

JAERI-Conf

JP0450387

2004-003



第4回創造的研究のための大規模
データマネージメント
シンポジウム論文集
2002年9月2日-4日、
光量子科学研究中心、京都

2004年3月

光量子科学研究中心

日本原子力研究所

Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問合せは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 〒319-1195, Japan.

©Japan Atomic Energy Research Institute, 2004

編集兼発行 日本原子力研究所

第4回創造的研究のための大規模データマネージメントシンポジウム論文集
2002年9月2日・4日、光量子科学研究所センター、京都

日本原子力研究所関西研究所
光量子科学研究所センター

(2004年1月27日受理)

この論文集は、2002年9月2日から4日の3日間、京都の関西研究所光量子科学研究所センターで開催された第4回創造的研究のための大規模データマネージメントシンポジウムの論文10本をまとめたものである。本シンポジウムは、民間及び公的研究機関の研究者およびその関係者が大規模データ処理や可視化を伴う実験や研究及びその基盤を支えるネットワークなどの大規模データマネージメントに関する最新の研究、技術について報告し、情報交流を行うことを目的としている。

本シンポジウムの構成は、講演およびパネルディスカッション、実験室・スーパーコンピュータ施設見学、併設科学館であるきつづ光科学館ふとん見学とした。民間から7件、大学・研究機関から10件の合計17件の講演があり、参加者は、所外からの参加者95名を含む合計117名の参加があった。

本シンポジウムは、計算科学および光量子シミュレーションおよび実験研究において重要な大規模データマネージメント技術の現状および展望を示し、今後の研究指針を立てる上で貴重な場となった。

関西研究所 :〒619-0215 京都府相楽郡木津町梅美台8-1

第4回創造的研究のための大規模データマネージメントシンポジウム論文集 編集委員会
(編集委員) 上島 豊

Proceedings of the Fourth Symposium of Large Data Management for
Creative Research

September 2-4, 2002, Advanced Photon Research Center, Kyoto, Japan

Advanced Photon Research Center

Kansai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Kizu-cho, Souraku-gun, Kyoto-fu

(Received January 27, 2004)

This report consists of 10 contributed papers of the Fourth Symposium of Large Data Management for Creative Research, which was held at the JAERI Advanced Photon Research Center in Kyoto on September 2-4, 2002. The aim of the symposium is for private sector and public research organization researchers to report on the latest research and technology developments and perform information exchange about large data treatment, experiments with visualization and large data management as a support the base for research.

The contents of the symposium are speeches, panel-discussions, the laboratory, supercomputer and photon science museum annex tours. There were seven private sector speeches and ten university and research organization speeches. There were seventeen speeches in total. A total of 117 people participated including 95 participants from other than JAERI.

The symposium showed the present condition and view of large data management technology which is important for computer science, advanced photon research and became a valuable forum from the stand point as an indicator for future research.

Keywords:Large Data Management, Visualiztion, Data Transfer, Storage System, Data Base, Network, Information Technology, Parallel Computing, Data Mining, Data Analysis

目次

1.はじめに-----	1
2.概要-----	2
3.論文-----	5
3.1 「光励起された物質の巨視的量子状態の解析」-----	7
相原 正樹(奈良先端科学技術大学院大学)	
3.2 「ナノスピントロニクスのデザインと創製」-----	11
笠井 秀明(大阪大学)	
3.3 「没入型仮想融合空間の構築と提示」-----	15
千原 國宏(奈良先端科学技術大学院大学)	
3.4 「シミュレーションを支援する環境(Problem Solving Environment(PSE))」-----	19
川田 重夫(宇都宮大学)	
3.5 「音場の解析と制御」-----	23
伊勢 史郎(京都大学)	
3.6 「Globus の DataGrid 機能」-----	27
柳 裕和(コンパックコンピューター株式会社)	
3.7 「計算マテリアルデザイン」-----	31
赤井 久純(大阪大学)	
3.8 「生体超分子系のシミュレーション」-----	37
北尾 彰朗(日本原子力研究所)	
3.9 「データ宝石箱による大規模データの視覚化」-----	39
伊藤 貴之(日本 IBM 株式会社)	
3.10 「ITBL における可視化システム」-----	52
鈴木 喜雄(日本原子力研究所)	
付録 参加者リスト-----	57

Contents

1. Preface	1
2. Outline of the Symposium	2
3. Proceedings	5
3. 1 「Analysis of Photogenerated Macroscopic Quantum States」	7
Masaki Aihara (Graduate School of Materials Science Nara Institute of Science and Technology)	
3. 2 「Nanospintronics Design and Realization」	11
Hideaki Kasai (Osaka University)	
3. 3 「Research and Development on Construction and Presentation Technology for an Immersive Mixed Environment」	15
Kunihiro Chihara (Graduate School of Materials Science Nara Institute of Science and Technology)	
3. 4 「Problem Solving Environment (PSE) for Numerical Simulation」	19
Shigeo Kawata (Utsunomiya University)	
3. 5 「Sound Field Analysis and Control」	23
Shiro Ise (Kyoto University)	
3. 6 「The Data Grid Function of Globus」	27
Hirokazu Sakaki (Compaq Computer K.K.)	
3. 7 「Computational Materials Design」	31
Hisazumi Akai (Osaka University)	
3. 8 「Molecular Simulation of Bio Super Molecules」	37
Akio Kitao (Japan Atomic Energy Research Institute)	
3. 9 「Large-scale Data Visualization Using "Data Jewelry-box"」	39
Takayuki Itoh (IBM Research)	

3. 10 「Visualization System on ITBL」----- 52

Yoshio Suzuki(Japan Atomic Energy Research Institute)

Appendix Participants List----- 57

This is a blank page.

1. はじめに

関西研究所 光量子科学研究センター 光量子科学シミュレーション研究グループ
上島 豊

平成14年9月2日(月)～4日(水)の3日間、関西研究所 光量子科学研究センターで、第4回創造的研究のための大規模データマネージメントシンポジウムを開催した。本シンポジウムは、平成12年3月に第1回の開催をしており、本会で4回目となる。本シンポジウムでは、大規模データ処理や可視化を伴う実験や研究及びその基盤を支えるネットワークなどの大規模データマネージメントに関する最新の研究、技術について意見を交換するとともに、大規模シミュレーションにおいて重要な情報・物理・生物・化学・計算科学など多くの異分野研究者・技術者の交流を行うことを目的としている。他の学術シンポジウムとは異なり民間関連企業の講演および参加者比率が高いことも本シンポジウムの特徴の一つである。このような構成により、従来困難が多かった民間と学術研究のマッチングによる具体的な問題解決やニーズ把握が推進されることが期待している。特に、関西方面では、研究機関および企業の中核が少ないため、技術ノウハウや知識集約が困難なことが多いため、このシンポジウムにかける期待が民間、学術界とも大きい。

今回のシンポジウムの構成は、講演およびパネルディスカッション、実験室・スーパーコンピュータ施設見学、併設科学館であるきつづ光科学館ふとん見学とした。講演は、民間7件、大学・研究機関10件の合計17件で、参加者は、所外からの参加者95名を含む合計117名の参加があった。講演に関しては、単なる報告にならないよう50分という長時間を設定し、密度の濃い詳細な議論を展開できるようにした。また、パネルディスカッションに関しては、6名のパネリストに本シンポジウムの内容に関して2時間にわたって横断的な話題提供をして頂いた。

本シンポジウムは、計算科学および光量子シミュレーションおよび実験研究において重要な大規模データマネージメント技術の現状および展望を示し、今後の研究指針を立てる上で貴重な場となった。

ご多忙中にも関わらず、発表者をはじめこの第4回創造的研究のための大規模データマネージメントシンポジウムにご参加、ご協力くださった方々に、この場を借りて厚く御礼申し上げます。

2. 概要

シンポジウムは、関西研究所田島俊樹所長の「大量のデータを扱う実験およびシミュレーションにおける困難さは分野を横断して、問題意識を共有すべき」という開会の挨拶から始まった。午前中は、相原正樹教授（奈良先端科学技術大学院大学）および笠井秀明教授（大阪大学）から現在注目を浴びている第一原理による量子物性シミュレーションに関する現状報告があり、大規模データの取り扱いについての問題を提起した。さらに、戸室隆彦氏（日本SGI）からソリューション企業として、それら大規模データを扱った研究を支援するツール、環境に関して照会と今後の展望について講演があった。

午後からは、千原國宏教授（奈良先端科学技術大学院大学）、梅谷征雄教授（静岡大学）、川田重夫教授（宇都宮大学）から現在研究が進められている大規模データ利用研究支援ツール、環境として、没入型仮想融合空間、可視化と対話的診断、Problem Solving Environmentに関する報告があった。

シンポジウム2日目は、松本紘教授（京都大学）が『宇宙太陽発電の世界』と題して、宇宙太陽発電の構想を説明し、そのシステムの大規模性から生まれる多くの課題について示唆にとんだ発表で始まった。その後、清水良直氏（INTEL）、藤川泰彦氏（VAINAS）から企業の立場で、大規模データ計算に関わる取り組みについて報告があった。

午後からは、伊勢史郎教授（京都大学）から音場解析と制御という具体的な課題を揚げ、大規模シミュレーションの重要性について発表があり、最後に生田祐吉氏（富士通プログラム技研）から遠隔地への高速データ転送の最新の取り組みについて報告があった。

最終日は、堀敦史様（スイミー・ソフトウエア）、榎裕和様（COMPAQ）から大規模計算が従来のスーパーコンピュータ技術からPCクラスタやGRID技術に支えらはじめている実態とその期待と問題点に関して報告があり、その後、赤井久純教授（大阪大学）、北尾彰朗（日本原子力研究所）から大規模シミュレーションのユーザー事例を紹介があった。

最後に伊藤孝之様・山口裕美様（IBM）、鈴木喜雄（日本原子力研究所）から大規模データを解析、分析するための最新の可視化ツールについて発表があった。

本シンポジウムの3日間のプログラムを参考のため以下に示す。

プログラム

[9月2日]

09:40-09:50 開会の挨拶 田島 俊樹（日本原子力研究所）

09:50-10:40 『光励起された物質の巨視的量子状態の解析』
相原正樹教授（奈良先端科学技術大学院大学）

10:40-11:30 『ナノスピントロニクスのデザインと創製』
笠井秀明教授（大阪大学）

11:30-12:20 『数値シミュレーションにおけるコラボレーションの実現』
戸室隆彦様（日本SGI）

—昼休み—

13:30-14:20 『没入型仮想融合空間の構築・提示技術』
千原國宏教授（奈良先端科学技術大学院大学）

14:20-16:20 施設見学（ITBL棟 実験棟 研究棟）

16:20-17:10 『数値シミュレーション過程の可視化と対話的診断』
梅谷征雄教授（静岡大学）

17:10-18:00 『シミュレーションを支援する環境（Problem Solving Environment (PSE)）』
川田重夫教授（宇都宮大学）

19:00-21:00 Welcome Party

[9月3日]

09:50-10:40 『宇宙太陽発電の世界』
松本紘教授（京都大学）

10:40-11:30 『汎用プラットフォームを使用した High Performance Computingへの取り組み』
清水良直様（INTEL）

11:30-12:20 『大規模データ計算における課題とソフトウェア的解決アプローチ並びに事業化』
藤川泰彦様（VAINAS）

—昼休み—

13:30-15:30 施設見学（きつづ光科学館）

15:30-16:20 『音場の解析と制御』

伊勢史郎教授（京都大学）

16:20-17:10 『データレゼポワール』

生田祐吉様（富士通プログラム技研）

18:30-20:30 懇親会

[9月4日]

09:50-10:40 『PC クラスタの功罪』

堀敦史様（スイミー・ソフトウエア）

10:40-11:30 『Globus のデータ Grid 機能』

榎裕和様（COMPAQ）

11:30-12:20 『計算機ナノマテリアルデザイン』

赤井久純教授（大阪大学）

—昼休み—

13:30-15:30 (パネル・ディスカッション)

15:30-16:20 『生体超分子系のシミュレーション』

北尾彰朗（日本原子力研究所）

16:20-17:10 『データ宝石箱を用いた大規模データの視覚化』

伊藤貴之様・山口裕美様（IBM）

17:10-18:00 『ITBL における可視化システム』

鈴木喜雄（日本原子力研究所）

18:00-18:10 閉会の挨拶 相川裕史（日本原子力研究所）

3. 第4回創造的研究のための大規模データマネージメントシンポジウムの論文

17件の講演の内、以下12件の論文が投稿され、以下のページに掲載している。

3. 1 「光励起された物質の巨視的量子状態の解析」	7
相原 正樹(奈良先端科学技術大学院大学)	
3. 2 「ナノスピントロニクスのデザインと創製」	11
笠井 秀明(大阪大学)	
3. 3 「没入型仮想融合空間の構築と提示」	15
千原 國宏(奈良先端科学技術大学院大学)	
3. 4 「シミュレーションを支援する環境(Problem Solving Environment(PSE))」	19
川田 重夫(宇都宮大学)	
3. 5 「音場の解析と制御」	23
伊勢 史郎(京都大学)	
3. 6 「Globus の DataGrid 機能」	27
柳 裕和(コンパックコンピュータ株式会社)	
3. 7 「計算マテリアルデザイン」	31
赤井 久純(大阪大学)	
3. 8 「生体超分子系のシミュレーション」	37
北尾 彰朗(日本原子力研究所)	
3. 9 「データ宝石箱による大規模データの視覚化」	39
伊藤 貴之(日本IBM株式会社)	
3. 10 「ITBLにおける可視化システム」	52
鈴木 喜雄(日本原子力研究所)	

This is a blank page.



3.1 光励起された物質の巨視的量子状態の解析

Analysis of photogenerated macroscopic quantum states

相原正樹

奈良先端科学技術大学院大学 物質創成科学研究所

〒630-0101 奈良県生駒市高山町 8916-5

Masaki AIHARA

Graduate School of Materials Science

Nara Institute of Science and Technology (NAIST)

Takayama-cho 8916-5, Ikoma, Nara 630-0101, Japan

We have theoretically investigated the macroscopic quantum states that are generated by light excitation. The luminescence spectra for highly excited electron-hole systems in semiconductors are calculated. The multiple Coulomb interaction between electron-hole pairs is taken into account by numerically solving the Bethe-Salpeter equation for electron-hole pair correlation function. The crossover from the exciton BEC to the electron-hole BCS state clearly manifests itself in the calculated luminescence spectra. Photogenerated states in strongly correlated electron systems are also analyzed. We have calculated two-photon excited states for a system with 20 sites in the half-filled case with exactly diagonalizing the extended t - J Hamiltonian. We have found that the correlation function for the d-wave superconductivity has finite values even for large distance. This strongly suggests that the photo-induced superconductivity arises in strongly correlated electron systems.

