

科学技術計算のための統合プラットフォームの開発*

松澤 邦裕[†], 小池 秀耀[†], 大須賀 弘[†], 大家 史[†]

アドバンスソフト株式会社[‡]

1. はじめに

近年の計算機環境（ハードウェア）の発展に伴い、現実の複雑な形状をそのまま扱うことや、複数の物理過程にまたがるようなマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションを行うことが可能となっている。しかし現状では、実用的なレベルでのこのようなシミュレーションは普及していない。マルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションを実現するためには、様々なシミュレーション・ソフトウェアを駆使することが必要不可欠である。しかしこの方法の問題点として、ソフトウェア間での入力・出力データのフォーマットが異なっているため、データ交換にはフォーマットの変更が必要になるという点が挙げられる。また、複数のソフトウェアについての操作方法を熟知しなければならず、ユーザに対する負担は大きい。このようにマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションの普及を妨げる要因となっているものは、計算科学の本質とは異なる障壁であると考えられる。

そこで本研究では、マルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションを、ユーザの思考を妨げることなくスムーズに行うことができるような統合プラットフォームを開発することを目的としている。これは、直感的なGUIを通して、ネットワーク上に分散した様々なリソース（シミュレーション・ソフトウェア、データベース等）を駆使したマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションが実現でき、その解析手順や結果データなどの管理・再利用できるシミュレーション環境である。この環境は、産業用機械設計システムとして構築され、企画、開発、設計、研究におけるデジタルエンジニアリングを実現するプラットフォームの役割を担う。この統合プラットフォームは、PSE Workbenchと名付けられ、開発が進められている。

2. 統合プラットフォームの概要

図 1.1 は、この統合プラットフォームが行うマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションの全体概要を示したものである。このプラットフォームの最終目的は「産業用機械設計システム」である。そのため、益々需要が高まると思われる大規模・複雑なシミュレーションを行うためのスーパーコンピュータ用の GUI と、メッシュ生成プログラムを含めたものとしてシステム化することが望まれる。ここに示されている様々なソフトウェア群は、様々な物理法則を網羅するように考えられており、マルチフィジックス・マルチスケール・シミュレ

ーションを実現する。今後の発展として、CAD や機構解析のための外部プログラムと組み合わせ、より全体系の機械設計シミュレーション・システムを目指していく。

このシステムの要点は、

- 実用的なマルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーションの実現のため、様々な物理現象を計算するソフトウェアを実装すること、
- それぞれのソフトウェアの入出力の取り扱いや実行などの操作性を直感的な GUI により提供すること、
- シミュレーション・ソフトウェア間におけるデータのインコンパチビリティの解消し、スムーズなデータ変換に対応すること、
- 作業方法や計算結果データをログや履歴として保存し、再利用やテンプレートとしての活用を可能とすること、
- シミュレーション結果からのフィードバックが可能な制御系機能を実装すること、
- 最適化機能を実装し、様々な指標（パラメタ）を用いてユーザ関数を作成できる機能を持つこと、

である。

システムの全体概要図を図 2.1 に示す。これは、外部ホストや計算機サーバなどのネットワーク・リソース層の上に、4つの階層（ワークベンチ、制御、情報管理、ツール）があり、それらを組み合わせ利用しあい、全体の操作を実現するアーキテクチャが示されている。

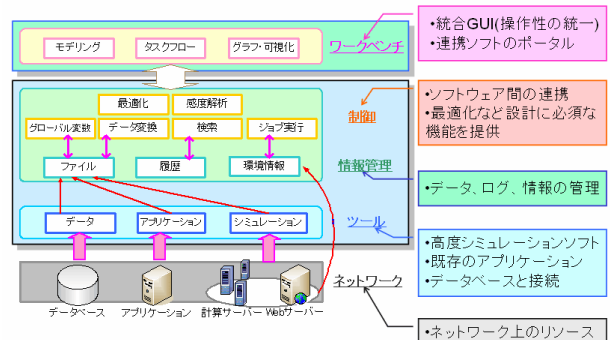


図 2.1 統合プラットフォームの全体概要図

2.1. タスクフロー

大規模なシミュレーションでは、一連の処理（タスク）をある手順に従って実施することにより計算を行う。このタスクの定義と、一連のタスクの作業手順（タスクのつながり）を視覚化したものがタスクフローである [1]。各タスクでは、そこで使用するシミュレーションソフトウェアやデータベースなどを定義することができる。タスクには解析のノウハウをテキスト形式で記述することができるため、実用的な知識ベースとして利用することもできる。タスクフローは GUI 画面上で、自由に

*Development of Integrated Platform for Simulation Science

[†]Kunihiko Matsuzawa, Hideaki Koike, Hiroshi Ohsuga, Fumito Ohya

[‡]AdvanceSoft Corporation, Kowa 16th Bld.-South 7F, Akasaka 1-9-20, Minato-ku, Tokyo, 107-0052, JAPAN
E-mail: kmatsu@advancesoft.jp

