



文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発
 「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」
 全体系最適化シミュレーション・プラットフォーム PSE Workbench 5.1
 Research and Development for Next-generation Information Technology of MEXT.
 “Revolutionary Simulation Software”
 –Integrated Platform for Multi-scale and Multi-physics Simulations,
 and Optimization–

東京大学生産技術研究所 ————— 計算科学技術連携研究センター

分類	シミュレーション環境
キーワード	PSE、最適化、統合プラットフォーム
開発者	小池秀耀、松澤邦裕、大須賀弘、大家 史
作成年月	2007年12月
コード名	PSEWorkbench5.1
使用言語	C#、Java、C++、Fortran

◇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支援する統合プラットフォーム

「戦略的基盤ソフトウェアの開発」、「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」両プロジェクトで開発された大規模シミュレーションソフトウェアを最適に選択することで、目標とするシミュレーションを実行できる環境を提供する。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。

本ソフトウェアは、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」プロジェクト (<http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/>) により、2007年12月に公開を予定している。

◇PSE Workbench の概要

PSE Workbench では、解析のプロセスを可視化するタスクフロー⁽¹⁾⁽²⁾により、試行錯誤から得られた解析方法をノウハウとして保存・再利用でき、またテンプレートとして活用することができる。要点として、①マルチスケール・マルチフィジックス・シミュレーション実現のため、多様な物理現象を計算するシミュレーションソフトウェアを実装すること、②ソフトウェア間の入出力データの直感的な取り扱いを実現するユーザ・インターフェイスを提供すること、③ソフトウェア間におけるスムーズなフォーマット変換に対応すること、④作業方法や結果データを履歴として保存し、再利用できる機能を開発すること、⑤対象システム全体の機能を制御したシミュレーションや、数式を図形表現する機能を開発すること、⑥実用的な最適化アルゴリズムを有し、結果のグラフ化、その比較検討が出来る機能を開発することが挙げられる。

◇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, ASTM-STP 1311, 1997
- (2) Kiyoshi Matsubara, Kumi Itai, Nobutaka Nishikawa, Akifumi Kato, Hideaki Koike: DEVELOPMENT OF INTEGRATED PLATFORM FOR COMPUTATIONAL MATERIAL DESIGN, International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications SNA, 2003

表1 PSE Workbench の概要

項目	内容
クライアント PC の利便性向上とレガシーシステムとの融合	ネットワーク上のリソースへのアクセスは一般的なプロトコルで行うため、スムーズな導入が可能。
実用ソフトの実装	「戦略的基盤ソフトウェアの開発」、「革新的シミュレーションソフトウェアの研究開発」両プロジェクトの成果を実装。
直感的なグラフィカル・ユーザ・インターフェイス (GUI)	実装したシミュレーションソフトウェア間の入出力データの受け渡しや、グローバル変数の利用などを、直感的な操作方法として提供。
ソフトウェアを連携したシミュレーション	シミュレーションソフトウェア間における、異なるフォーマットのデータ交換の仕組みを開発。
データやノウハウの蓄積	結果データや作業ログを履歴として保存しておくことで、解析の効率化と、ナレッジ、ノウハウの保存・再利用を実現。
対象システムのモデル化	対象システムのモデル化を GUI 上の操作で構築でき、また制御系システムを視覚化表現する機能を開発。
最適化設計の実現	設計における最適なパラメータを探り、多次元の比較を可能とする機能を開発。