Keywords : Superconductivity, Bose condensation , Exciton,
Highly correlated electron system, Many-body theory

1. はじめに

物質は多数の原子からなり、先端科学技術で用いられる半導体、金属、磁性体、超伝導体などの機能性物質の大部分は電子が主役としてそれらの性質を支配している。特に、高温超伝導に代表される巨視的量子現象の解析には、多くのコンピュータ資源を必要とする。その理由は、1)超伝導などが発現する相転移と呼ばれる現象は多数の原子の集団的振舞によること、2)電子などの素粒子は量子力学に従うこと、の 2 点である。従って、ギガバイトのメモリを使っても、通常の方法では、メモリやディスク領域、CPU時間の制限のために、高々 10 数個の電子を扱えるに過ぎない。従って、1)並列計算の手

法を駆使して多くのコンピュータ資源を一括利用すること、2)並列数値計算のアルゴリズムを工夫すること、3)数式処理ソフトウェアなどを利用して物理的計算手法を工夫すること、などの対策が必要となる。前回の LDMCR では、行列の対角化の MPI プログラムにおいて、データのメモリ分散方法を工夫することにより数倍の演算速度の向上が得られることを報告した[1]。今回は、それによって得られた結果、特に半導体中の高密度励起子の超流動と、強相関電子系での光誘起超伝導について報告する。

2. 半導体中の高密度電子正孔系

半導体を光励起すると電子と正孔が生ずるが、両者の間にはクーロン引力が働くので水素原子と同様な束縛状態を形成する。これは励起子と呼ばれる準粒子で、ボーズ凝縮（更には超流動）を示す可能性が指摘されていた。しかし、励起子の半径は水素原子の大きさよりはるかに大きく、高密度励起子状態は単なるボーズ粒子集団とみなすことはできない。つまり、高密度になってお互いの距離が近い状態では、励起子が電子と正孔というフェルミ粒子からなっていることがお互いに見えてくる。さらに高密度になると、電子正孔ペアは幾重にも重なり合い、もはや励起子という描像は適用できず、超伝導の BCS 状態と類似した状態になる。即ち、励起光強度を変えて電子と正孔の濃度を制御することにより、超流動ヘリウムと類似な励起子 Bose-Einstein 凝縮状態 (BEC) と、BCS 超電導と類似な電子正孔状態との間のクロスオーバーを同一物質で起すことができる。本研究では、電子正孔相関を取り入れた一般化された乱雑位相近似 (GRPA) と Beth-Salpeter 方程式を組み合わせて解く事により、量子揺らぎを十分に取り入れた発光スペクトル形状を計算することに初めて成功し、図 1 に示すように BEC-BCS クロスオーバーの様相を定量的に明らかにする事ができた [2]。図の横軸の E_g はバンドギャップで（励起子の束縛エネルギーで規格化）、また $r_s = (\text{平均粒子間距離} / \text{励起子の半径})$ である。 r_s が比較的小さな高密度状態では、フェルミ縮退を反映して広い発光スペクトルを示すが、フェルミ面上には BCS 的なエネルギーギャップが開き、かつ集団的位相揺らぎによる鋭いピーク構造が見られる。また、交換相互作用によるバンド繰り込み効果により発光の低エネルギー端は大きくレッドシフトし、その大きさは実験と定量的に良

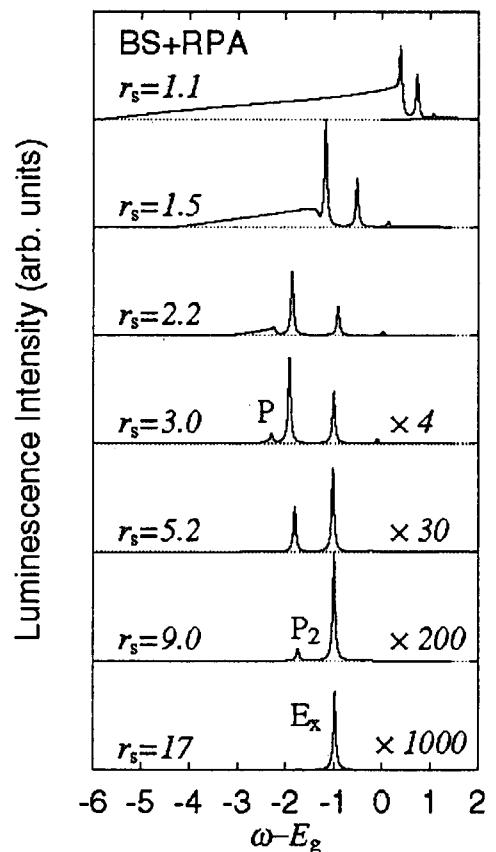


図 1 電子正孔系における発光スペクトル

く一致する。他方、 r_s が大きい低密度の場合には電子正孔ペアは励起子とみなす事ができ、BEC 状態に凝縮した励起子からの鋭い発光線が生ずる (Ex 線)。中間の密度領域では、励起子間相互作用により 1 S 励起子が発光する際に他の励起子をイオン化あるいは n S 状態 ($n=1, 2, \dots$) に励起する過程が生じ、Ex 線より低エネルギー側に励起子の束縛エネルギーだけシフトした P 線と P_n 線 (高次の発光線は図では見えない) が現れる。密度が高くなり、励起子同士が空間的に重なり合うようになると、P 線と P_n 線は融合し、特異性を持つ連続発光バンドに移行する。この状態では電子正孔ペアはもはや励起子では無く電子正孔クーパーペアと呼ぶべきものとなる。この様に、励起子 BEC と電子正孔 BCS 状態との間のクロスオーバーの様相が全密度領域で始めて統一的に解析された。これは、高温超伝導現象の機構解明 (特に疑ギャップの問題) とも関連して重要な結果である。

強励起状態での電子正孔 BCS 相を観測する事は興味深い問題であるが、励起状態の短い寿命や励起光の空間的不均一性などのために十分かつ均一な粒子密度を得る事は簡単ではなく、量子揺らぎによって BCS 相が不安となる可能性がある。そこで、量子揺らぎによる影響を詳細に調べるために、強結合超伝導の解析に用いられる Eliashberg 方程式を光と結合している電子正孔系に拡張し、それを数値的に厳密に解いた。この方法により、BCS 型の平均場理論では無視されていた電子正孔ペアの集団的位相揺らぎ、および波動関数 (クーロン) 繰り込み効果を取り込むことができる。その結果、量子揺らぎにより BCS ギャップは減少するが、巨視的量子状態は中間密度領域でも存在することが示された。特に光励起下では、励起光が強くなるに従い BCS ギャップが広がり、巨視的量子状態が大幅に安定化されることが見出された。これは、バンドの異方性や不純物などに対して比較的脆弱のため観測が困難と思われている電子正孔 BCS 状態が、光励起下で実験的に検証される可能性を示す点で興味深い結果である [3]。

3. 強相関電子系における光誘起超伝導

低次元強相関物質は、化学ドーピングをしてキャリアを注入してやることにより高温超伝導などの興味深い物質相が現れる。光励起によってもまたキャリアを注入することができるので、低次元強相関物質を光で強く励起してやることにより、様々な興味深い物質相が現れる可能性がある (光誘起相転移)。このような光励起によってもたらされた物質相の分析により、従来の基底状態の研究とは異なる視点から、その物質の本質に迫ることが可能になると考えて研究を開始した。高温超伝導で注目されている 2 次元強相関系を取り上げ、この系を記述するのに 2 次元ハーバードモデルを用いて解析した。同一サイトでのクーロンエネルギー U が十分に大きい場合の多光子励起状態における有効ハミルトニアン ($t - J$ ハミルトニアンの一般化) を導出し、それを数値的に厳密対角化することにより、種々の相関関数を求めた。スピニ相関関数の計算結果より以下のことが分かった。 $t/U < 0.0166$ (t は最近接サイト間の重なり積分) の極めて相関が強い領

域では、スピン相関関数がすべての距離において正になっており、1光子励起状態は強磁性的スピン秩序を持つ。基底状態は反強磁性的スピン秩序を持っているので、この結果は、反強磁性状態から強磁性状態への光誘起相転移を示唆する結果である。また、2光子励起状態のd波超伝導相関関数の計算結果より、 $0.02 < t/U < 0.05$ の領域では、d波超伝導相関関数が増大することを分かった。現段階では、小さい系での計算のため光誘起超伝導の存在を確定するまでには至っていないが、この結果は光誘起超伝導の存在を強く示唆するものである[3]。光誘起超伝導が実現すれば、基礎物理として重要な結果であるのみならず、新しいタイプの光デバイスの可能性を示すもので、そのインパクトは大変に大きい。更に多くの電子数での結果を得るために、現在変分モンテカルロ法による解析が進行中である。次回の第3回 LDMCR シンポジウムで報告する予定である。

参考文献

- [1] 高橋聰, 第3回 LDMCR シンポジウムのプロシーディング.
- [2] T. J. Inagaki and M. Aihara, Phys. Rev. B **65**, 205204 (2002).
- [3] T. J. Inagaki and M. Aihara, Phys. Rev. B **66**, 075204 (2002).
- [4] A. Takahashi, H. Gomi and M. Aihara, Rev. B **66** (in press).



3.2 ナノスピントロニクスのデザインと創製

—大規模データマネージメントを支えるハードウェア基盤—

Nanospintronics Design and Realization

— Hardware Infrastructure for Large Scale Data Management —

笠井 秀明、中西 寛

大阪大学大学院 工学研究科 応用物理学専攻

〒565-0871 大阪府吹田市山田丘2-1

Hideaki KASAI, Hiroshi NAKANISHI

Department of Applied Physics, Graduate School of Engineering, Osaka University

2-1 Yamadaoksa, Suita, Osaka 565-0871, Japan

1. はじめに

21世紀の高度情報化社会の基盤となるエレクトロニクスには、非常に高いレベルの超高速性、超高集積性、超省エネルギー性が要求される。このレベルをクリアするためには、電子の持つ спинを効果的に活用するナノスピントロニクスの構築が肝要である。そこで、ナノスピントロニクスのマテリアル・デバイスを第一原理計算に基づきデザインし、創製するという、理論グループと実験グループが、予言・設計と製作・実証、およびフィードバックからなる、強力な相互作用に基づいた研究開発事業を開始した。本稿では、創造的研究のための大規模データマネージメントの観点から、この阪大オリジナル・プロジェクトについて紹介させていただく。

2. 背景

エレクトロニクスの超高速性、超高集積性、超省エネルギー性を高めるには、デバイスの微細化が不可欠であり、その要請は留まるところがない。次々と困難を克服し微細化が進められてきたが、現在、行きつくところまで来てしまった感がある。微細化技術も限界に達しつつあり、それに伴い超高速化、超高集積化、超省エネルギー化も頭打ちになり始めた。

この限界を克服する一つの方法は、これまでのエレクトロニクスにおいてはあまり意識されていなかった電子のもつ「スピニ」自由度を効果的に活用することである。すなわち、スピニ・エレクトロニクス（スピントロニクス）の構築を目指した研究開発を進める必要がある。残念ながら、このスピントロニクスに関しては、欧米先進国が既に一步先んじて、関連するプロジェクトを進めている。2000年秋から米国で、国防先端研究促進機構（DARPA）による「SPINTRONICS and SPINS」プロジェクトが、産官学を巻き込み20以上の有力な研究グループの参加を得て開始された。また、2001年になってからは、欧洲でも、8カ国の10以上の有力な研究グループの参加を得て、「FENIKS (Ferromagnetic semiconductors and novel magnetic-semiconductor heterostructures for improved knowledge on Spintronics)」プロジェクトが開始された。ともに複数年計画（5年）である。

ところで、スピントロニクスの研究開発の基盤は、特定領域研究「微小領域の磁性と伝導」

(領域代表: 新庄輝也 京都大学教授) や「スピントロニクスの新展開」(領域代表: 大野英男 東北大学教授)などにある。これらの研究成果が基礎となり、かつ刺激となって、「磁性」と「半導体」との融合による新しい物性の開拓を目指す研究開発が始まった[1]。その結果、III-V族磁性半導体における強磁性が解明され、光照射や電界印加による磁性制御、スピントロニクスの電気的注入と光学的検出、スピントロニクスによる磁気抵抗効果などが実験的に示された。また、金属と半導体を複合化した素材が登場し、室温超巨大磁気抵抗効果や室温光磁気効果が見出され、さらに半導体と整合性の良いCr系強磁性体も創製された。この分野では、薄膜成長技術や微細加工プロセス技術の目覚ましい進歩により、ナノメートルスケールで制御された磁性体や半導体の多層膜、半導体人工原子、磁性半導体量子細線・量子ドットなどの超構造や低次元構造も作られるようになった。これらが、現在、スピントロニクス演算用材料として脚光を浴びつつある。

「ナノスピントロニクスのデザインと創製」では、これらの研究成果を広く活用し、次世代のナノスピントロニクスを、先行する欧米諸国を凌駕し、わが国において早急に立ち上げようというわけである。そのためには、効率の良い理論主導によるデザインと実験の強力なバックアップからなる研究開発グループが必要である。このような研究開発グループを組織し、ナノスピントロニクスのマテリアル・デバイスをデザインし、創製する。

3. 研究グループ

・ 内容

研究組織は図

1に示すデザイングループと創製グループからなるネットワーク型研究組織とし、それぞれ、以下の課題を担当する。

3. 1. デザイングループ

- 表面ナノ構造ベースのデバイス・デザイン
- II-VI/III-V 超格子磁性半導体およびカルコパイライト型超格子磁性半導体ベースのデバイスデザイン
- 遷移金属化合物 (GaAs, III-V-3d 遷移金属元素) ベースのデバイスデザイン

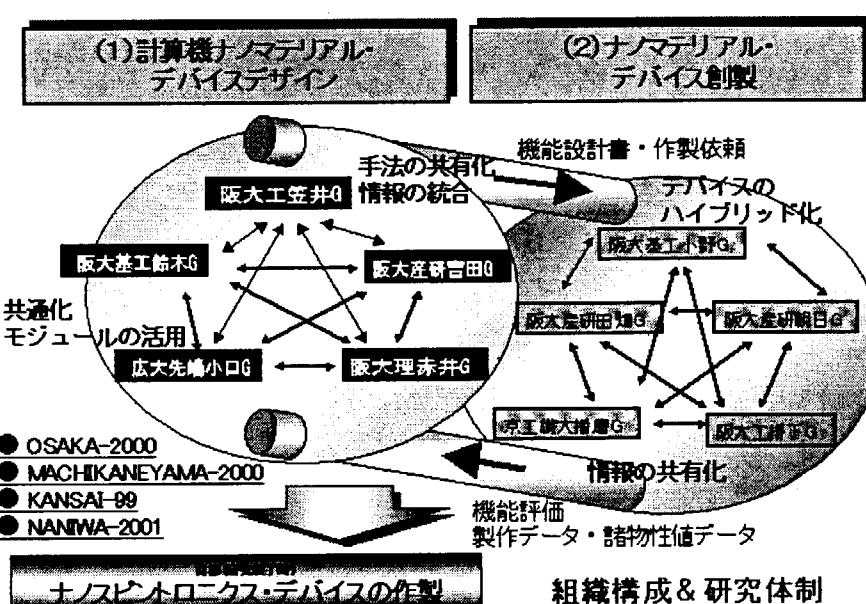


図1. 「ナノスピントロニクスのデザインと創製」ネットワーク型研究組織

- 透明磁性半導体ベースのデバイスデザイン
- 強誘電体磁性体ベースのデバイスデザイン

3. 2. 創製グループ

- GaN:3dTM (In, Mn) AsSb ベースのデバイス創製
- 酸化物磁性半導体ベースのデバイス創製
- 金属多層ナノ構造ベースのデバイス創製
- ペロブスカイトおよび強磁性形状記憶合金ベースのデバイス創製
- ワイドギャップ半導体材料ベースのデバイス創製およびデバイスの非破壊評価

