

物質・材料設計のための仮想実験システム — ステアリング機能 —

1 G-8

Virtual Experiment System for Materials Design
-A Steering System -西川 宜孝、鈴木 正陽、永田 毅、小池 秀耀
株式会社 富士総合研究所 計算科学技術研究センター

1. はじめに

数値シミュレーションにおいて、プログラムの実行中に、リアルタイムにプログラムの制御、計算条件の変更、可視化等を行うステアリング機能は、時間変化する現象を解析する上で重要である。近年のコンピュータの発達により、シミュレーションの高速計算、可視化の処理速度の向上により、シミュレーションのステアリングは実現可能となってきている。ステアリング・システムの応用例として、非経験的分子動力学とステアリング・システムを組み合わせた「バーチャル・マイクロ・スコープ」がある[1]。このステアリング・システムは、様々な数値シミュレーション・プログラムと組み合わせて、使用可能である。

我々は、ステアリング・システムの応用として、仮想実験システムにステアリング機能を実装した。

2. 物質・材料設計のための仮想実験システム

コンピュータを用いた物質・材料設計は、数値シミュレーションをはじめとして、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様々な要素技術を有機的に統合化して使用することが不可欠である。物質・材料設計の一連の設計手順をシステム上で実現し、物質・材料設計のための仮想実験が可能となる仮想実験システムのプロトタイプを開発している [3-4]。

仮想実験システムは、物質・材料設計に必要なとされる一連の作業を支援するために、設計シナリオの記述、設計手順の蓄積、再利用を可能とする「タスクフロー」という新しい概念を導入しており、数値シミュレーション等の解析ツール群、データベース・マネージメント・システムおよび材料特性データベース群、知識情報処理、結果編集ツール群、可視化ツール群、ステアリング・システム、ヒューマン・インターフェース等から構成されている[5]。図1に、仮想実験システムのシステム構成を示す。

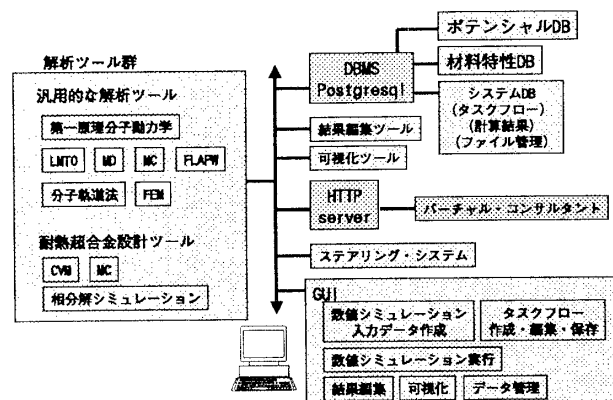


図1 仮想実験システムのシステム構成

3. ステアリング・システム

ステアリング・システムは、対話的に数値シミュレーションを制御するシステムであり、時間変化を追跡するシミュレーションにおいて、途中結果のリアルタイム表示、計算途中で計算条件等を変更することが可能である。従来は、計算終了時に計算結果を可視化し、結果の検討・評価を行っていたが、ステアリング・システムを用いることにより、計算と可視化を並列に実行し、計算途中において、計算結果を観察、評価することが可能である。

4. 仮想実験システムのステアリング機能

4.1 ステアリング・システムの構成

仮想実験システムのコンテンツの一つである分子動力学プログラム MXDTRICL (河村、JCPE より入手) [2] とステアリング・システムを組み合わせて、仮想実験システムに実装した。

ステアリング・システムは、制御部とヒューマン・インターフェースから構成される。制御部は、解析条件制御、表示画面制御、解析プログラムとヒューマン・インターフェース間の通信の制御を行う。図2に、ステアリング・システムの構成を示す。ヒューマン・インターフェースは、入力データ指定、解析条件入力、分子構造および計算結果の表示を行う。解析プログラムとヒューマン・インターフェース間の通信にはPVMを、グラフィック・ライブラリにはOpen Inventorを用いている。

