

《シミュレーションの世界》

数値シミュレーションプログラムを作るプログラム —プログラミングからの開放を目指す問題解決環境 (PSE) の世界—

川 田 重 夫*

ABSTRACT Recently the world of problem solving environment (PSE) for numerical computer simulation has been explored extensively in computational science and engineering. A PSE is a computer system that assists scientists and engineers to solve a target class of problems, for example, problems based on partial differential equations. PSEs have a promising potential to be a reliable infrastructure for science and technology in the near future. Toward this end of realization for a programming-free environment, several PSEs have been developed including NCAS, PSILAB, ELLPACK, V-LAB, FEEL, VECFEM, DISTRAN and so on. In this article we introduce recent activities for PSE research and development in Japan including our study on NCAS system. Each PSE has its own characteristic feature: for example, NCAS is a white box PSE, every sub-process and its result are visualized and can be steered, and readable source programs are also designed and generated, although some of other systems are black box systems. At present Japan also has a research group for PSEs and the first PSE workshop was held in 1998 organized by the group (see <http://skkd1.ishii.utsunomiya-u.ac.jp>).

1. 問題解決環境 (PSE) の世界

コンピュータシミュレーションは実験・理論に次ぐ第3の手法として認識されて久しい。現在ではすでに“市民権”を得たと思われる。コンピュータシミュレーションは、実験で観測の難しい量の情報を得るためや理論的に手では解けない非線型問題等を解くために、欠かせない重要な手法である。この意味でシミュレーション技術は既に科学工学の基盤技術の一つになっている。特に米国では本年以降国家プロジェクトとしてサイエンティフィックシミュレーションイニシアティブと称して、この基盤技術の大規模に支援しシミュレーション技術においても世界を更にリードしようとしているとのことである。

コンピュータシミュレーションでは、さまざまな要素技術を用いて問題解決が行われる。我々は20年ほど

前に、コンピュータシミュレーション手法を更に発展させ、シミュレーション支援環境さらには問題解決環境 (Problem Solving Environment (PSE)) を研究開発し利用するという着想を得た。当時 PSE 研究の必要性を痛感したのは、コンピュータシミュレーションを行うたびに、モデル化後、人間がかなりの労力と時間を費やしてプログラムを作らねばならないことに、疑問を感じたことが最初であった。C や Fortran や Lisp・Prolog などの言語は必ずしも人間にとってやさしい問題解決環境を提供しているとは言い難い。人間は発掘した問題の本質を捕まえ、プログラミングなどには手をわずらわせずに、問題解決を行うべきものであると考えられる。手で解析的に解けないときは、コンピュータで解こうとするが、現在ではモデル化からコンピュータで問題解決を行うまでに、大きな壁が存在している。この意味では、問題解決環境という観点からすれば、現在のコンピュータでもまだ“本物”にはなっていない、あるいは十分“進化”しきっていないと考えられる。

PSE は、このような現状を打破し、さまざまなシミュレーション問題の解決をより容易に行うための実行環境を提供するものである。PSE 研究は、計算科

Problem Solving Environment (PSE) in Computational Science and Engineering—Toward a Programming-Free World in Scientific Simulation—. By Shigeo Kawata (Dept. of Electrical & Electronics Engineering, Utsunomiya University).

*宇都宮大学工学部電気電子工学科

学・工学の重要な一分野として成長し、Virtual Engineering のひとつと考えられる。PSE はコンピュータシミュレーションを手助けするシステムであり、究極的にはプログラミングフリーシミュレーションやシミュレーションパッケージの使いづらさからユーザを開放することを目的としている。PSE の考え方が広まるにつれ、コンピュータシミュレーションの実行環境に変革をもたらす可能性を秘めた新たな世界が広がりがつつある。現在すでに NCAS^{1~4)}、PSILAB^{5~7)}、ELLPACK^{8,9)}、V-LAB¹⁰⁾、FEEL^{11,12)}、VECFEM¹³⁾、DISTRAN¹⁴⁾などのシステムが研究開発されている。それぞれ特徴があり、例えば著者らによって研究されてきたプログラミングフリーシミュレーションを目指した NCAS は数学モデルからプログラムを作ってくれる PSE である。