電子の持つ「スピニ」自由度を生かした新機能デバイス（スピニ・トランジスタ、量子スピニ・コンピュータ 等）を開発し、エレクトロニクス分野に新たな進展をもたらそうというのが、「ナノスピントロニクスのデザインと創製」の目指すところであり、その結果、単電子エレクトロニクスの次の世代を担う多重高密度情報処理技術が実現する。このプロジェクト終了後には、ナノスピントロニクスのマテリアル・デバイスのデザインエンジンと創製エンジンが構築され、それらが真に量子スピニを制御するナノスピニエレクトロニクス時代の一つの核となる。

さらに、現実物質の個別性の起源を第一原理的に取扱うことに出発点を置く本プロジェクトは、従来の固体物理学の枠を大きく越えて、新しい物質科学（新物質科学）を作り上げるとともに、理論グループが行う第一原理計算によるデザインに基づいて、実験グループがマテリアル・デバイスの創製を行うという、効率の高い、環境に負荷をかけない、マテリアル・デバイスデザインという新しい産業を生み出すことにもつながる。工業化社会から知識集約型社会（知識社会）への大きなパラダイム・シフトが起こりつつある我が国の科学技術に対して、新しい活力を導入し、一大理工学分野を誕生させることが出来る。

4. おわりに

創造的研究のための大規模データマネージメントについて我々の捉え方を述べさせていただき、内容は、平成14年度科学技術振興調整費（先導的研究等の推進）に採択された「ナノスピントロニクスのデザインと創製」の紹介を兼ねたものにさせていただいた。

最後に、我々のプロジェクトで採用しているネットワーク型研究組織における「創造的な理論研究のための大規模データマネージメント」について私見を述べさせていただいて終わりとしたい。

これまで理論グループは、独自に研究を進め、それぞれ個別にノウハウを蓄積してきた。そのデータを効率良く、全体で活用するには、データ形式をそろえ、中央のサーバーに蓄積するのが良いように思われるが、それぞれの研究グループの様々なデータ様式を統一しようとすれば、それだけで研究開発期間が終了してしまうほどの大事業となり、研究全体の効率は完全に損なわれる。そこで、各研究グループの独創的な研究活動を推進すると同時に研究全体の効率を高めるためにも、常態におけるデータ転送の基本は、2グループ間とする。す

なわち各グループがサーバーを保持し、そのうえで、他の研究グループへサービスを提供する。(図1の矢印参照)

たとえば、プログラム開発では、個々の研究グループがそれぞれ独自にモジュール化したプログラムを開発し、ネットワーク上で各モジュールの入出力形式を研究組織に公開する(広域分散開発)。計算の実行においては、必要なモジュールを各研究者が集め(不足分は、各自製作し、それも公開する。)、ネットワーク上でつながっているワークステーション・クラスターに送り、計算機資源を統合し大規模計算を実行する(統合計算システム)。このとき、例えば電子状態の波動関数の情報などは、往々にしてギガバイトクラスになるが、これを計算の進行にともない、その都度ネットワーク上で転送をさせると、転送時間がボトルネックとなる。巨大なデータは、局所クラスターにおいていたまま、計算を実行する必要がある。

このような手法が、大規模データマネージメントとして必要であると考えている。これらを実現するソフトウェア基盤のプロジェクト提案も行っていきたいと考えている。

参考文献

- [1] 電気と磁気の新しい交わり スピンが拓く21世紀のエレクトロニクス 第15回「大学と科学」公開シンポジウム組織委員会、(株) クバプロ

3.3 没入型仮想融合空間の構築と提示

Research and development on construction and presentation technology
for an emmersive mixed environment

千原國宏

奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科
〒630-0101 生駒市高山町 8916-5

Kunihiro CHIHARA

Graduate school of Information Science, Nara Institute of Science and Technology
8916-5 Takayama, Ikoma, Nara 630-0101, Japan

Keywords: Emerssive mixed environment, Teleportation, Hyper-omni-vision, Visualization

Abstract

NAIST is performing research and development on "Construction and Presentation Technology for an Immersive Mixed Reality Environment" toward the realization of advanced image telecommunication society. To realize an "Immersive Mixed Environment" which is required as one of advanced image technologies of the next generation, this project studies a fundamental and universal technologies to present mixed reality of real and virtual worlds, and promotes to create new image media in advance of the world.

1. はじめに

奈良先端科学技術大学院大学像情報処理学講座では Visualization に関する知識を教育することを通じて、次世代高機能映像技術の一つとして期待されている没入型仮想空間を実現することを目的に、現実世界と仮想世界の融合・提示に必要な三次元映像処理技術の開発と、高度通信ネットワークを介した遠隔地間相互に仮想融合空間の環境を再現する通信技術を開発することを目標として、Virtual Teleport のための基盤技術を研究している。現在、世の中の多くの場面での実利用が期待される没入型仮想融合空間技術に対して動的要素を与えて、真の実社会応用を推進するために、多様な没入型映像音響空間を構築し、実写映像と CG 映像による高品質な合成処理に必要な映像処理技術とマルチ環境で正確な同期共有を可能とする通信技術を開発している。特に、本講演では、私が与えたミッションの中で、「自分の眼前に遠隔環境を転送せよ」「自分を遠隔地に転送せよ」という二つをクリアするために日夜奮闘しているテレポート大作戦プロジェクトチームの活動を紹介する。

2. 研究開発テーマ

本プロジェクトの基本的な研究分野は「Virtual Reality」である。世間はこれを「仮想現実感」と訳しているが、「かりにおもう」というニュアンスが強く「あたかも」という語感を連想させるこの訳語を、私は余り好きではない。1989年6月7日はサンフランシスコの Texco' 89において“Virtual Reakity arrival!”が発信された VR デーであるが、日本での本格的な取組

が平成 7 年度（1995）から平成 9 年度（1997）において実施された「文部省科学研究費：重点領域研究『人工現実感（研究代表者：館 瞳 東大教授）』」であるように、人工現実感のいう訳語のほうが正しいと考える。ものごとの歴史にはその胎動があるように、関西文化学術研究都市においても我が国の VR 研究の胎糞を見ることができ、岸野文男阪大教授（当時 ATR）の貢献は大きいし、横矢直和教授や佐藤広介助教授（現阪大）・竹村治雄助教授（現阪大教授）ら NAIST の貢献は大きいと自負している。

e-Japan 構想を具現し、e-Japan 環境で豊な暮らしを享受するには、映像メディアと情報ネットワークの融合が不可欠であろう。e-Japan が保有する情報コンテンツと伝送路であるネットワークの質が成功の鍵を握っている。例えば、図書館の情報化の流れが創出した電子図書館は、真に、新しいツールとなったであろうか。世間一般に寄せられた期待は、「いつでも・だれでも・なんでも・どこでも」に代表される利用者サイドの新しい図書館機能にあったと考えるが、実際には、現実にある図書館のパソコン版でしかなく、「なんでも」は著作権、「どこでも」はネットワークの伝送速度、「だれでも」はデバイスと、いくつもの障害が従来にない図書館機能の実現を阻んでいる。しかし、その芽生えは Web 検索による辞書機能や百科事典機能に見出せないことも無い。個人が個々に集めて生成した分散情報が Web データベースとして自律的（？）に集約された結果、かつてないほど大規模な「Virtual Library」が誕生しているのである。しかし、この e-環境社会の制約は、既成社会の法律で縛られており、当然、情報未分化社会でしかないので、無料で提供しているヒトも居れば、有料で提供するヒトも居るというように、新しい社会的枠組みの構築が待たれる。このような混沌とした時代に、Teleport 構想のミッションをクリアするためには、技術的障害以外に多様な未知の壁が出現していく可能性は大きいが、像情報処理学講座のクルーが提案した夢が「テレポート観光」「テレエコー診断」「テレポート勤務」という研究課題である。このための基本技術が、

- 仮想融合空間の構築・提示技術：没入型の映像スクリーンに対して、現実世界と仮想世界を融合した三次元映像をシームレスかつリアルに構築・提示する技術、特に、被験者の動きと映像・音響・運動の各要素を同期運動させる制御技術の研究開発。
- 仮想融合空間の通信技術：遠隔地に仮想融合空間を再現するための通信技術、また遠隔地相互間で映像・音響・運動を同期運動させるための技術の研究開発。

であり、NAIST では以下の装置を準備して研究を推進している。

- 計測装置：オムニビジョンカメラ、全周型マルチカメラシステム、レンジファインダなど。
- 処理環境：曼陀羅ネットワーク（基幹：ギガビットイーサネットバックボーン、別系統：FDDI スイッチ、対外接続：132Mbps 以上の複数専用線）と曼陀羅システム（ファイルサーバ：10TB、画像処理サーバ：複数の SGI Onyx 3400 など、その他）。
- 提示環境：没入型全周スクリーン（直径約 6m）、半球型ドームスクリーン（内径約 3.7m）、自由歩行ステージ、運動型チェア・没入型 4 面スクリーンならびに長大スクリーン（TAO）。

3. 研究成果

3.1 テレポート観光

教育、文化、観光産業等を目的として、現実世界で体感できる揺れをビデオ映像から検出し、その揺れと映像を仮想体験するシステムである。自然の景観、高さ、揺れの観点から、提示対象と

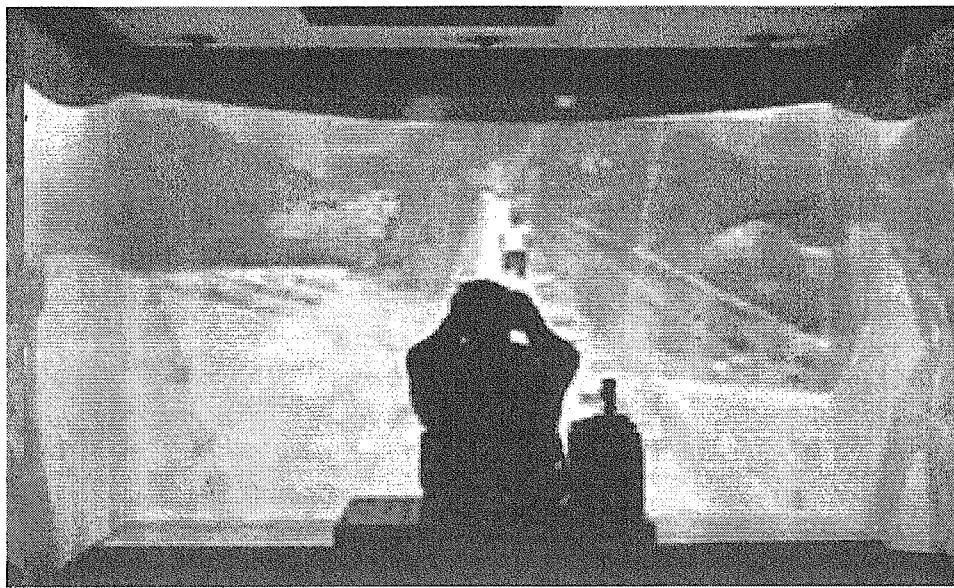


図1 仮想吊り橋体験

して奈良県十津川村の谷瀬の吊り橋をとりあげた（図1）。映像は全方位視覚センサを用いて取得し、透視投影変換により4面スクリーン間で継ぎ目のない映像を提示する。揺れの推定は全方位映像から抽出されたオプティカルフローを基に、3次元環境における移動情報、および角度情報を検出する。検出された前フレームに対する移動量および角度量を揺動体感装置の上下運動と回転運動に対応させる。このようにして抽出した揺れ成分を揺動体感装置に再現し、映像と同期して提示することで、没入感の高い実空間の揺れを仮想体験することができる。

3.2 医療用3次元画像の構築

医療分野における診断、教育等を目的として、立体的な体内情報を有する医用画像を様々な手法を用いて撮像し、それらを融合した3次元画像を没入型マルチスクリーンに提示して全視野を覆うことにより、体内にいるような体感を提示できるようにするシステムである。

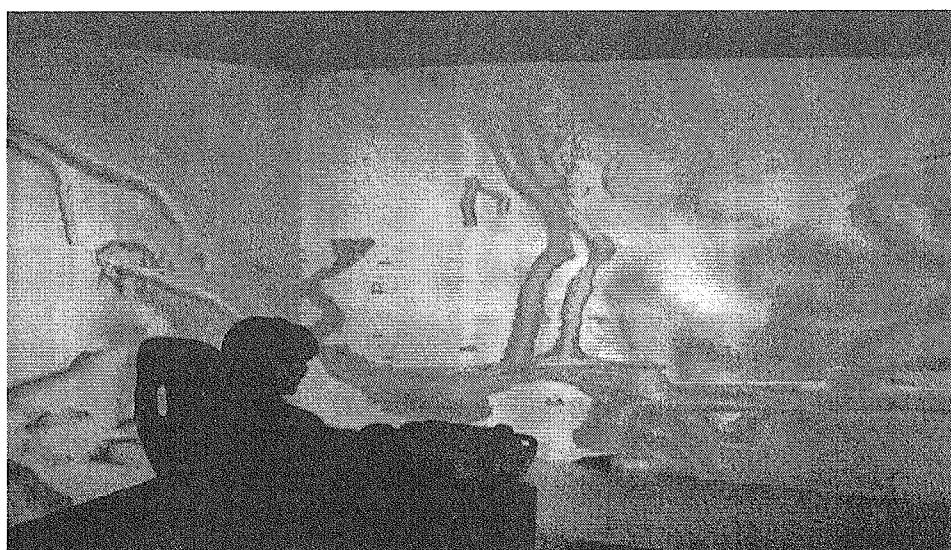


図2 頭部の3次元表示

今回、頭部を3次元表示するシステムを構築した。撮像手法にレンジファインダ、MRI装置、MRA装置等を用い、頭部の形態情報として実写顔画像、頭部形状、脳画像、脳内血管画像を獲得する。これらの画像を融合して、3次元画像として再構成し、没入型マルチスクリーンに提示した。図2は脳内血管を観察している様子である。視点移動を操作者の操作で行い、頭部の外部のみならず、内部からも表示することにより、頭内部を立体的に把握することができ、没入感を更に高めることができる。

3.3 共有インテリアデザイン空間の構築

異なるVR環境で仮想世界を共有し、遠隔地間で快適なコミュニケーションを行うことを目的とした、インテリアデザイン構築の協調作業を行うシステムである。異なるVR環境で協調作業を行う場合の課題の一つは、各々の環境（スクリーン構成、マシン性能、ネットワーク帯域等）の違いによる処理能力の差を考慮し、互いの仮想空間で矛盾が生じないようにすることである。そこで、多様な環境に対応するため、ソフトウェアは一般的なプラットフォームを用い、ネットワーク構成はクライアント・サーバ型分散モデルを採用した。図3は奈良先端科学技術大学院大学との間でインテリアデザインの協調作業を行っている様子である。各操作者が同一オブジェクトに異なる操作を行った場合はオブジェクトを複製し、操作者同士が相談してどちらの操作を採用するか解決する。これにより、他の操作者の操作を気にせずに同時に作業が行え、排他制御を行うことなく仮想空間の一貫性を保つことが出来る。また、オブジェクトの頂点に優先度を設け、処理能力が低い場合は優先度の高い頂点のみを選択し、簡略化された形状を描画することで処理時間の削減を行っている。