変更・保存することが可能であり、以前作成したタスクフローをテンプレートとして再利用することで解析作業の効率化を図る。ソフトウェアを複数組み合わせた解析に関しては、データや変数の受け渡しを視覚的に表現することで、解析手順とその意味付けの理解を助け、効率の良い解析作業を実現できる。また、初期条件ファイルの一部を書き換えただけでの繰り返し実行や、入力・出力でのパラメタの受け渡しに必要なファイルを変換するなどの単純作業を自動化することを実現するための機能を提供する。

2.2. シミュレーションソフトウェアの実装

本研究が行われている、文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発プログラム「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」と、それに先駆けて行われていた「戦略的基盤ソフトウェアの開発」の両プロジェクトでは、科学技術の基盤となる世界最先端のシミュレーションソフトウェアを開発している。実装したソフトウェアはランチャーに登録され、ソフトウェア一覧として表示されており、ユーザが行いたいシミュレーションを適切に選択できる最適化システムとして画面構成がされる。

2.3. 最適化、制御系機能

例えば、産業用機械設計を行うにあたり、トータルコスト削減を目指すには、設計期間の短縮、製品コストの削減、製品の品質向上が重要なテーマとなる。性能検査の繰り返しで製品開発を行っていた時代には莫大であった試作コストや安全性の確認作業（時間、費用とも）が、近年のシミュレーション技術の発達により、大きく削減することが可能となった。品質向上とコスト削減には、材料コスト製造コストだけでなく、化学物質などの環境へ影響のある物質の量など様々な要素がある。このような要素を総合的に判断して結論を導くために、最適化機能により適切な方針を選択し、作業の自動化と、リソースや計算時間の効率化に貢献する。最終的には、感度解析の実現を展望とする。

また、効率的な産業用機械設計を行うために、設計、検証、実装までを統合化し、ラピッドプロトタイピングや Hardware-in-the-Loop-Simulation (HILS) と呼ばれる方法を利用して、性能と妥当性の検証を行うことができる環境が求められている。大規模システムのモデリングや制御システムの開発においては、様々なシステムの混在シミュレーションにより、効率的にモデリングや相互シミュレーションすることが必要となる。こういった制御系機能を開発するにあたり、数値解析を図形化し、また制御対象を視覚的かつ動的に制御することを実現する。

2.4. 統合 GUI

統合 GUI は、ユーザの思考をそのままインタラクティブな作業に置き換えられるような GUI、すなわち直感的でわかりやすい操作方法でファイルやファイルに記述されているデータを取り扱うことができるような GUI を実現する。画面例を図 2.2 に示す。

データ管理機能では、データ管理、ログ管理、テンプレート管理を行う。データ管理は、クライアントからのジョブ命令を管理し、実行中のソフトウェアからの計算結果、及びログを管理しておく機能である。ログ管理機

能は、ユーザ自身の作業を管理しておき、どのようなことを行ったかを事後確認することを可能とする機能である。

テンプレート管理機能は、作成したタスクフローや作業の工程をテンプレートとして利用できる機能である。作業中に、全体システムから発生したデータを保存しておき、蓄積する。また、保存されたデータを活用し、検索機能やナビゲーション機能により、解析作業の効率化に利用することができる。

これらデータ管理機能は、最終的なシミュレーション形態で実現を目指している、最適化、感度解析やパラメータ・サーベイには欠かせない機能である。これらを行なうにあたり、複数の解（データ、任意の出力）を比較するため、同じソフトウェアを繰り返し動作させる過程では、入出力ファイルを消去しないように別途保管し、必要に応じて取り出せることができるようにする。

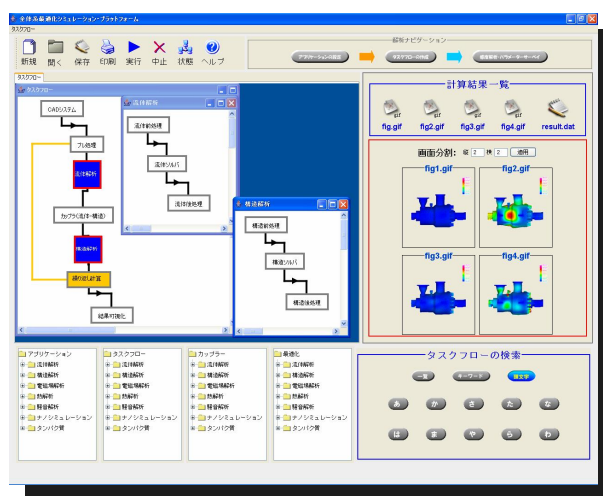


図 2.2 PSE Workbench の画面例

3. おわりに

本研究の成果により、様々なソフトウェアやデータベースを組み合わせるマルチフィジクス・マルチスケール・シミュレーションに対し、直感的な GUI を通して、ユーザの思考の流れをそのまま表現するような解析作業を実現することができる。これを利用することで、設計過程でのデジタルモックアップやラピッドプロトタイピングのための足掛かりとなる。今後は、実証例題を数多く行い、より実用的なシステムへと改良を図る予定である。

参考文献

[1]N. Nishikawa, C. Nagano and H. Koike: Integration of Virtual Experiment Technology for Materials Design, Computerization and Networking of Materials Databases: Fifth Volume, ASTM STP 1311, pp.21-27, 1997.

謝辞

本研究は、文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発プログラム「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」において実施された。ここに記して感謝する。