PSE は、さまざまな要素の統合システムであると同時に、実問題からの要請を満たす必要もある。要素の統合の際に新たな問題が生じることは良くあることであり、PSE の性格から言って実問題からの要請を取り入れることも重要であると考えられる。一方、問題解決プロセスは、問題の本質の把握（工学・物理モデル化）、数学モデル化、計算モデル化（離散モデル化・アルゴリズムの設計・計算の流れ）、プログラミング、コンピュータシミュレーション、デバッグ、結果の可視化・解析、からなる。扱おうとする、あるいは構築しようとする PSE はどこからどこまでを支援する環境かを明確にする必要がある。また PSE にはさまざまな性格の PSE が考えられる。例えばブラックボックス的 PSE にするか、人間との相互作用を重視してグレイボックス PSE あるいはホワイトボックス PSE にするかなど、いかなる PSE の性格を選択するかも重要である。PSE の性質によって開発する PSE の性格が大きく異なると同時に、研究開発技術・手順・工程も大きく異なる。また対象となるユーザの範囲も PSE の性格に大きく影響する。これらのことを十分考慮し効果的な PSE を効率的に開発することが重要である。

PSE 研究・開発は上記のように単なる要素の集合体ではなく、要素の統合システムであり、PSE 研究から新たな要素技術の必要性が生まれる場合もある。工学各領域と情報技術の境界に位置する応用研究であるが、一つの重要な研究分野として位置づけ、発展させる必要があると考えている。更に実システムとのつながりが強いことから、要素技術と実・応用システムとの接点あるいは架け橋としての重要な役割が期待さ

れる。

PSE の着想を得た当時はコンピュータパワーが十分でなかったため、満足のゆく PSE を構築することはできなかった。この 8 年ほどの間に PSE 構築のためのコンピュータ環境が良くなり、PSE 研究会なるグループが作られ (<http://skkd1.ishii.utsunomiya-u.ac.jp> 参照のこと)、我々は NCAS システムを研究・開発できるようになった。この PSE 研究グループ主催により多数の方の参加を得て昨年は Workshop を行なった。来年度には国際 Workshop も計画されている。海外での PSE 研究も盛んであり、米国ではライス教授・フースティス教授らの強力な研究グループ他が ELLPACK を中心として活躍している^{8,9)}。近々米国政府のイニシアティブのもと PSE と計算科学に対する大規模なサポートが開始されるとのことであり期待したい。ヨーロッパでもショーナウアー教授らの VECFEM¹³⁾など、多数の研究開発が行われている。次章以降では日本での PSE 研究グループの活動と具体的な PSE の世界の例として我々の NCAS システムについて紹介する。

2. PSE の一例：ホワイトボックス NCAS

我々は現在までに数値シミュレーション支援環境 NCAS システムを開発してきている^{4~7)}。本システムは、偏微分方程式問題を入力し、数値解析を行う数値シミュレーションプログラムをユーザに提供する。NCAS システム内で偏微分方程式や境界条件の離散化や数式変形等様々な処理等を行う。NCAS では、入力される問題自身や内部で行われるプロセスの有用な情報・プログラム自身すべてを可視化し、ユーザによるプロセスの一部変更等のステアリングを可能にしている。これによりユーザに多くの有用な情報を提供すると同時に、ユーザが望めば項の追加削除変更・離散化の変更・プログラムの流れ・自動生成されるプログラム等の変更を可能にし、数値シミュレーションの支援を行う。

図 1 は SMAC 法で 2 次元非圧縮性流体の振る舞いをシミュレーションするための問題記述画面である。各式にそれぞれの“ソルバーセット”を割り当て境界条件などを記述してゆく。式は独自の式エディタによって入力でき違和感無く可視化される。また式や記号・境界条件あるいは内部での情報などすべてのデータはツリー構造を取っており、式にも意味を持たせてある。これにより問題入力時にユーザが定義した記号とその意味に矛盾する入力ミスを無くしている。一般的