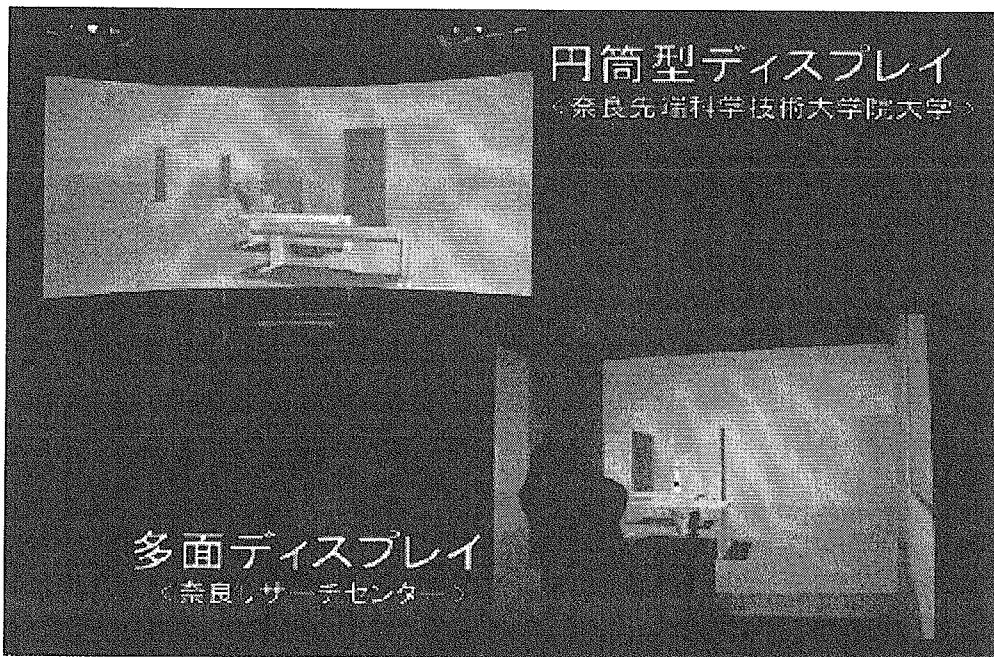


図3 インテリアデザインの協調作業

4. おわりに

以上、NAISTで推進している研究の概要と開発技術を検証するための実験アプリケーションを紹介した。Visualizeを基本としたTeleportの研究がユビキタス社会の基盤技術となるよう今とも精進していく覚悟である。NAISTは自分の夢を具現しようという学生を求めている。

3.4 シミュレーションを支援する環境 (Problem Solving Environment (PSE))

Problem Solving Environment (PSE) for Numerical Simulation

川田 重夫

宇都宮大学 工学部

〒321-8585 宇都宮市陽東 7-1-2

Shigeo KAWATA

Utsunomiya University

Yohtoh 7-1-2, Utsunomiya 321-8585, Japan

A new research area called PSE (Problem Solving Environment) has been intensively explored in order to support researchers, engineers and students in their scientific activities based on information technology and softwares including numerical simulations. The PSE researches cover rather wide areas, including computer-assisted simulation program generation, visualization support, computer-assisted utilization of computer-aided engineering software, parallel computing support, distributed computer utilization support, and so on. In this article we limit ourselves to introduce activities of our recent researches and the PSE research group (<http://skkd1.ee.utsunomiya-u.ac.jp/~PSE>).

Keywords: Problem solving environment, Computer-assisted program generation, IT-based support system

1. はじめに

問題解決環境、英語では PSE (Problem Solving Environment)[1,2]と呼ばれる研究分野が発展してきている。PSE では、主にコンピュータで研究・開発や作業を行うことを支援することに狙いを置き、コンピュータやソフトウェア利用の際にそれらの独自のインターフェイスに関連してユーザにかかる負荷、例えば使いにくさなどの負担を軽減しようとしている。例えば、CAE 解析ソフトウェアを利用する際に、利用のための教育が必要な場合がある。PSE は、利用者にそのソフトウェアの利用方法をナビゲーションしたり、利用手順を示唆したり、あるいは利用教育を支援する[3]。別の例では、基礎式からプログラムの生成支援を行う[4]。最近では MPI 関数を自動的に組み込んで並列プログラムを生成してくれるシステムなども登場している[5]。また GRID など最近分散環境が話題になっているが、分散環境を利用することを支援することなども PSE の研究範囲に入っている[6-8]。実際の実験装置などのモノとソフトウェアの連携を支援しようとする動きもある[9]。過去のシミュレーションプログラムやソフトウェアを分散ネットワーク上からの利用を支援するシステムなども開発されている[10]。教育の分野での PSE では e-Learning を支援することを目的に、e-Book 作成支援や e-Book 検索・履歴メモ支援なども行なわれている[11]。近い将来には福祉や医療関連の IT 利用支援などにも活用されるのではないかと期待されている。このように、さまざまに広い分野に応用されようとしている PSE には将来への夢が広がっているという期待がある。

PSE 研究は、発想自身は数十年前に複数の研究者から出されてきていたが、コンピュータパワーが飛躍的に伸張した後、日米欧それぞれに研究が盛んに行われてきている。日本においても 10 年弱前に PSE 研究会(<http://skkd1.ee.utsunomiya-u.ac.jp/~PSE>)が発足し研究が本格的にスタートした。本稿ではこの PSE 研究と研究グループの紹介と我々の最近の研究成果について紹介する。

2. PSE 研究

PSE 研究のスタートに関連する動機はいくつかあった。例えば、梅谷はスーパーコンピュー

タが登場したものの性能を引き出すためにはチューニングが難しいことから、チューニングを支援したいという要求から PSE にたどりついた[12]。海外でも精度の出るプログラムを書くのが大変で何とかこれを支援したいという発想から PSE が始まった。我々の場合は、20 数年前に毎日シミュレーションをするためにプログラムつくりに精を出していった際、どうして問題に集中したいのに入間がプログラムを作らなければならないのか、という疑問から PSE 研究をスタートさせた。PSE 研究は以上のようにそれぞれの発想から独立に発展し、コンピュータ性能の飛躍的な進展に伴って、10 年弱ほど前から PSE 研究グループとしての活動が目立ってきた。日本でも同時期に PSE 研究会が組織され、PSE Workshop や日本計算工学会のサポートの下に講演会などを活発に開催している。さらに、PSE 研究を紹介するための一般書も出版するなどの活動もおこなってきている[1,2]。

歴史的に、PSE 研究は、数値計算の労力を軽減するあるいは数値計算の精度を確保してくれるプログラムの提供を試みることから出発した。各計算機にチューニングされたコードなどもこの延長線上にあった。PC で手軽に大規模計算が出来るようになった現在では、以下の 3 章、4 章で紹介するように並列プログラムの生成支援や分散環境利用支援が出来るようになってきている。PSE におけるこの分野は急速に進歩している。プログラムせずにシミュレーションが出来るようになりつつある。分散したコンピュータをオフィスに居ながらにしてあたかも目の前にあるコンピュータのように使える環境も目の前に来ている。過去に開発されたプログラムや CAE ソフトウェアも簡単に使える環境も提供できそうである。上記の「はじめに」で述べたように、数値シミュレーション支援だけではなく、PSE では非常に広い分野をカバーしようとしている。IT 教育環境にも PSE は着目し、活発に活動している[11]。PSE は広がる大きな夢を見ている。

3. 偏微分方程式問題からのプログラムの生成支援例 - NCAS -

ここでは我々の最近の研究成果を PSE 研究の一例として紹介する。我々の開発した NCAS[4,5] では数学モデルから C 言語のシミュレーションプログラムを生成支援する際、問題記述からプログラムの設計・生成されたプログラム自身に至るまでの過程を可視化し、ユーザによる変更・修正（ステアリング）を可能にしている。この意味で NCAS はホワイトボックス型 PSE と呼ばれる。シミュレーション過程の全てをユーザに可視化して開示し、修正変更をも可能にし、ユーザの意図を反映したプログラムの生成支援を行なう。多次元流体プログラムなど 5 千行程度のプログラムの生成が実現されている。P-NCAS[5]では並列プログラムの自動生成にも対応している。

NCAS の設計思想の裏には、PDE で記述できる問題をコンピュータでシミュレーション場合、扱いたい問題に全面的に集中したいのになぜ入間が機械的な作業であるプログラミングを行なわなくてはならないのか、現在のコンピュータは本物のコンピュータに進化し切っていないのではないか、という疑問があった。同時に、差分法や有限要素法によってプログラムを作る際には共通点があり、PDE 問題領域に限れば、プログラミングのある程度の機械化、すなわち自動プログラミングが可能であることもわかった。こういった背景のもと、NCAS は、問題の本質の抽出などの人間が得意なところは人間が分担し、コンピュータが得意なところはコンピュータに任せることを設計思想としている。

P-NCAS では並列プログラムの設計過程の可視化とステアリングも実現した。計算領域の領域分割により並列化をサポートし、並列モデルには SPMD (Single Program Multiple Data) モデルを採用した。メッセージパッシングには MPI 関数を用いた。計算領域の分割は領域の可視化ウインドウにより可視化された領域を見ながら行なうことが可能であり、領域分割方法・領域分割数を可視化ウインドウで確認しながら変更し設定できる。領域分割に関する設定の後、NCAS 内でプログラムが設計され、設計されたプログラムは PAD 図により可視化される。PAD 図の可視化ウインドウでも並列パラメータの変更・確認を行なうことができる。プログラミングや並列化過程の可視化とステアリングにより、プログラムの並列化がより柔軟に容易に行なえるようになる。

またプログラムの自動生成が、基礎式や解法などの抽象的な問題記述から行なえることを利用

して、問題そのものからプログラムまでの内容についてのドキュメントの自動生成も可能になる。プログラミングおよびドキュメンテイションからの開放を目指している。

4. 分散型問題解決環境

偏微分方程式問題解決環境(PSE)システムの研究開発の流れはネットワークを介して利用するPSEの研究開発に向かっている。その方向は大きく二つに分類することができる。単体のPSEシステムをWEBなどを通して利用できるようにするネットワーク型PSE、もう一つはPSEシステムそのものがサブシステムモジュールに分割されネットワーク上に分散している分散型PSEである。両者は完全に独立なものではない。

現在までの問題解決環境(PSE)研究により、過去のPSEシステムの問題点が浮上した。一つはPSEシステムの機能が高くなるに従い利用方法が煩雑になり、ユーザーのPSE利用方法の学習が難しくなってきたこと、もう一つはPSEシステムの開発とメンテナンスに多大な時間と労力がかかるようになったことである。第一の問題を解決するために、PSEに使いやすいユーザインターフェイスをつける工夫がなされ、更にこのインターフェイスをWEBから利用することが考案された。PSILAB[12]のWEB版であるPSIWEBやFEELWEB[8]、ELLPACK[1]、CAPSE[9]などもWEBから使いやすいインターフェイスを利用できる。もう一つの問題であるPSE開発にかかる多大な労力を軽減するため、PSEを機能ごとのモジュールに分割する工夫が提案された。これによりモジュールごとの開発とメンテナンス、更に過去のPSE資産を活用する道筋が開かれた。

シミュレーション支援PSEにおけるモジュールは、シミュレーションのプロセスに対応して、主に以下の構成要素からなる。解決すべき工学問題から本質となる物理モデルの生成支援を行う物理モデル化支援、問題記述支援、物理モデルから数学モデルを導出支援する数学モデル化支援、基礎式をコンピュータで解けるようにするための離散化支援（離散化支援は、数学モデルから離散式を導出する離散化支援と空間の離散化支援とからなる）、解析プログラム設計支援、プログラム生成支援、シミュレーション実行支援、得られるデータの解析支援、可視化支援、解くべき問題と作成されるプログラムのドキュメンテイション支援、が中心となるモジュールである。

PSEの機能の一つあるいは複数のモジュールに限って開発を行なうことにより、複数の開発者による開発が可能になり、メンテナンスの労力が軽減されると同時に、過去のPSE資産あるいは今後に開発されるモジュールを再利用し易くなる。このことを目指して分散型のPSEが研究開発されている。以下にはその一例を述べる[6]。

上記の各モジュールを一台あるいはネットワークで結合したコンピュータ上に置き、一つあるいは複数のPSEシステムを構成している。分散型PSEを利用する方法はいくつかあるが、各PSEモジュールの機能と存在位置をPSEサーバに事前に登録しておき、問題を抱えるユーザに問題を解決する手順をナビゲーションする方法が簡便である。モジュール間あるいはモジュールとPSEサーバとの通信にはXML(Extensible Markup Language)などの公開規格を用いるとモジュール間のインターフェイスを統一することができる。過去に開発されたモジュール等の場合では、独自のインターフェイスを持っている場合がある。この場合にはそのモジュールの独自のインターフェイスとXMLなどの統一された規格との間のマッチングソフトウェアを用意する必要がある。

問題記述モジュールに解くべき問題を記述し、あるいは支援モジュールにより解法を得て問題記述を完成させれば、その結果をXMLファイルとして保存する。そのXMLファイルを次の離散モジュールに渡し、結果をXMLファイルとして得る。式変形モジュールやプログラム設計モジュール、プログラム生成モジュール、ドキュメンテイション支援モジュール、実行支援モジュールなどと順に情報を伝え、ユーザは問題を解決することができる。各機能に対して複数のモジュールが存在する場合もある。ユーザが選択しやすくするため、各モジュールの特徴を記述しておく必要がある。

分散型PSEにより開発とメンテナンスの負荷が軽減されること、過去の資産が有効活用でき

ることから、PSE 研究に新たなステップをあたえるものとなった。

5.まとめ

上記のようにすでにいくつもの PSE システムが開発されてきており、それらを利用する側からの利用の容易さを求められている。要求に応える一つとしてネットワーク型 PSE の開発研究も盛んである。おおむね WEB からネットワークを通して各 PSE を利用できるように設計開発している場合が多い。この研究の方向は主に複雑で大規模になってきている PSE システムに対する使いやすいインターフェイスを開発し、利用を促進することを狙っている。企業ではシミュレーションの身近なサービス化を狙って携帯端末からでも PSE を利用できるシステムを開発している。実際に実用になっている PSE も多い[13]。マニュアルや障害相談データベースを検索利用支援する PSE、科学技術分野では並列プログラム生成支援、並列支援、大規模シミュレーション実行支援など多くの方向で発展している。このように PSE は IT 利用支援という名のもとに非常に広い領域をカバーしうるポテンシャルを持っているため、将来は思いもかけない方向に PSE 研究が発展する可能性もあり、それが PSE の魅力のひとつになっている。PSE 研究グループにあるいは PSE 研究にご関心のある方は kawata@cc.utsunomiya-u.ac.jp まで御連絡下さい。

参考文献

- [1] E.N. Houstis, J.R. Rice, E. Gallopoulos and R. Bramley (edited), "Enabling Technologies for Computational Science", Kluwer Academic Publishers (2000).
- [2] 川田, 田子, 梅谷 編, 「シミュレーション科学への招待—コンピュータによる新しい科学ー」, 日経サイエンス (2000)
- [3] 南, 沼田, 他, 「計算機支援問題解決環境 CASPE におけるプログラム自動生成及び利用支援」, 第 2 回問題解決環境ワークショッピング論文集 (1999)pp.29-36.
- [4] 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). 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).
- [5] 藤田, 寺元, 他, 「数学モデルからの領域分割による並列数値シミュレーションプログラム生成支援環境 P-NCAS の構築 — 並列プログラム生成支援及びその設計過程の可視化とステアリング —」, 日本計算工学会論文集 2000 年号, 論文番号 200000037, (2000).
- [6] T.Teramoto, T.Nakamura, et al., "A Distributed Problem Solving Environment (PSE) for Partial Differential Equation Based Problems", 日本計算工学会論文集, No.20010027(2001).
- [7] 松本, 西森, 他, 「WWW システムを用いた数値シミュレーション支援環境の構築」, 日本計算工学会論文集, No.19990005, (1999).
- [8] 藤尾, 土肥, 「FEEL で有限要素法の問題を解く」, 日経サイエンス “シミュレーション科学への招待” (2000) pp.72-77.
- [9] 大西, 小橋, 他, "Problem Solving Environment for PIV Web Visualization", 第 5 回問題解決環境ワークショッピング論文集(2002), 42-47.
- [10] 小川, 原田, 他, 「分散処理およびインターネット技術を利用した”CAPSE”の問題解決統合化環境」, 第 2 回問題解決環境ワークショッピング論文集 (1999) pp.21-27.
- [11] 例えば文献[2]及び以下を参照のこと: 第 4 回問題解決環境ワークショッピング論文集 (2001), 第 5 回問題解決環境ワークショッピング論文集 (2002).
- [12] Umetani, Y., DEQSOL A numerical Simulation Language for Vector/Parallel Processors, Proc. IFIP TC2/WG22, 5, (1985), pp. 147-164.
- [13] 萩原, 他:電中研ケノウップ システムの開発 (その 3), 電力中央研究所報告 U02005, (2002).

