シミュレーション等多くの分野で使われている。科学技術数値シミュレーションの効用は、製品開発のコストダウン、非線形現象や複雑な現象の研究/解析、実験に変わる手段としての可能性、新しい現象/物理の模索等、さまざまな面で考えられる。

一方、科学技術数値シミュレーションソフトウェアを開発すること自体が、非常な時間と労力を要する仕事であるという現実がある。使用に耐えるソフトウェアには、小さいもので半年通常は数年以上をかけて開発を行う。本研究では、この現実を解消するための一つの方法を提案している。

本システムでは、コンピュータに科学技術数値シミュレーションに関する知識の一部を持たせ、同様に知識を持った人間と相互作用しながら、プログラム合成を行うことを基本としている。この考え方により、システムに柔軟性を与え、システムの実現可能性を高めようとしている。また、システムは、シミュレーションプログラムをユーザに提供するだけでなく、得られた結果の可視化ソフトウェアをも提供する。

2、システムの設計思想

従来の開発方法では、開発者/人間のみが数値シミュレーションについての知識を持ち、開発にかかわる負担を負っている。ここで、数値シミュレーションについての知識とは、物理や現象のモデル化、方程式群の離散化、プログラミング、コンピューティングあるいはパラメータスタディ、計算データの可視化及び解析、全体を言う。逆に、一方的にコンピュータに全ての知識を埋め込むことは、可能かもしれないが、現時点では現実性に乏しい。そこで、本研究では、数値シミュレーションについての知識の中から、一般性/共通性を見出し、それらをコンピュータに請け負ってもらい、ある程度の知識を人間も持っているものとし、互いに相互作用することによって、実際に数値シミュレーションプログラム生成を行おうとしている。

数値シミュレーションについての知識の中での共通点は、少なくとも二つ存在する。第一は、上で述べた数値シミュレーションプロセスが一般的であることである。第二は、シミュレーションプログラムの構造自身にある。この共通な構造は、解かれる順に書けば、空間メッシュ(グリッド)生成、その他の初期条件設定、時間ループの中での基礎方程式群の計算(この際境界条件群を満たすように解かれる)、結果の出力、から成る。(定常問題は時間発展のループが無い特別な場合と考えられる。)この二点は、科学技術数値シミュレーションという限定された領域においては、一般性があるため、コンピュータに埋め込み機械的に実

Computer-Assisted Numerical Simulation Code Generation I

-Basic Idea and System Structure

Shigeo Kawata, Kunihiko Iijima, Yasuhiko Manabe and Choompol Boonmee

Nagaoka University of Technology,

Nagaoka 940-21, Japan

現できる。

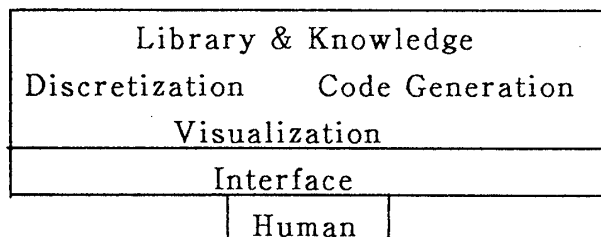
さらに、本システムの実現性を高めるため、いくつかの制約を設けている。まず、離散化法を制限している。現在は差分法をサポートしているが、将来は有限要素法までサポートしたい。合成するプログラムは Fortran で記述される。可視化ソフトウェアは C で記述されるものとしている。

本システムは、シミュレーションソフトウェアおよび可視化ソフトウェア共に、ユーザに提供する。特に、科学技術数値シミュレーションにおいて、ソースコードそのものを、提供することは以下の点で重要である。ソースコードを見ることができることによって、ユーザが解法/精度/正しさを確かめることができ、計算結果に信頼が持てる。また、実際の計算の際にはソースコードの初期条件等の限られた部分のみを変更し、大部分のコードはそのまま、パラメータスタディを行う。ソースコードがあれば便利である。さらに、基礎式に一つの新しい項を付け加える際にも、ソースコードがあればユーザがプログラムを変更できる。可視化ソフトウェアが提供されることについても、同様の利点が上げられる。

可視化ソフトウェアをサポートすることは、科学技術数値シミュレーションにおいて重要である。計算結果を得た後、まずは絵を見て計算結果が思ったとおりの条件を満足しているか、バグは無いか、を確かめるのが常である。その後新しい物理/現象なりが含まれていないかについて、検討する。この際も可視化が重要である。また、数値データを得た後は、即座に可視化したいという要求がある。これを満足するため、本システムでは、Fortran コードを入力し、出力ルーチンを探し、出力変数名とその出力フォーマットを取り出し、Cコードに変換する。この情報を基にデータ入力関数を C で合成する。この関数をあらかじめ用意した可視化ソースコードと結合し、ユーザに提供する。こうすることによって、可視化が効率的に行われると考えられる。

3、システム構成

おおまかな構成は図の通りである。人間とコンピュータとの間のインタフェースを通じ、入力仕様をファイルに入力する。離散化部は、方程式の離散化法に関する情報を人間及び仕様から得て、離散化を行う。この際、境界条件を離散化する必要があれば同時に行う。離散化された式群と仕様及び人間から得たプログラミングに必要な情報により、コードを生成する。この際、行列の解法等は人間が選べるようにしてある。そのための数学ライブラリをある程度用意する。ポストプロセス部ではソースコードを入力し C 入力関数を生成し、可視化ソフトウェアを合成する。可視化を効率的に行うために、GUI ベースのインタフェースを用意している。



4、まとめ

現在研究開発中の科学技術数値シミュレーションソフトウェア合成支援システムについて、現状を報告した。今後、各パーツを完成/統合し、全システムに対するインタフェースを開発すること、離散化法に有限要素法を加えること、プラットフォームとして一部 Common Lisp を用いているが将来は C に移行すること、大規模な問題に適用すること、を行って行きたい。

参考文献

- [1] 川田他：記号処理による数値シミュレーションコード開発支援システム、第34回プログラミングシンポジウム(情報処理学会) pp. 61-72 (1993)。
- [2] S. Kawata, et al., Scientific-Numerical-Simulation-Program-Generation System based on Symbolic Computation, 日本数式処理学会誌掲載予定 (1993)。