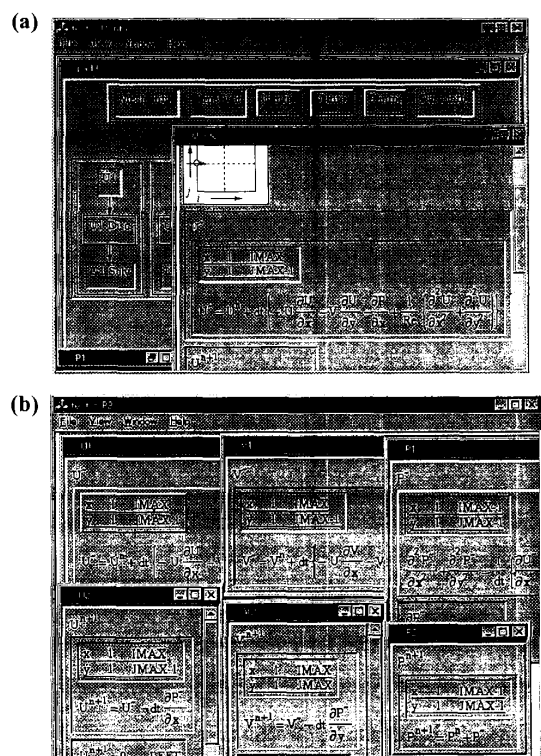


図1 NCASシステムにより、SMAC法で2次元非圧縮性流体の振る舞いをシミュレーションするための問題記述画面、この場合は解かれるべき6つの変数に対応して6つのソルバーセットが必要になる。NCASでは式や記号等にも意味を持たせてある。これにより問題入力時にユーザが定義した記号とその意味に矛盾する入力ミスを減らすことができる。多変数を解く場合は式同士の依存関係を解析することによって、解くべき式の順番も自動的に決定され、プログラムの設計にNCAS内部で使われる。

な数学規則のルールもNCASには持たせてあり、単純な数学的な記述のエラーを防止することができる。これはNCASをシミュレーションを学習しようとする初学者への教育的な目的にも利用したいという配慮から実装した。図2は計算アルゴリズムの可視化及びプログラムの可視化例である。図1の例のように多変数を解く場合には、離散化式を整理した後、依存関係を解析し生成するプログラムの設計を行なう。すなわちまずある変数をとき、その後に次の変数を解く、などの計算の順番もNCAS中で解析スキームに依存してプログラムを設計する。プログラム自身はPAD図で可視化され、他の可視化情報と同様にPAD図の段階でもステアリングできる。途中のステアリング結果はすべてのデータに伝播され矛盾が生じないようにしている。図3にはプロセス結果の一部のステアリング(変更)を行なっている例を示す。最終的にはプログラムが生成され、ユーザに提供される。現在はC

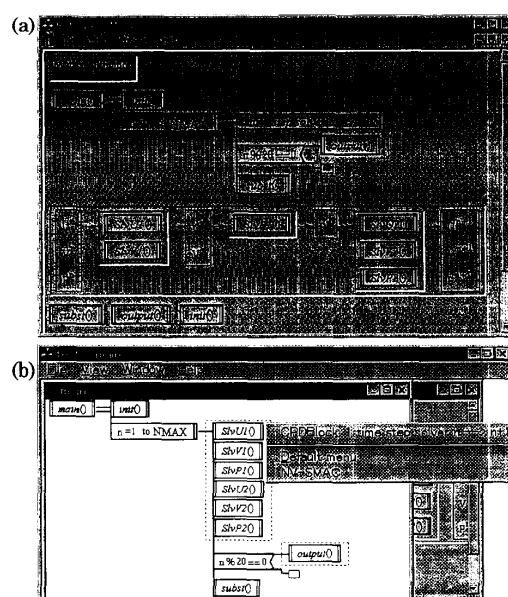


図2 NCASシステム内での計算アルゴリズムの可視化及びプログラムの可視化例、プログラムはPAD図で可視化される。この段階でもプログラムの変更(ステアリング)を行うことができる。

言語のプログラムのみを生成している。生成されるプログラムには2種類あり、デバッグモードを選択してプログラムを生成するとある配列の計算の途中結果を2次元グラフィックスで可視化できる。これはユーザが入力した問題そのものを変更するときどのように変更すべきかの指針として利用できる。

NCASではすべてを可視化しステアリングを可能にするという考え方を提案し、実現してみた。シミュレーションを行なう際にプログラミングをしなくて間違いの無い目的とするシミュレーション結果を得たいというのが、本研究の出発点であった。ある程度、この目的は達成されたものの、いくつかの問題も残った。第一の問題はNCASシステム自身が巨大になり、NCASのメンテナンスに労力がいようになってしまったことである。NCAS自身オブジェクト思考にのっとり、差分プログラミングが行なえるようにしてあってもこの問題は解消されなかった。これに対しては我々はすでにアイデアを得て以下の提案を行なっている。NCASなどのPSEをいくつかのサブシステムに分割し、分割されたサブシステムをマイクロインタフェースとも呼べるエージェントによりインタフェースを取る方法により、各サブシステムの独立性を高めシステムのメンテナンスをより容易にできる。また現在では、並列のプログラムを生成するためのPNCASや新たなメッシュ生成法、新たな可視化方法、