3.5 音場の解析と制御 Sound field analysis and control

伊勢史郎

京都大学 工学研究科 建築学専攻

〒 606-8501 京都市左京区吉田本町

Shiro Ise

Department of Architecture and Architectural Systems, Faculty of Engineering,
Kyoto University.

Yoshida-Honmachi, Sakyo-ku, Kyoto 606-8501 JAPAN

Since the principle of the sound field control was proposed based on the Kirchhoff-Helmholtz integral equation, the designing method of the sound field control system has not been studied so much. In this study, we introduce the boundary surface control principle which enable us the sound field control in a wide area around the head. In order to construct the designing method of this system, we have to perform the numerical study by solving the wave equation to obtain the sound field around the head with the designed system.

Keywords: Sound field reproduction, Sound field control, Boundary element method, Kirchhoff-Helmholtz integral equation

1 音場制御について

1.1 音場制御の定義

建築音響の技術は建築の技術とともに始まっており、この技術は建物の中の音響を目的に応じた状態を作り出す技術である。これも音場を制御するということであり、従来の建築音響は音場制御と言い換えるてもそれほど不自然ではない。しかし、ここで建築音響ではなく音場制御という言葉を用いるのは、もちろんそれが異なる技術であるためで、従来の技術がエネルギーのレベルで制御するのに対し、音場制御は波面のレベルで制御する技術ができる。すなわち、音の大きさだけではなく、位相や音波のひろがりの分布などを考慮して制御方法である。

1.2 音場制御の分類

音の波面を制御する技術の伝統的な応用は音のバーチャルリアリティである。また、騒音を波面のレベルでキャンセルする技術であるアクティブ騒音制御もあげられる。これらの技術はいずれも電磁型のスピーカーが発明され、オーディオシステムの研究開発が盛んだった1930年代に原理的な提案がなされている。

1.2.1 音のバーチャルリアリティ

我々が日常的に使うオーディオシステムは、ステレオと呼ばれることがあるが、これはステレオフォニクスの略称であり日本語では立体音響再生と呼ばれる。モノラルは mono-aural、すなわち单一の耳で聞く場合を意味する。両方の耳で聞く場合は binaural である。ステレオフォニクスは 1932 年にベル研究所において最初の実験が試みられた。これは複数のスピーカーを用いた電話回線経由での伝送実験でオーケストラの演奏をよりリアルに再生するチャンネル数を調べるものだった。その結果、水平面の正面方向からの音像定位に関しては 2 チャンネルの伝送によって十分実用に耐えるということが見い出され、それ以来 2 チャンネルの伝送方式がステレオと呼ばれるようになった。このように音響に関してはバーチャルリアリティ技術の実現は古くから試みられているが、厳密な意味での音場再現はあまり試みられていない。Camras は図 1 のようなシステムを提案したが、厳密な意味でのホイヘンスの原理に基づいた音場制御は “Hopeless idea” だと述べている [1]。その理由は従来の理論に基づけば、音場再現室として無響室に音響的に透明な音源を無数に配置する必要があるためである。そのような工学的な非現実的な条件を克服するために、境界音場制御の原理が提案されている [2]。

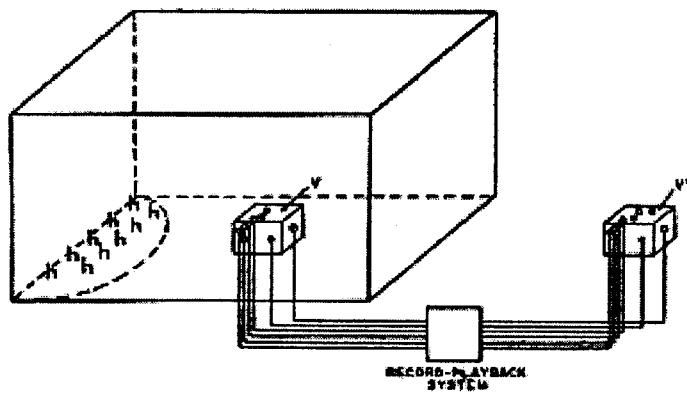


図 1: Camras による古典的な音場再現の概念図

1.2.2 アクティブ騒音制御

騒音を低減させるための伝統的な手法は吸音や遮音による方法の他、塀の回折効果を利用する方法が主なものである。このような従来のパッシブな方法で騒音を低減する場合に特に問題となるのが、低音域での制御効果である。低音域ほど音を減衰させることが難しく、例えば吸音処理を用いる場合には大量の吸音材が必要となり、また遮音の場合には重量の大きい壁が必要になり、塀の場合は著しい高さが必要となる。例えばすでに存在する建物内で低い周波数の音を制御する場合には建築の構造的な部分から設計を見直す必要がでてくる場合も少なくない。このような建築的な限界をはじめ、コストやスペースの問題もあわせて、アクティブ騒音制御の手法が注目されている。この方法はスピーカーを用いて音波を重ね合わせて騒音をキャンセルする方法である。原理的にはステレオフォニクスと同じ時代、すなわちスピーカーの研究が盛んだった 1900 年代前半に提案され、1932 年に P. Lueg による特許が最初の提案と言われている。近年のデジタル信号処理技術

の発展により、適応制御技術の発展もともないながら、実用化に近づいている。現在、空調ダクトの騒音やイヤープロテクターなどについては古くから商用化が進んでいる。一時期は冷蔵庫の騒音や車室内の騒音に対してアクティブ騒音制御が用いられたこともあったが、商用化は長く続いていないようである。最近では構の先端にアクティブ制御装置をとりつけたアクティブ防音構が極めて高速道路の騒音対策として実用化に近い実験を行っている。騒音対策の最後の手法として期待されではいるが、我々が生活する3次元空間にランダムに飛び交う騒音の波面をキャンセルすることは極めて難しく、実用化は足踏み状態である。

2 境界音場制御の原理

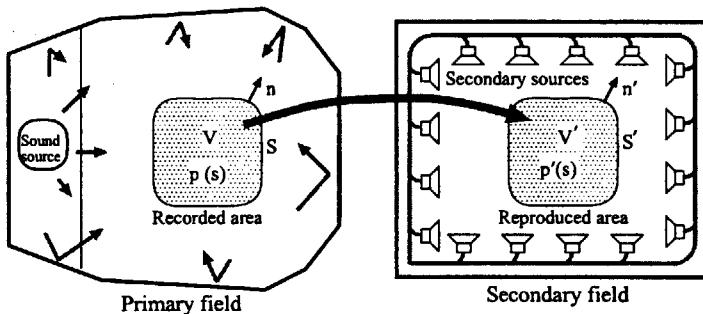


図2: 境界音場制御による音場再現の概念図

図2のように原音場(Primary field)における領域 V 内の音場を再生音場(Secondary field)における領域 V' に再現することを考える。領域 V は領域 V' と同じ形(ユークリッドの意味で合同)であり、 V から V' への写像を $f()$ とすると次式が成り立つ。

$$\forall \mathbf{r}, \mathbf{s} \in V \quad \forall \mathbf{r}', \mathbf{s}' \in V' \quad |\mathbf{r}' - \mathbf{s}'| = |f(\mathbf{r}) - f(\mathbf{s})| = |\mathbf{r} - \mathbf{s}| \quad (1)$$

領域 V 内および領域 V' 内の音圧 $p(\mathbf{s})$ 、 $p(\mathbf{s}')$ はキルヒホップ-ヘルムホルツ積分方程式より次のように表される。

$$p(\mathbf{s}) = \iint_S G(\mathbf{r}|\mathbf{s}) \frac{\partial p(\mathbf{r})}{\partial n} - p(\mathbf{r}) \frac{\partial G(\mathbf{r}|\mathbf{s})}{\partial n} \delta S \quad \mathbf{s} \in V \quad (2)$$

$$p(\mathbf{s}') = \iint'_S G(\mathbf{r}'|\mathbf{s}') \frac{\partial p(\mathbf{r}')}{\partial n'} - p(\mathbf{r}') \frac{\partial G(\mathbf{r}'|\mathbf{s}')}{\partial n'} \delta S \quad \mathbf{s}' \in V' \quad (3)$$

ただし、 S 、 S' はそれぞれ原音場、再生音場における境界上の座標、 n 、 n' は境界 S 、 S' 上の法線方向ベクトルである。ここで式(1)の関係より式(2)、(3)におけるグリーン関数およびその法線方向微分はそれぞれ等しく次のように表される。

$$G(\mathbf{r}|\mathbf{s}) = G(\mathbf{r}'|\mathbf{s}') \quad (4)$$

$$\frac{\partial G(\mathbf{r}|\mathbf{s})}{\partial n} = \frac{\partial G(\mathbf{r}'|\mathbf{s}')}{\partial n'} \quad (5)$$

したがって、次式が成り立つ。

$$\begin{aligned} \forall \mathbf{r} \in S \quad \forall \mathbf{r}' \in S' \quad p(\mathbf{r}) &= p(\mathbf{r}') \frac{\partial p(\mathbf{r})}{\partial n} = \frac{\partial p(\mathbf{r}')}{\partial n'} \\ \implies \forall \mathbf{s} \in V \quad \forall \mathbf{s}' \in V' \quad p(\mathbf{s}) &= p(\mathbf{s}') \end{aligned} \quad (6)$$

これは原音場と再生音場における境界上における音圧と音圧勾配がお互いに等しければ、その内部の領域も等しくなることを示している。ここで注意しなければならないことは $p(\mathbf{r}')$ 、 $\partial p(\mathbf{r}')/\partial n'$ は音源の大きさではなく制御されるべき音圧と音圧勾配であるという点である。したがって再生音場において音源を境界上に設置する必要はなく、音源は領域外部の任意の点に置けばよい。式(6)は境界 S 上の音圧と法線方向の音圧勾配が原音場と等しくなるように再生音場の音源を調節することができれば、領域 V 内の音場は完全に再現されることを示している。このようにグリーン関数を音源と考えずに定数と考えることにより音源に関する物理的制約、すなわち音響的に透明なモノポール、ダイポール音源を境界上に無響室内のあらゆる壁面に設置しなければならないという制約から解放されることになる。

参考文献

- [1] M. Camras: Approach to recreating a sound field. J. Acoust. Soc. Am. **43** (1968) 1425–1431.
- [2] 伊勢 史郎, “キルヒホッフ-ヘルムホルツ積分方程式と逆システム理論に基づく音場制御の原理”, 日本音響学会誌, 53(9), 706-713, (1997)

3.6 Globus の Data Grid 機能 The Data Grid Function of Globus

榎 裕和

コンパックコンピューター株式会社

〒140-8641 東京都品川区東品川 2-2-24 天王洲セントラルタワー

Hirokazu Sakaki

Compaq Computer K.K.

Tennoz Central Tower 2-2-24 Higashi-shinagawa Shinagawa-ku, Tokyo 140-8641 Japan

Globus Toolkit offers two main Data Grid functions, Grid FTP, and Replica Management.

GridFTP extends the function which Data Grid requires from a general FTP protocol. This offers a reliable data transfer function at the high speed in Data Grid environment like a parallel file transfer.

Replica Management Service is a function for managing Replica which consists of completeness or a part of data set, and it can be used in order to reduce the access load to data.

Keywords : Globus Toolkit, Data Grid , Grid FTP, Replica Management, GGF

1. はじめに

Globus Toolkit は 2 つの主要な Data Grid 機能、GridFTP と Replica Management を提供する。

GridFTP は一般的な FTP プロトコルに対して Data Grid が要求する機能を拡張する。これは、例えば分割並列ファイル転送のような、Data Grid 環境での高速で信頼性の高いデータ転送を提供する。

Replica Management Service は、データセットの完全あるいは一部からなる Replica を管理するための機能で、データへのアクセス負荷を分散するために利用できる。

ここでは、Globus の Data Grid 機能を中心に Data Grid の概要を説明する。

2. Globus 概要

Globus プロジェクトは米 Argonne 国立研究所、NASA,NCSA, シカゴ大学等が中心となって推進する広域分散コンピューティングに関する研究開発プロジェクトである。

Globus プロジェクトでは Grid Computing 関連技術の基礎研究開発を行っており、Grid Architecture に基づく Tool 群として Globus Toolkit を開発している。

Globus Toolkit は Grid Computing に必要な要素技術を実装し、オープンソースで提供されている。

Globus Toolkit は多くの Grid プロジェクトで基盤技術として採用され、事実上 Grid ミドルウェアの De-fact Standard となっている。

3. Data Intensive Computing

高エネルギー物理アプリケーションや気象モデリングのアプリケーションは Data Intensive Computing の典型的な例の一つとなっている。これらアプリケーションで効率的にデータを利用するため Data Grid 技術の利用が研究されている。

CERN 研究所の LHC(Large Hadron Collider)では、数 PetaBytes/年の割合で実験データが生成されると予想されている。この実験データを数千の研究機関で効率的に利用するために、生成された実験データを階層的に配置した Data Grid 環境を構築している。

この DataGrid 環境では、高速で信頼性の高いデータアクセスと、データを効率的に分散配置するための Replica 管理の機能が必要とされている。

一般に Replica 管理においては、データの利用形態、生成周期、更新周期等に応じた管理 Policy の確立も重要な課題となってくる。LHC で生成されるデータは更新が発生するのは生成後短時間に限られるという性質があるため、運用上の制約は少なくすんでいる。

CERN 研究所の Data Grid 環境は Replica 機能を使用した大規模な Data Grid Solution の例として認識されている。

4. GridFTP

Globus Toolkit では、安全で高速なデータアクセスのために、FTP プロトコルを Grid 用に拡張した GridFTP を提供している。

Grid FTP では特に転送効率を高めることを目標に、並列データ転送を行う Parallel Data Transfer や Striped Data Transfer、ファイル中の必要なデータのみを転送する Partial File Transfer 等の機能拡張がなされている。

SC '00 では Parallel File System と Grid FTP の Striped Data Transfer の機能を組み合わせた Striped Grid FTP Server のデモが行われ、iperf によるネットワーク性能値に近い転送レートを実現している。

