

物質・材料設計のための仮想実験システム - データ管理部 -

4R-10

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]。

物質・材料設計において、高精度な材料特性予測を行うには、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の統合化および相互参照が必要不可欠であり、これらの結果のデータベース化によるデータ管理を行う必要がある。このような、数値シミュレーションとデータベースの解析データの統合化および相互参照が可能なデータ管理機能を持ち、ユーザ定義が可能な汎用性のあ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試作において、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等の統合化および相互参照が可能なデータ管理部を構築している。現在、仮想実験システムに組み込んでいるツール群を対象にプロトタイプを作成しているが、ユーザ定義によってデータの管理ができるなど、汎用的に設計および実装しているため、物質・材料設計以外の数値シミュレーションやデータベースに対しても応用可能である。本論文では、仮想実験システムのデータベース部の概要、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数値シミュレーション、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」という概念に基づき、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ツール群を分散・協調的に使用できるワークベンチ [5] 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。

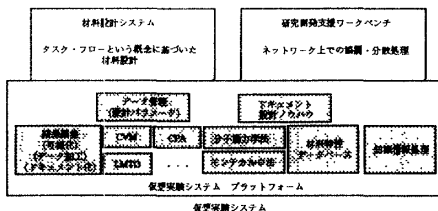


図 2.1 仮想実験システムの全体構成

3 データ管理部の概要

仮想実験システム データ管理部は、シミュレーション・ソフトウェアの計算結果、材料特性データベースの検索結果のデータ管理を行い、解析結果から必要なデータを抽出し、解析結果の統合化および解析ツールからの相互参照が可能である。仮想実験システムのデータ管理部は、データベース・マネージメント・システム、データベース、データ抽出ツール群等から構成される。データ管理部は、データベース・マネージメント・システムを用いて、ユーザがユーザ・インタフェース上でテーブルを定義して、データベースを構築することが可能である。仮想実験システムのプロトタイプにおいては、材料特性データベース群（合金組成 DB、合金組織構造 DB、物理的特性 DB、化学的特性 DB、機械的特性 DB）、解析ツール・データベース、ファイル管理データベース等のデータベースを構築している。

4 データ管理部の機能

4.1 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。

4.2 データベースへのアクセス

仮想実験システム上で構築した、ネットワーク上に分散している種々のデータベースに対して、統一的なユーザ・インタフェース上でデータの検索、登録、更新、削除が可能である。

4.3 データ抽出、データ管理機能

数値シミュレーションの計算結果、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。シミュレーション・ソフトウェア等の解析条件、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。図 4.1 に、シミュレーション・ソフトウェアのデータ管理の例を示す。数値シミュレーションの入力データ作成時のデータベースの参照、計算結果から必要なデータを抽出、これのデータベースへの登録等が可能である。

4.4 データベースのマージ機能

複数のデータベースをマージする機能である。合金組織 DB、物理的特性 DB、機械的特性 DB 等の複数の材料特性 DB から、必要なデータを抽出して一つのデータベースを構築することが可能である。

Virtual Experiment System for Materials Design
- Data management System -
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
nisikawa@crab.fuji-ric.co.jp

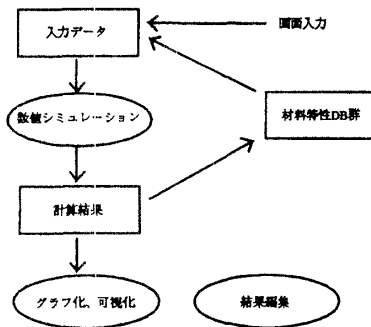


図 4.1 シミュレーション・ソフトウェアのデータ管理

5 データベースの構成

仮想実験システム データ管理部は、プラットフォームとして WWW サーバを基にしており、WWW サーバの CGI 機能を用いて、データベース・マネージメント・システムにアクセスする (図 5.1)。データベース・マネージメント・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。SQL を用いて、データベース・マネージメント・システムにアクセスすることを標準にすることにより、データベース・マネージメント・システムに対する柔軟性を持たせている。ユーザー・インタフェースに 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。

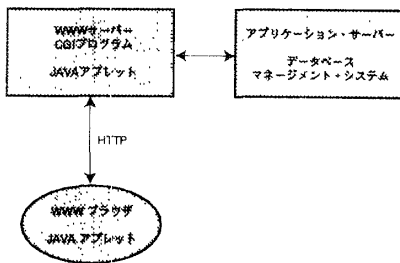


図 5.1 データベース・マネージメント・システムへのアクセス

6 材料設計におけるデータ管理の事例

現在、仮想実験システムのデータベース部は、物質・材料設計に必要なデータベース群を構築している。一連の材料設計手順に対応して、求めた材料特性を材料特性データベースに登録、参照できる。図 6.1 に、材料設計におけるデータ管理の例を示す。

7 おわりに

仮想実験システムの試作において、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等の統合化および相互参照が可能なデータ管理部を構築して

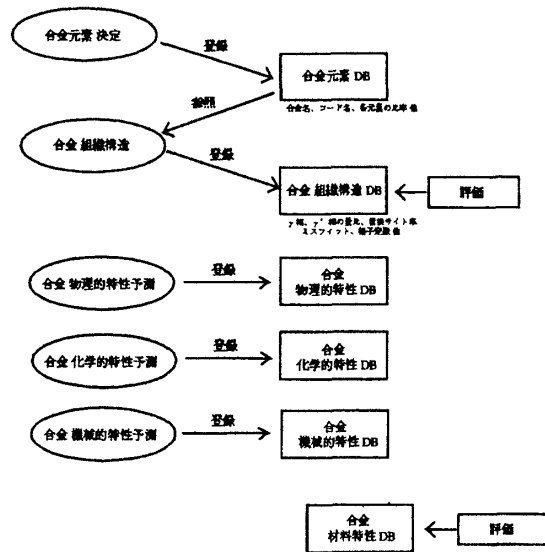


図 6.1 材料設計におけるデータ管理の例

いる。現在、仮想実験システムに組み込んであるツール群を対象に材料設計に必要なとされるプロトタイプを作成しているが、ユーザ定義によってデータベースの構築ができるなど、汎用的に設計および実装しているため、物質・材料設計以外の数値シミュレーションやデータベースに対しても応用可能である。

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 - ワークベンチ部 -. 情報処理学会 第 55 回 全国大会 講演集, 1997.