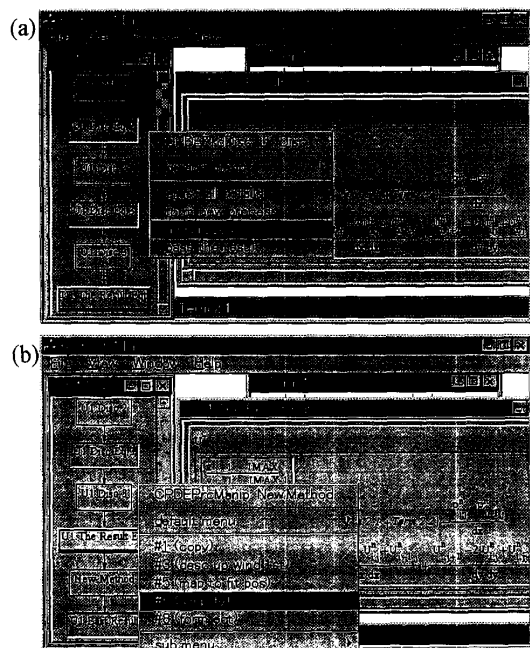


図3 プロセス結果の一部のステアリング(変更)を行なっている例。

モデル化支援システム、分散処理対応のPSEなど多くの研究を共同研究者らと共同で進めている。

3. 日本におけるPSE研究グループの活動

数年前にPSEの研究グループの必要性が複数の研究者・技術者から提案され、金沢大学の田子教授(日本の計算科学の伝道師)・静岡大学の梅谷教授(日本初のPSEであるDEQSOL(現PSILAB)の設計開発者)及び企業からの有志及び著者らを中心としてPSE研究会が発足した。昨年には第1回PSE Workshopを金沢で開催し、多数の方々の参加を得て盛況であった。論文集も出版されている¹⁵⁾。1999年度には米国・ヨーロッパのPSE研究者の参加を募って、第2回PSE Workshopを開催する予定である。この研究グループや活動の様子は<http://skkd1.ishii.utsunomiya-u.ac.jp>, <http://www.tsuyama-ct.ac.jp/teramoto/pse/>を参照願いたい。またPSE仲間のメーリングリストもあり興味のある方もこのホームページを参照頂きたい。

1999年には計算科学・工学とPSEに関する本を出版することにしており、海外からの原稿を含め主だったPSEや計算科学の研究開発者の現在の成果と活動に関する原稿が収められる予定である¹⁶⁾。更に、日本計算工学会の協力を得て産学で研究分科会「計算機シ

ミュレーション支援システムの調査・研究」を田子教授らが中心となって発足させた。

日本に現存する主なPSEは5つあり、PSILAB, V-LAB, FEEL, DISTRAN及び上記のNCASである。PSILABのみが現在商用のシステムであり、有限要素法と差分法によるシミュレーションをサポートしている。FEELは有限要素法をサポートするシステムで、現在ではウェブからも利用できるようになっている。V-LABは既存のシミュレーションソフトウェアパッケージや可視化システムなどを有効に活用するために既存のシステム間のインタフェースフレームワークを構築する。DISTRANは並列シミュレーションをサポートしている。各システムの特徴は文献¹⁷⁾に詳しい。

4. おわりに

PSE研究開発が現在ほどに関心を集め発展した背景には、コンピュータパワーのめまぐるしいほどの増強の影響もあるが、コンピュータシミュレーションパワーが実際に“使える”技術であり研究と開発に際し欠かせない手段として既に組み込まれているという事実がある。現在に“もの”作りに際しても、コストの削減・開発期間の短縮・効率化にシミュレーションパワーが無くてはならなくなっている。もちろん、実験的な手法と理論的な手法とは従来通り必要であり欠かせないのは当然であるが、第3の手法であるシミュレーション手法に対する現実的な必要性が背景にある。これに伴い、シミュレーションを行なう際の時間と労力をなんとか削減したいという要求が新たに出てきた。これをなんとかしようとするのがPSEの目的である。メッシュ生成に半年もかかり、あるシミュレーション手法を勉強するだけで何ヶ月もかかり、プログラミングにまた数ヶ月をかけ、あるいはパッケージを使いこなすだけでも数ヶ月を要し、結局結果を得るまでに1年以上をかける、という現状に疑問を持つ人が増え、我慢できなくなっているのである。連成問題などのようにいくつもの物理現象が絡み合った問題を解こうとしたとき、既存のパッケージの組み合わせでは解決できないので、困っている、どうしたら良いかとの相談を受ける場合もある。現実的にこういった問題を解決することをPSE研究は目指している。今後の基盤技術の一つとしてのPSEに期待してほしい。