Grid FTP の主要な拡張機能は以下のようになっている。

- Grid Security Infrastructure(GSI)と Kerberos サポート
 - 認証、セキュリティ
- Third-party control of data transfer
 - 巨大データを分散環境で使用するために Storage Server 間のデータ転送時に Third-party control 機能を提供する
- Parallel Data Transfer
 - ftp command の拡張、data channel の拡張
- Striped Data Transfer
 - Grid ftp protocol 拡張、分散並列 Storage System(DPSS 等)対応
 - 並列ファイル転送
- Partial File Transfer
 - ファイルの一部分を転送、途中のみの指定は拡張機能
 - 高エネルギー物理アプリケーション等で有効
- Automatic negotiation of TCP buffer/window size
 - ftp command の拡張

- TCP buffer size, window size の変更機能
- 自動 negotiation
- Support for reliable and restartable data transfer
- 高信頼性、耐障害性
- ftp 拡張機能についても実装

5. Replica Management

広域分散環境でデータを効率よく利用するためには、データアクセスを分散できる Replica 機能は非常に有効となってくる。

Globus Toolkit では Grid 環境で Replica を利用するための Replica Management 機能を提供しているが、以下のような方針で実装を行っている。

- Replication 情報と Metadata 情報の分離
 - 論理ファイル名と物理位置の関連付け情報のみでアクセスできる
 - Metadata には論理ファイル名が登録される
 - 論理ファイルの情報からデータを特定後 Replica Management により実際のデータへのアクセスを行う。
- Replication Semantics
 - 複製ファイルの更新は同期行わない
 - Replica の更新処理に対する一貫性は保証されない
 - Original(コピー元)の管理はしない
 - Replica の実体の管理はユーザーが行う
- Replica Management Service の一貫性
 - システム障害時の Replica 情報の一貫性
 - ファイルの整合性が取れない状態では Replica の登録を許可しない
(登録時の一貫性は保証される)
- Rollback
 - Replica Management 情報の更新の Rollback
replica entry の追加/削除、属性の変更等の一連の操作でエラーが起きた時
- No Distributed Locking Mechanism
 - 分散ロック機能の複雑性、障害時の矛盾回避
Replica Management を経由しないアクセスを禁止できない

Globus では、Metadata と Replication 情報を別に管理している。そのため MDS の機能を利用して必要なデータに関する Metadata を検索できるようになっている。Metadata には論理ファイル名が格納されており、Replica Management の機能を利用することで、論理ファイル名に対応する最適な Replica にアクセスすることが出来るようになっている。

Globus の Replica Management 機能は Replica 同士の同期は行わない実装となっている。そのため、Replica 同士の整合性は利用者が責任を持つ必要がある。環境によっては Replica 同士の同期を取る実装も可能だが、その場合には、同期通信の負荷の増大、分散ロック機構等同期のために実装が複雑になる等、別の問題が発生する。この点は性能とデータ整合性の Tradeoff であり、扱うデータの性質や運用

形態、ユーザーやリソースの配置状況等によっては、他の実装の方がよい場合もありうると思われる。

6. GGF の Data Grid Group

Global Grid Forum は Grid の標準化のための世界規模の Forum として機能している。

Global Grid Forum では Grid に関する技術的な検討や仕様の標準化のためにいくつかの Working Group と Research Group を構成して活動している。2002 年 8 月現在で 23 の Working Group と 10 の Research Group が活動しており、さらにいくつかの新しい Working Group と Research Group が提案されている。

Data 处理に関しても 2002 年 8 月現在以下の Working Group と Research Group が活動している。

- Grid FTP Working Group
 - FTP プロトコルの拡張として Grid FTP の仕様定義、ドキュメントを作成
 - プロトコル仕様書の V1.0 に関して議論が行われている
- Data Replication Research Group
 - Data Replication に関する要求仕様、実装方法についての検討
 - 既存システムの問題点、提案仕様についての議論
- Persistent Archives Research Group
 - 永続的データ保存のための必要条件、アーキテクチャ策定
 - 必須機能、拡張機能の洗い出し、分類に関する議論
- Database Access Integration Services Working Group
 - データベースアクセスのための Grid Service 仕様の定義
 - いくつかの Grid プロジェクトと協調し仕様に関する議論を行っている
- Grid High Performance Networking Research Group
 - ネットワーク技術と Grid 技術の最新動向の調査、情報交換、ネットワーク標準化活動との連携
 - 相互に情報を認識すべき事項をドキュメント化、ドラフトが作成されている
- Data Transport Research Group (BOF)
 - Wide Area でのデータトランスポートについて標準化のためのフォーラム提供

参考文献

[1]Globus Toolkit Technologies For The Data Grid

The Globus Project Argonne National Laboratory USC Information Sciences Institute

[2]Data Management and Transfer High-Performance Computational Grid Environments

Bill Allcock, Joe Bester, John Bresnahan, Ann L.Chervenak, Ian Foster, Carl Kesselman, Sam Meder, Veronika Nefedova, Darcy Quesnel, Steven Tuecke

[3]The Globus Toolkit™: Introduction

The Globus Project™ Argonne National Laboratory USC Information Sciences Institute



3.7 計算機マテリアルデザイン Computational Materials Design

赤井久純

大阪大学 大学院理学研究科 物理学専攻

〒560-0012 豊中市待兼山町 1-1

Hisazumi AKAI

Department of Physics, Graduate School of Science

Osaka University

1-1 Machikaneyamacho, Toyonaka, Osaka 560-0012, Japan

The concept of computational materials design is explained and the applications to the diluted magnetic semiconductors are discussed. The computational materials design is a system composed of three ingredients, namely, the materials simulation, the discovery of mechanisms, and the guess for a new material. These three are combined to each other as a system, forming *materials design engine*.

Keywords : Computational materials design, First principles calculation, Electronic structure, Spintronics, Diluted magnetic semiconductors

1. はじめに

第一原理計算に基づいて物質の基礎的物性を調べるためのシミュレーションが盛んに行なわれるようになってきた。このようなシミュレーションでは単体金属や規則合金、金属間化合物、半導体などについては凝集的性質や磁気的性質が、多くの場合、数パーセントの誤差範囲で予測することができる。

しかも、これらのシミュレーションを行なう計算機コードは標準となるものが提供されており、だれにでも開放されているものが多い。1970～1980年代、種々の第一原理計算手法や、計算機コードが研究者によって世界各地で開発されていた頃、多くの計算機コードが門外不出であり、計算機コードは自分でゼロから開発するか、あるいはそれらを保有するグループに弟子入りするしか第一原理計算を研究手段に用いるすべがなかった時代からみると隔世の感がある。

物性シミュレーションをさらに進めると、物性予測のみならず、物質設計を行なおうという試み「計算機マテリアルデザイン」にいきつく。本稿ではこのような試みについて報告する。またこのような試みの結果生まれた、あるいは今後生まれる、計算機コードや「計算機マテリアルデザイン」を実現するシステム、ノウハウを広く公開し、共有していくことの意義を考えてみる。

2. シミュレーションとデザイン

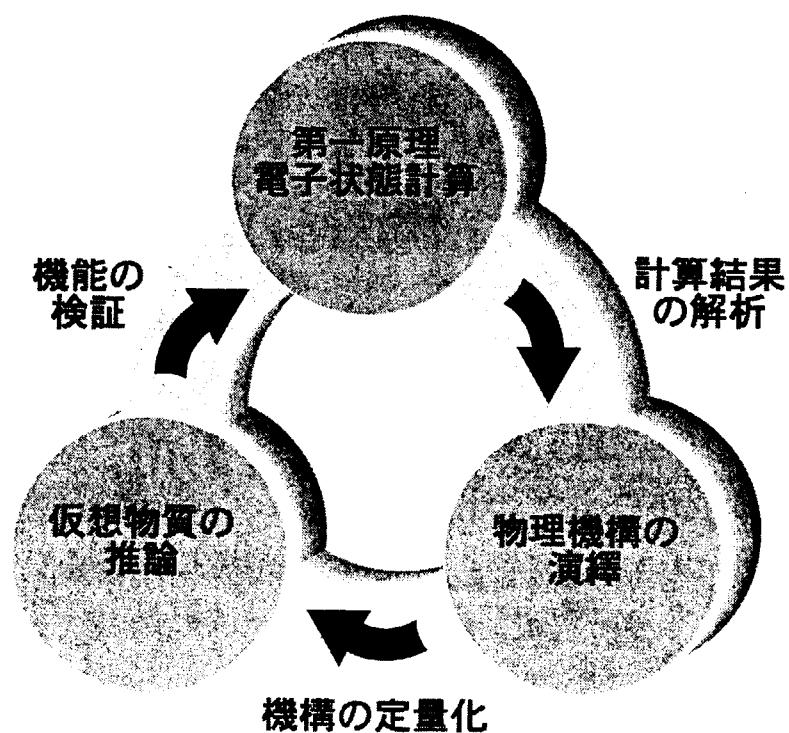
物質科学におけるシミュレーション技術の発達には目をみはるものがある。実際、20年前には、最先端であり、それだけで何本もの論文になったような計算が日常茶飯事のように実行されている。これらの技術は物性理論の発展の成果として捕らえることができるのであるが、これまで理論物理学の発展や普及は決してそのような形では進んでこなかつたものである。このような発展が可能になった理由の一つとして、計算機の急激な発展を上げることが出来よう。しかし、それ以上に重要な理由は、実は、現代的なシ

ミュレーションの中心である第一原理計算の基礎を与えていた密度汎関数法の局所近似が、驚くほど単純で、しかも極めて健全な理論であるという良い性質を持っていたことによる。現在、シミュレーションが高度化するにつれ、局所密度を超える近似の必要性が訴えられるようになっている。その必要性は当然のことであるが、局所近似の持つ、優れた性質を考慮するならば、まだまだ局所密度近似とそれに基づくシミュレーションの天下は続くものと予想される。

しかし、このことはシミュレーションがいつまでも物質科学の理論的側面の切り札で有り得ることを意味しているわけではない。新しい発展は局所密度近似を超える努力とはむしろ異なった方向で急激に進んでいる。すなわち、シミュレーション技術の発展の結果として、その上の段階に位置づけられるマテリアルデザインが今後の物質科学の発展の現実的な方向として認識されつつある。

ここで、シミュレーションとマテリアルデザインとの関連について述べておく。マテリアルデザインはシミュレーションを基礎にしており、シミュレーション技術を高度に用いることによって可能となるが、シミュレーションとは全く違った概念であることに注目する必要がある。すなわち、シミュレーションは与えられたシステムに対してその物性を予測することであるのに対して、マテリアルデザインは与えられた物性に対してその物性を実現するシステムを予測することであり、いわばお互いに逆問題の関係にある。一般的にいって、マテリアルデザインはシミュレーションよりはるかに困難で高度な技術と計算量を必要とするプロセスである。このような技術が高度な計算利用、第一原理計算によって初めて可能になることから、われわれはこのようなプロセスを計算機マテリアルデザインと呼んでいる。

現在のところ、計算機マテリアルデザインの技術はかならずしも確立したものではなく、そのプロトタイプと呼ぶべきものが試行錯誤的に構築され、徐々に(しかし目覚しい)成果をあげてきている段階である。この技術は我々が新しい物質をデザインしようとするとき、自然に採るであろう方法をシステムとして構築するものである。このシステムを我々は計算機マテリアルデザインエンジンと呼んでいる。計算機マテリアルデザインエンジンは3つの主要部分から構成されている。すなわち、マテリアルシミュレーション、機能の演えきと定量化、新しいシステムの推論である(下図参照)。



詳しい説明は要さないであろうが、最も難しいステップは物理機構の演えきとそれに続く機構の定量化とかかれた中間ステップである。これらは機械化することが困難な部分であり、まさに創造的な思考が要求される部分である。

この計算機マテリアルデザインエンジンを実現するために既存の多くの計算機コードパッケージがシステムに参加している。現在、これらのパッケージは個別的に存在し、システムとして統合されていない。それでもなんとか成り立っているのは、計算機ナノマテリアルデザインの多くの部分が未だ人手に頼っているからである。今後、計算機マテリアルデザインを有効な基盤技術として社会に提供していくためには、機構の定量化を含む大半の部分を機械化し、人間でなければできないところを可能な限り絞っていく必要である。計算機マテリアルデザインの確立に向けた、そのような努力が集中的に行なわれている段階である。

3. 計算機マテリアルデザインの実例

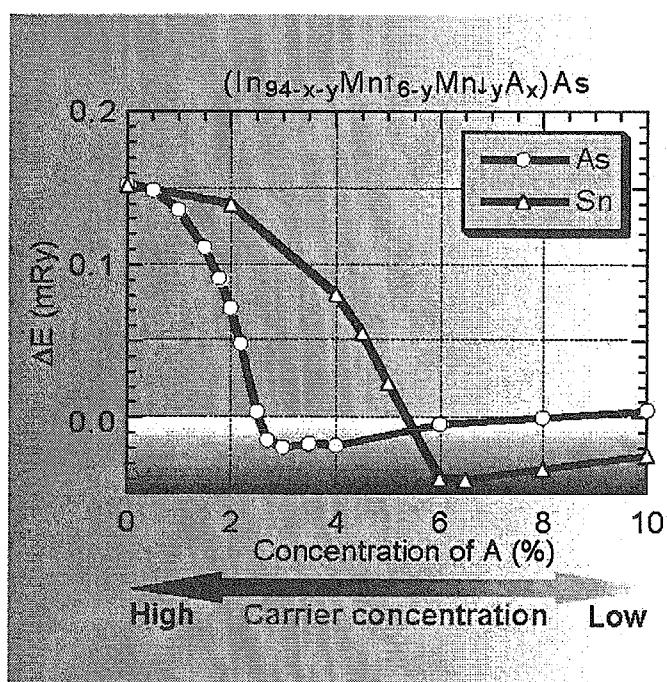
前章において、計算機マテリアルデザインの技術はそのプロトタイプと呼ぶべきものが試行錯誤的に構築され、徐々に（しかし目覚しい）成果をあげてきていると述べた。ここではそのような実例の一つについて簡単に報告する。題材は希薄磁性半導体である。

(Cd, Mn)Te などの II-VI 族希薄磁性半導体は昔から良く知られており、光アイソレータなどがすでに製品化されている。Mn が局所磁気モーメントを持つことを反映して、半導体であると同時に磁性を示す。しかし強磁性を示すことはなく、常磁性を示すかあるいは低温ではスピングラス的である。したがって磁性の特性を生かすためには常に外部から磁場を加えた状態で利用する必要がある。ところが、約 10 年前に初めて合成された III-V 族希薄磁性半導体はそれ自身が強磁性物質である。半導体が同時に強磁性体であるということは画期的なことであり、例えば、磁性がバイアス電圧によって制御されたり、スピンドル分極した電流がゲート電圧によって制御されれば全く面白い世界が広がるであろう。そのような応用までを視野にいれて、現在、希薄磁性半導体ヘテロ構造を用いたトンネル磁気抵抗や磁気メモリーの研究などが始まっている。