Nobutaka Nishikawa, Masaharu Suzuki, Takeshi Nagata,

Hideaki Koike

Center for Computational Science and Engineering,

Fuji Research Institute Corporation

2-3 Kandamishiki-cho, Chiyoda-ku, Tokyo 101-8443

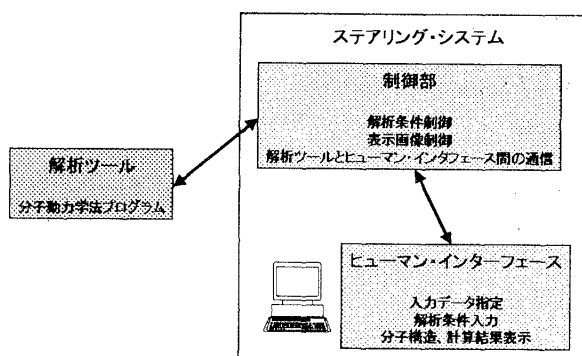


図2 ステアリング・システムの構成

4. 2 ステアリング・システムの解析条件制御

解析データは、入力データによって指定され、この他に、解析結果表示条件を指定できる。解析結果表示条件の指定では、計算途中の解析結果のグラフィック表示の指定を行う。計算途中においては、以下の操作、変更が可能である。

- 計算の停止、開始
- タイムステップの指定
- 圧力、温度条件の変更
- 解析結果表示条件

4. 3 ステアリング・システムの解析結果表示

解析結果は、リアルタイムにグラフィック表示される。分子構造の表示モデルは、ball and stick モデル、space filling モデル、stick モデル、wire frame モデルであり、各原子の速度ベクトルの表示も可能である。グラフ表示として、温度、圧力、クーロンエネルギー、短距離相互エネルギー、3体力エネルギー、運動エネルギー、全エネルギー、密度等の物理量の時間変化のグラフ表示が可能である。

また、表示結果の VRML ファイルによる保存、アニメーション・ファイルの作成が可能である。

5. ステアリング機能を用いた解析事例

NaCl を対象に、仮想実験システムのステアリング機能を用いて、解析を行った。Na 108 原子、Cl 108 原子、温度は 300K から 10 ステップ毎に -1K 変化させ、圧力は 1Pa で定圧の条件で計算を行った。図3は、ヒューマン・インターフェースと初期状態の分子構造表示である。図4は、100ステップ後の分子構造表示である。相互作用モデルは、BUSING モデルである。数ステップ毎に分子構造を表示することにより、温度降下による分子の挙動を観察することが可能である。

6. おわりに

ステアリング・システムの応用として、分子動力学プログラムとステアリング・システムを組み合わせ、仮想実験システムに実装した。計算途中における解析結果のリアルタイムの可視化、計算条件の変更等により、

時間変化における計算結果の観察、評価が可能となり、数値シミュレーションにおけるステアリング機能の有効性が確認できた。

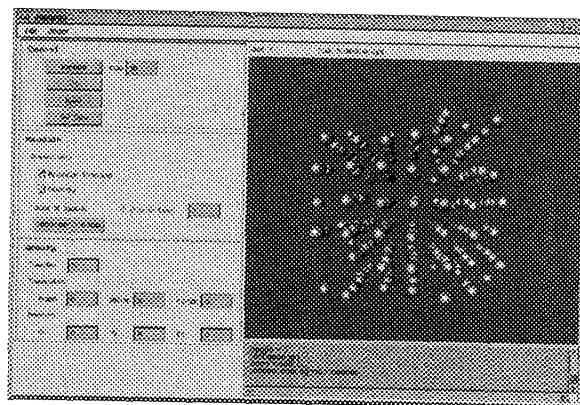


図3 制御画面および解析結果表示（初期状態）

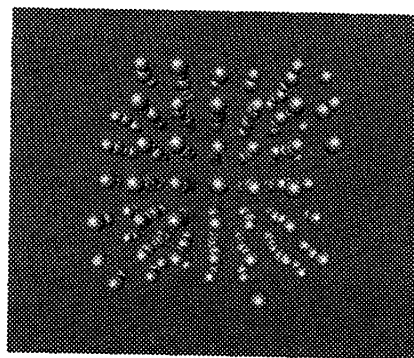


図4 計算結果表示（100step）

謝辞 本研究は、科学技術庁の平成10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から委託を受けて実施したものである。

参考文献

- [1] 助村, 加藤, 松原, 小池, 佐久間, 平原, 関口: バーチャルマイクロscopeの制御手法の開発, 第66回情報処理学会ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, (1997)
- [2] 平尾, 河村: パソコンによる材料設計, 裳華房, 1994
- [3] N. Nishikawa, C. Nagano and H. Koike: Integration of Virtual Experiment Technology for Materials Design, Computerization and Networking of Materials Databases, ATSM STP 1311, 1997
- [4] 西川, 小池: 物質・材料設計のための仮想実験システムの開発, 計算工学講演会論文集 Vol.3, 1998
- [5] 小池, 西川, 永田: 物質・材料設計のための仮想実験システム - システムの機能および実装方法 -, 情報処理学会 第58回 全国大会, 1999