なお本研究は、長年パートナーとして一緒に研究を行ってきたタマサート大学のブンミー先生、NCAS-

FEM を研究開発した波井君, 現在並列 PSE やモデル化 PSE の研究を進めている藤田君他の諸君, さらに他大学で PSE の研究をサポートしてくれている寺元・松本・早勢・真鍋先生, また古くから計算科学の立場から応援してくださり現在では NCAS の共同研究者の田子教授・鳥山さん (金沢大学), 他にも梅谷教授 (静岡大学), 富士通の煤生さん・南さん・広田さん・沼田さん・内山さん・柳沢さん・彦坂さんと同僚の方々, 構造計画研究所の鈴木さん (PSE 研究グループ内で推進中の「計算機支援問題解決環境 CAPSE の構築」プロジェクト (情報処理振興事業協会 (IPA) 次世代デジタル応用基盤技術開発事業) の代表者)・保志さん・藤井さん他の方々, 日立超 LSI システムズの石田さん・平山さん・山賀さんと同僚の方々, 三菱総合研究所の斎藤さん他の方々など, 多くの方々との議論と研究そしてサポートのもとに現在があることを申し添えて感謝したい。

参 考 文 献

- 1) C. Boonmee and S. Kawata: Computer-Assisted Simulation Environment for Partial-Differential-Equation Problem: 1. Data Structure and Steering of Problem Solving Process, Trans. of the Japan Society for Computational Engineering and Science, Paper No. 19980001 (1998)
- 2) C. Boonmee and S. Kawata: Computer-Assisted Simulation Environment for Partial-Differential-Equation Problem: 2. Visualization and Steering of Problem Solving Process, Trans. of the Japan Society for Computational Engineering and Science, Paper No. 19980002 (1998)
- 3) C. Boonmee, S. Kawata, S. Fujii, Y. Manabe and Y. Tago: Visual Steering of Simulation Process in a Scientific Numerical Simulation Environment, accepted by IEEE Computational Science and Engineering (1999)
- 4) C. Boonmee and S. Kawata: Computer-Assisted Simulation Environment for Partial-Differential-Equation (PDE) Problem: 1. PDE Problem Description and Program Generation, 日本計算工学会講演会論文集, 2-2, 689/692 (1997)
- 5) C. Konno, M. Yamabe, M. Saji, N. Sagawa, Y. Umetani, H. Hirayama and T. Ohta: Automatic Code Generation Method of DEQSOL (Defferential EQUation SOLver Language), J. Information Processing, 11-1, 15/21 (1987)
- 6) 金野, 梅谷, 太田, 深田, 山賀, 池田: 対話型数値シミュレーションシステム: ビジュアル DEQSOL, 情報処理学会論文誌, 33-7, 929/943 (1992)
- 7) 大河内, 金野, 猪貝: 高水準数値シミュレーション言語 DEQSOL の並列計算機向けトランスレータ, 情報処理学会論文誌, 35-6, 977/985 (1994)
- 8) J. R. Rice and R. F. Boisvert: Solving Elliptic problems Using ELLPACK, Springer-Verlag, New York (1985)
- 9) E. N. Houstis, J. R. Rice, S. Weerawarana, A. C. Catlin, P. Papachiou, K.-Y. Wang and M. Gaitatzes: Parallel (//) ELLPACK: A Problem Solving Environment for PDE Based Applications on Multicomputer Platforms, <http://www.cs.purdue.edu/research/cse/pellpack-/paper/pellpack-paper-1.html> (1999)
- 10) 保志: 科学・工学のための問題解決環境の構築, 第一回問題解決環境ワークショップ論文集, 13/18 (1998)
- 11) 藤尾: 有限要素問題記述言語 FEEL の機能とシステム構造, 第一回問題解決環境ワークショップ論文集, 19/24 (1998)
- 12) 藤尾: FEELWEB ホームページ, <http://www.ppc.nec.co.jp/feelweb/>, (1999)
- 13) W. Schoenauer: VECFEM Home Page, <http://www.uni-karlsruhe.de/~numerik/vecfem/index.html>, (1999)
- 14) 鈴木, 山崎, 弓場, 村田, 朴: DISTRAN システムの並列計算機上への実装, 並列シンポジウム JSPP '91, 301/308 (1991)
- 15) 田子, 川田: 第一回問題解決環境ワークショップ論文集, <http://superdry.s.kanazawa-u.ac.jp/PSE/ronbun.html>, (1998)
- 16) 川田, 田子, 梅谷: コンピュータで科学するー計算科学 (コンピュテイショナル・サイエンス) ー, サイエンス別冊出版予定 (1999)
- 17) 田子: 問題解決を手助け計算科学における問題解決環境 (PSE), 電子情報通信学会誌, 平成11年4月号掲載予定 (1999)