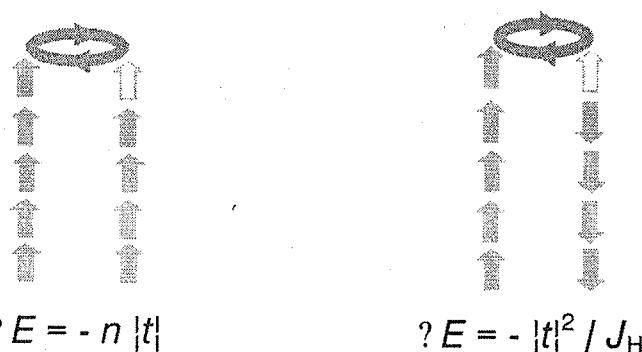
現在までに強磁性を示すことが実験的に確立している III-V 族希薄磁性半導体は (In, Mn)As と (Ga, Mn) As である。これらは p 型の伝導を示す場合に限って強磁性となり、キュリー温度はそれぞれ約 10K, 100K である。これらのキュリー温度は現実的な応用を考える場合には低すぎると言わざるを得ない。Mn 濃度が上がればキュリー温度が上昇する可能性があるが、III-V 族化合物半導体に対する Mn の固溶度は实际上 0 % であり、非平衡分子線エピタキシーでも 6 ~ 7 % が限度である。どのようにすれば高い強磁性キュリー温度もつ希薄磁性半導体を得ることができるだろうか。

(In, Mn)As に対して電子状態を第一原理に基づいた計算がなされた。計算の結果、この系は Mn 濃度が薄い領域においても磁性状態が安定であり、さらに、強磁性状態と（反強磁性的）スピングラス状態を比較すると強磁性状態の方がエネルギー的に安定であることがわかった。また、この物質は強磁性状態で多数スピン（↑スピンとする）電子に関しては、金属的であるが、少数スピン（↓スピンとする）電子に関しては、絶縁体、あるいは半導体である（ハーフメタルと呼ばれる）ことが計算から明らかになった。さらに実験の状況をシミュレートするために、In の一部を As で置き換えた計算がおこなわれた。このように As が本来あるべき位置に入らずに間違つ

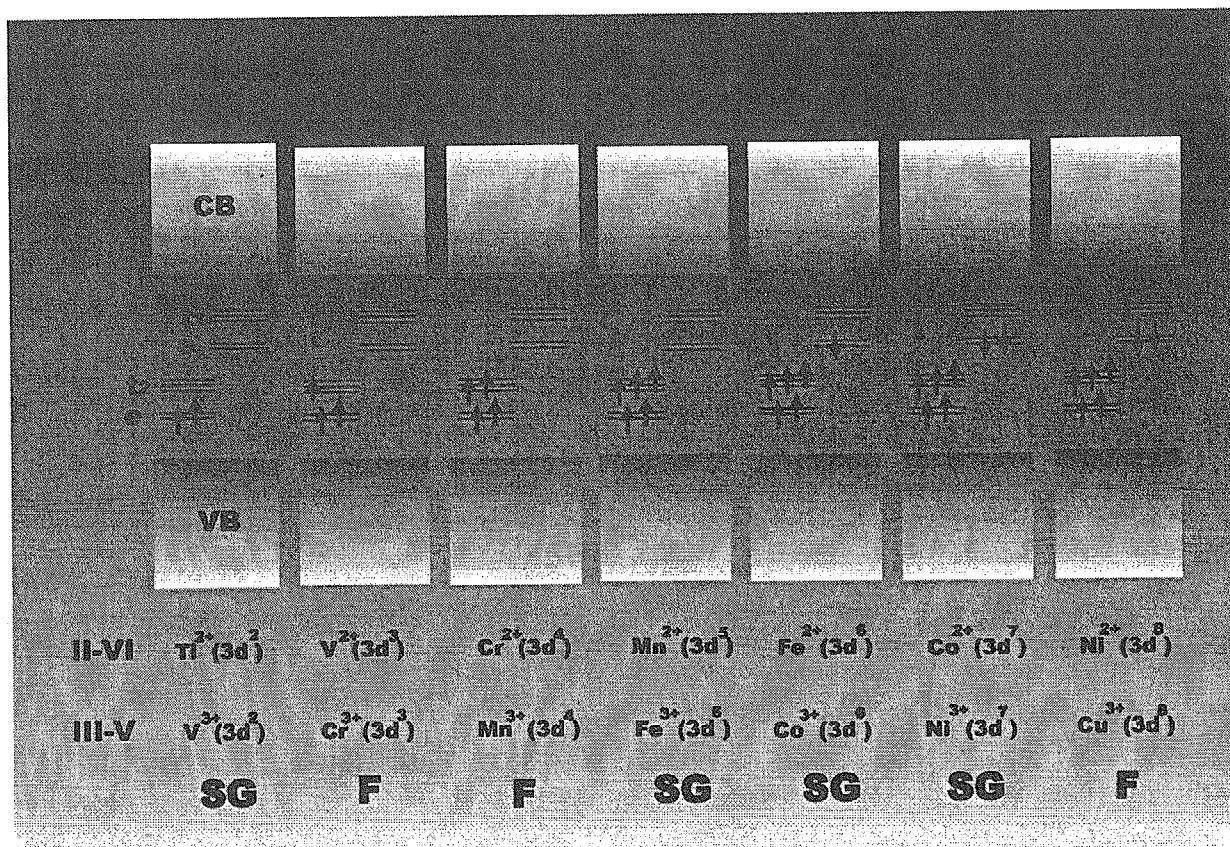
て In 位置に入る(アンチサイト As と呼ばれる)ということは実験的には必然的に起こっており、このようなアンチサイト As の放出する電子によって、Mn の持ち込む正孔が補償されキャリア濃度が減少してしまう。計算によると、このようなアンチサイト As 濃度が増え、キャリア濃度が減少すると、ある濃度で強磁性が不安定になりスピングラス状態が実現する(下図参照)。下図で縦軸の ΔE は強磁性とスピングラスのエネルギー差であり、 ΔE が負の領域は強磁性が不安定になる領域である。横軸はキャリア(正孔)濃度である。このように、キャリア濃度によって強磁性状態が大きく制御される様子(キャリア誘起強磁性と呼ばれる)は実験結果をよく説明するものである。



ここまででは、マテリアルシミュレーションである。次の段階は機構の解明とその定量化である。計算結果を詳しく解析し、また、計算結果の背後にある物理を考察することによって、キャリア誘起強磁性の発現には、2重交換相互作用(下図参照)と呼ばれる、電子移動によるエネルギー利得に由来する機構が重要であることが確認された。下図で左側は2重交換相互作用の過程、右側はそれと競合関係にあり、スピングラスを安定化させる超交換相互作用の過程である。



このような考察のもとに、キャリア誘起強磁性の発現を決めている重要な要素は磁性イオン間を、混成を通じて移動することのできるキャリア数であることがわかる。すなわち、d-p 混成の大きさと、混成可能な状態を占めている電子、正孔の数である。このような考察の結果は下表のように佐藤らによってチャートの形にまとめられている。



ここで、II-VI と書かれている行は II-VI 族化合物半導体の II 族位置を遷移金属で置き換えたときを、III-V と書かれている行は同じく III 族位置を遷移金属で置き換えた場合の傾向をあらわしている。たとえば、II-VI 族化合物半導体に Ti を入れる場合にはスピングラスが安定であるが、V を入れた場合には強磁性が安定である。III-V 族半導体に遷移金属を入れた場合にはこの傾向が一つだけ左側にずれる。すなわち V を入れたときはスピングラスが安定で Cr を入れたときは強磁性が安定になる。

このような化学的傾向は、定性的ではあるが、新しい磁性半導体を見出すための良い指針になる。すなわち、仮想物質の推論である。実際、このような考察から得られた指針をたよりに多くの室温強磁性半導体がデザインされ、そのキュリー温度までが予言されている。例えば、(Zn,TM)O、(Ga,TM)N やカルコパイライト型磁性半導体、III-V/III-V および II-V/II-VI 磁性半導体超構造などがデザインされている。さらに、そのうちのいくつかは実際に合成に成功し、予想通り強磁性が発現しており、マテリアルデザインの有効性が実証されている。

4. マテリアルデザイン手法の開発とその共有

前章で述べたように、計算機マテリアルデザイン手法は少なくとも磁性半導体のデザインにおいてうまく働いているように思える。現在のところ多分に人手にたよっているところがあるが、方法論としては確立してきていると言える。このような手法をさらに自動化して自動計算システムである計算機マテリアルデザインエンジンを構築していくことが課題であり、完成に向けて努力が続けられている。

計算機マテリアルデザインの構成部品はこれまで蓄積された数多くの第一原理電子状態計算用のコードとパッケージである。主要なパッケージとしては、MACHIKANEYAMA2000, OSAKA2000, KANSAI99, NANIWA2000 などがある。それぞれ、KKR-CPA 計算、第一原理 MD 計算、フルポテンシャル LAPW 計算、表面反応計算などを独立に行なうことができる。それ以外にさまざまなユーティリティーやインターフェース、支援プログラムが含まれており、今後さらにマテリアルデザインエンジンの構成に参加するコードは増えていくと考えられる。

重要なことは、マテリアルデザインエンジンが公開を原則としており、またユーザによる開発への参画を期待していることである。このような公開のもたらす知的資産の共有によって、研究成果を広く社会に還元するとともに、ユーザの参画によって開発の大きな進展をはかることが可能になる。すでに MACHIKANEYAMA2000 や OSAKA2000 はウェブ上で公開されており、それらを用いてすぐにでも第一原理計算を行なうことができる。その他のコードも条件が整い次第公開していく予定である。

それとともに、マテリアルデザインエンジンのような総合的なシステムには、異なった分野でも用いられる共通の概念や手法が多く用いられている。このようなシステムの構築に必要な手法た考え方を様々な分野の研究者が共有していくことは極めて有意義なことと考えられる。そのような方向へ向けての研究者、支援者の努力とネットワーク構築が強く望まれる。

4. まとめ

物性理論、物質科学がシミュレーションからデザインへと大きく発展していることを説明し、そのような試みの典型として計算機マテリアルデザインエンジンの概念について述べた。計算機マテリアルデザインの例として、希薄磁性半導体のマテリアルデザインの例をあげて、計算機マテリアルデザインエンジンとの対応を説明した。また、最後にこれらの開発されたシステムの共有と異なった分野との交流が今後の発展に必須であることを述べた。

シミュレーションからデザインへ発展は始まったばかりである。今のところ順調であるように見えるが、デザインはシミュレーションにくらべて桁違いに困難な過程であることを認識する必要がある。また、信頼のにおけるデザインにはこれまで用いられてきた近似的手法が十分ではなく、根本的な見直しが必要とされる局面に遭遇する可能性が非常に高い。おそらく中相関電子系や、超伝導物質の取り扱いにおいて困難が予想される。そのような観点からの研究にも早急にとりかかる必要がある。



3.8 生体超分子系のシミュレーション Molecular Simulation of Bio Super Molecules

北尾彰朗、石田 恒、城地保昌、目次正一

日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

〒619-0215 京都府相楽郡木津町梅美台 8-1

Akio KITAO, Hisashi ISHIDA, Yasumasa JOTI, Shoichi METUGI

Center for Promotion of Computational Science and Engineering,

Japan Atomic Energy Research Institute

8-1 Umemidai Kizu-cho, Souraku-gun, Kyoto 619-0215 Japan

Recently, massive parallel molecular dynamics simulation has become an important tool to study biological super molecules. In this article, we summarize the present status of molecular simulation of bio super molecules, problems in this area, and possible solutions to solve the problems.

Keywords : Molecular dynamics simulation, parallel algorithm, super molecule

1. はじめに

生体内には蛋白質などの生体高分子が多数集合して形成される生体超分子が存在する。これらは生命現象を維持するための単位としてさまざまな機能を発揮しており、その立体構造や機能のメカニズムは現在注目を集めている。

これまで考案してきた手法を活用して大規模な分子シミュレーションによって生体超分子系を可能にするためにどのようなことが必要なのか、最新の研究動向と原研での取り組みについて解説する。

2. 生体超分子系のシミュレーションの現状

近年、蛋白質などから構成される生体超分子の立体構造決定が進んでいる。これに対応して分子動力学シミュレーションを用いてようやく大規模な生体超分子の物性や機能の研究がおこなわれるようになってきた。近年、イオンチャネルや F1 モーターなどの膜タンパク質を中心に大規模な分子シミュレーションによる研究がおこなわれている[1-4]。しかし、これらの計算で扱われているシステムのサイズは最大でも 20 万原子程度である。一方、生体内のナノマシンとしての生体超分子にはこれより一桁大きなサイズの超分子系が多数あり、これらを分子シミュレーションをもじいて研究していくことが期待されている。現在の計算アルゴリズムと計算機能力の発展によって既に 100 万原子オーダーの計算は実現可能な状況になっており、今後の研究の進展が期待されている状況にある。

このような大規模シミュレーションが可能になってきた背景には、計算機能力の向上以外にも、いくつかの重要なアルゴリズム上の発展がある。まず第 1 に、並列計算におけるプロセッサ間の通信を最小限に抑えるために空間分割法の開発が進んできたことが挙げられる。しかし、生体高分子などのように静電相互作用が重要な系では、PME (Particle-Mesh Ewald) 法や

PPPM(Particle Particle Particle-Mesh) 法を用いる必要があるので空間分割だけでは十分に通信量を減らすことができないという問題がある。第2のアルゴリズム上の進展は、プロセッサ間の計算量を均等化するための load balancing の手法の開発が挙げられる[5・7]。更に、生体高分子では化学結合に関する相互作用を並列計算機で効率的に計算するためのアルゴリズムの開発が必要であった[6,8・9]。

3. 現在のシミュレーションプログラムの問題点と解決策

実際に開発されているプログラムは多数あり、インターネット上でのリンク集でもみることができる（例えば、<http://www.mrflip.com/resources/MDPackages.html> や <http://www.fz-juelich.de/zam/pt/mdproject/software.html>）。このように活用できるプログラムは多数あるが、実際に生体超分子のシミュレーションに利用されているプログラムは少ない。その原因には大きく挙げて3つの原因があると考えられる。ひとつはプログラムの多くが、アルゴリズムの開発を主眼に開発されており、実際に活用するのに十分な機能を備えていないことがある。第2に、並列化・高速化以外に大規模系をシミュレーションするのに重要な様々な計算アルゴリズム、例えば高精度のインテグレータや様々な効率的なサンプリング法などが十分実装されていないことが挙げられる。我々はこの問題を解決するために、今までに開発されている最新のアルゴリズムを調査し、それらを統合したプログラム開発を目指している。第3の原因是、分子シミュレーションを活用した様々なツール、例えば、実験データを用いた立体構造構築・自由エネルギー計算・分子モデリングなどのツールが十分実装されていないことが挙げられる。分子動力学計算のプログラムコアを中心にこのようなツールを備えたプログラムを開発・整備していくことが、生体超分子系の研究を進めていく上で必須であると考えられる。

4. おわりに

バイオ分野では超分子系のシミュレーションに対する期待は高まっており、計算技法の発展と計算機能力の向上によって本格的な研究が期待されている。我々は、今回述べた現状の問題点を解決したプログラムシステムの開発をおこなうことで、この分野での発展に寄与していきたいと考えている。

参考文献

- [1] S. Bernèche and B. Roux, *Nature*, 414 (2001), 73-77.
- [2] E. Tajkhorshid, et al., *Science*, 296 (2002), 525-530.
- [3] R.A. Böckmann and H. Grubmüller, *Nature Structural Biology*, 9 (2002), 198-202.
- [4] B.L. de Groot and H. Grubmüller, *Science*, 294 (2001), 2353-2357.
- [5] L. Nyland, *J. Parallel & Distributed Computing*, 47 (1997) 125-138.
- [6] L.V. Kale, et al., *J. Comput. Phys.* 151 (1999), 283-312.
- [7] T.P. Straatsma and J.A. McCammon, *IBM Systems J.*, 40 (2001), 328-341.
- [8] K. Esselink and P.A.J. Hilbers, *J. Comput. Phys.* 106 (1993), 108-114.
- [9] D. Brown, et al., *Comput. Phys. Commun.* 103 (1997) 170-186.

3.9 「データ宝石箱」による大規模データの視覚化

Large-Scale Data Visualization Using “Data Jewelry-Box”

伊藤 貴之 山口 裕美

日本アイ・ビー・エム(株) 東京基礎研究所

〒242-8502 神奈川県大和市下鶴間 1623-14

Takayuki ITOH Yumi YAMAGUCHI

IBM Research, Tokyo Research Laboratory

1623-14 Shimotsuruma, Yamato-shi, Kanagawa, 242-8502 Japan

E-mail: {itoh,yyumi}@trl.ibm.com

This paper introduces our hierarchical data visualization technique, “Data Jewelry-Box,” and shows its some applications. Our technique represents hierarchical data as a set of nested rectangles. It applies a novel packing algorithm that places thousands of rectangles in nearly minimized display spaces in only several seconds. The paper also shows the applications of the technique for the visualization of Web sites, processes of distributed computers, and tree structure of keywords in large-scale document data.

Keywords : Hierarchical data visualization, Rectangle packing, Delaunay triangular mesh, Web site visualization, Distributed system visualization, Text data visualization.

1. はじめに

例えば、計算機のファイルシステム。例えば、大会社の人事組織。例えば、Yahoo に代表されるカテゴリ分類型のウェブサイト。身のまわりには、階層構造で整理されたデータは非常に多く存在する。これらの階層型データを対話的に表現する GUI の大半は、まず上位階層を表示し、ユーザーの選択操作によって徐々に局所的に下位階層を表示させるように構築されている。これらの GUI とは逆に、最初から階層型データ全体を一画面に展開して表示することで、データの分布を一目で理解するような視覚化手法はないものか？ ちょうど宝石店のショーケースのようにデータ全体を見渡せる視覚化手法はないものか？ …… 著者らはこのような発想から、大規模階層型データ視覚化手法「データ宝石箱」を開発した。

「データ宝石箱」は、入れ子状に配置された長方形によって階層型データを表現する。図 1 にその実用イメージの例を示す。画面空間を有効活用するために、本手法では長方形をできるだけ隙間なく配置することで、占有空間を小さく抑えている。

本報告では、まず 2, 3 章にて、「データ宝石箱」[1-3] のアルゴリズムを概観する。続いて 4 章にて、「データ宝石箱」の適用例として、ウェブサイトのアクセス分布 [3, 4]、分散計算環境におけるプロセス分布、大規模テキストデータにおけるキーワード群の構成、の各種データに対する視覚化の実行例を示す。5 章にて、関連研究との比較について述べ、6 章にて本報告の結論と課題を述べる。

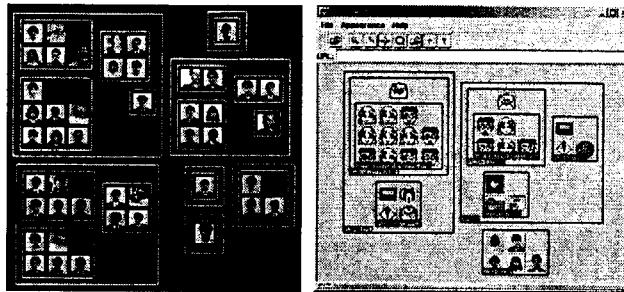


図 1. 「データ宝石箱」の実用イメージ。(左) 46 人の人物をグループ分けした分布図の表示。(右) 計算機ファイルシステムのディレクトリ階層を入れ子状に表示したもの。

2. 「データ宝石箱」のアルゴリズム概要

まず「データ宝石箱」における階層型データ全体の配置手順について説明する(図 2 参照)。本手法では、まず最下位階層を構成するノードをアイコン(図 2 の場合は正方形)で表現して、それを隙間無く配置する。続いて、これを包括する長方形を生成する。続いて、これらの長方形群を隙間なく配置し、同様にこれを包括する長方形を生成することで、上位階層を表現する。以上の処理を、最下位階層から最上位階層に向けて反復することで、データ全体の配置を決定する。

ここで「データ宝石箱」では、以下の条件をできるだけ満たすように長方形の配置場所を決定する。

[条件 1] 隣接長方形との干渉がまったくない位置に長方形を配置する。

[条件 2] 長方形の配置領域を囲む占有領域が最小となる位置に長方形を配置する。

上記の 2 条件を満たすように長方形を配置する問題は、占有面積を最小化するように入力形状群を配置する最適化問題として、古くから知られている。この問題は主に、VLSI 回路の基板配置、板金や服飾型紙への部品配置などの用途で実用されている。これらの用途では、遺伝子アルゴリズムなどの最適化手法を用いて部品の配置を実現している例が多い。しかし、数分～数時間の計算時間を要することが多く、対話的の操作を要する視覚化の分野には向かない。著者らは、最適解でなくてもいいから、ある程度良好な配置結果を、短時間に算出する手法を導入することにした。詳細については 3 章にて述べる。

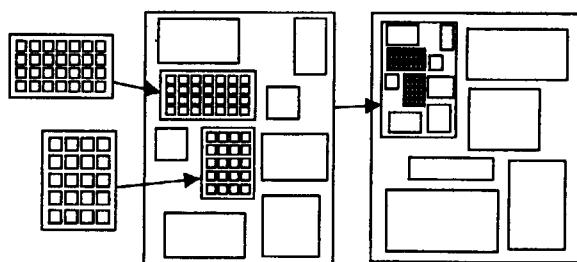


図 2 階層型データの画面配置順。まず最下位階層を配置し、続いて上位階層に向かって配置処理を反復する。

著者らが最近提案した「データ宝石箱 II」では、ノードの位置情報を記録するテンプレートを導入している[2]。この手法では、前述の[条件 1][条件 2]だけでなく、下記の[条件 3]も同時に満たすように長方形を配置する。

[条件 3] テンプレートに記述された位置にできるだけ近い位置に長方形を配置する。

ここで「データ宝石箱 II」にテンプレートを導入する意義を説明する（図 3 参照）。

例えば、「このデータは画面の左上に置きたい」「このデータは真ん中に置きたい」というようにデータの配置をユーザーがデザインしたいことがあるとする。このようなときには、ユーザーのデザイン結果として得られるノードの位置をテンプレートに記述してから、本手法でノードを配置することで、ユーザーのデザイン意図をノード配置に反映することができる。

また、「新しいデータから順に左から」「アルファベット順に上から」というように、配置画面の座標軸に何らかの意味を持たせてデータを配列させたいときがあるとする。このようなときには、各ノードの座標値を算出したものをテンプレートに記述してから、本手法でノードを配置することで、何らかの意味に沿って左右または上下に並んだ配置結果を得ることができる。

また、時系列に沿って微量ずつ変化するデータを、できるだけ類似した表示結果で見比べたいときがあるとする。このようなときには、直前の時刻における配置結果をテンプレートに記述してから、本手法でノードを配置することで、シームレスな配置の変化を実現できる。

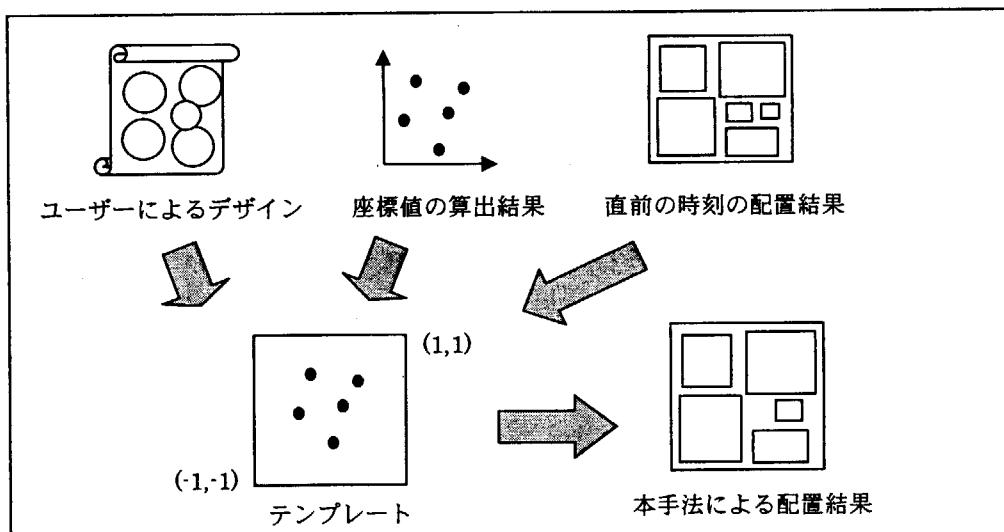


図 3：「データ宝石箱 II」のイメージ。テンプレートに格納した座標値を参照して長方形群を配置する。

3. 「データ宝石箱」に用いられる長方形配置アルゴリズム

図 2 からもわかるように、「データ宝石箱」では、階層型データ中の 1 階層は長方形の集合で表現される。本章では、[条件 1] [条件 2] [条件 3] をできるだけ満たし、かつ高速に、長方形の集合を画面空間に配置するアルゴリズムを紹介する。

「データ宝石箱」では、階層型データを表現する長方形群を、1 個ずつ漸進的に画面空間に配置する。この際に、長方形を重なることなく配置できる隙間を高速に探索して、その位置に長方形を配置する。適切な配置場所を高速に探索するために、すでに配置されている長方形群の中心点、および長方形群の占有領域を囲む長方形領域の 4 頂点、を連結する Delaunay 三角メッシュを用いる（図 4 参照）。

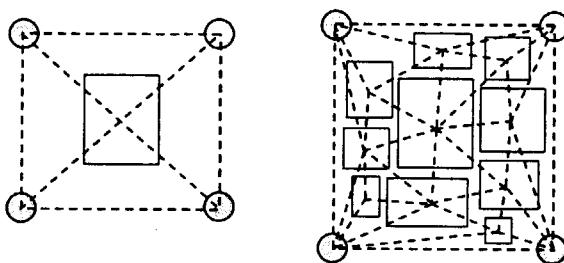


図 4 (左) 三角メッシュ(点線)の初期状態。面積が最大である長方形だけが配置された状態である。(右) すでに配置された長方形の中心点群、占有領域の4頂点の中心点、を連結する三角メッシュ。

本アルゴリズムの手順を図 5 に示す。またアルゴリズム中の各処理について、以下に解説する。詳細については文献 1) 2) を参照していただきたい。

1. 長方形の配置順番を決定する。
2. 未配置である長方形を、順番に従って 1 個抽出し、2.1~2.3 の処理を行う。
 - 2.1 三角形の処理順番を決定する。
 - 2.2 未処理である三角形を、順番に従って 1 個抽出し、2.2.1~2.2.2 の処理を行う。
 - 2.2.1 三角形内部に、長方形の候補位置をいくつか算出する。
 - 2.2.2 各々の候補位置について、長方形の配置場所としてのふさわしさを評価する。
 - 2.3 長方形の配置場所を決定し、三角メッシュを更新する。

図 5. 1階層を構成する長方形群の配置手順。

3.1 長方形の配置順番

本アルゴリズムでは、長方形を 1 個ずつ漸進的に画面に配置する。長方形の配置順番について以下に説明する。

「データ宝石箱」では、長方形を面積でソートして、面積の大きい順に長方形を配置する（図 6 (左) 参照）。[条件 2] を重視する観点から、まず大きな長方形を配置し、続いて小さな長方形を配置できる隙間を探すことによって、占有領域の拡大を抑えている。

「データ宝石箱 II」では、まず面積が最大である長方形を配置し、続いてその長方形に距離が近い順に残りの長方形を配置する（図 6 (右) 参照）。[条件 3] を重視する観点から、隣接順に長方形を配置することで、長方形間の位置関係を保持している。

3.2 三角形の探索順番

1 個の長方形を配置する際に、本アルゴリズムでは Delaunay 三角メッシュを構成する三角形を 1 個ずつ探索しながら、長方形の配置にふさわしい位置を探し出す。三角形の探索順番について以下に説明する。

「データ宝石箱」では、三角形を大きさでソートして、大きい順に三角形を処理する（図 7(左) 参照）。[条件 2] を重視する観点から、大きな三角形になるほど内部に隙間がある可能性が高い、というヒューリスティックに基づいて処理順を決定している。三角形の大きさの基準には、面積、内接円半径、外接円半径などを用いることができる。

「データ宝石箱 II」では、まずテンプレートに記述された座標値を包括する三角形を抽出し、その三角形を処理する。続いてその三角形を出発点にして、幅優先探索によって隣接三角形を探査し、テンプレートに記述された座標値から一定距離内である三角形を対象として処理を進める（図 7(右) 参照）。[条件 3] を重視する観点から、テンプレート座標値に近い三角形から順に処理している。

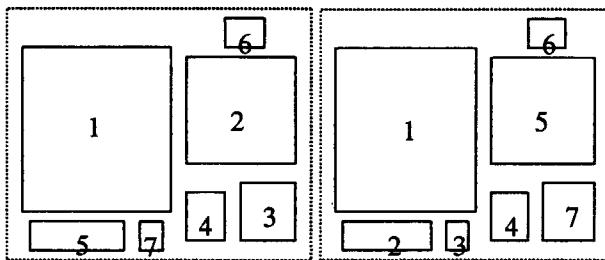


図 6. (左) 「データ宝石箱」における長方形の配置順番。(右) 「データ宝石箱 II」における長方形の配置順番。

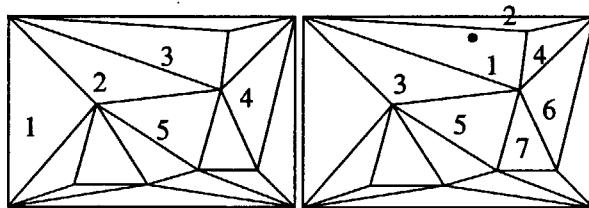


図 7. (左) 「データ宝石箱」における三角形の処理順番。(右) 「データ宝石箱 II」における三角形の処理順番。

3.3 長方形の候補位置の算出

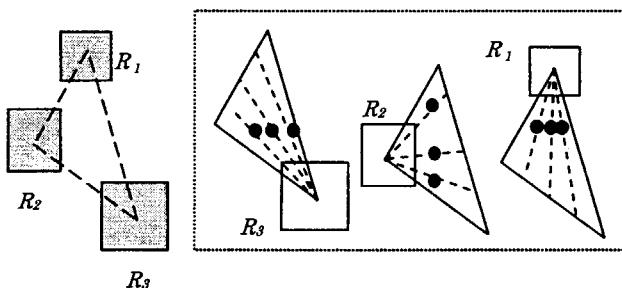


図 8. 長方形の候補位置の決定。左図のような三角形に対して、右図の黒丸が候補位置となる。

1 個の三角形を探索する際に、本アルゴリズムでは三角形内部に複数の候補位置を算出し、その中から長方形の配置にふさわしい位置を選択する。候補位置の算出方法について以下に説明する。

長方形の候補位置を算出するために本手法では、まず三角形の各辺を n 等分に分割する。続いて三

角形の各頂点について、対辺の n 等分点と連結する $(n-1)$ 本の線分を生成する。この各々の線分上で、三角形の頂点上にすでに配置された長方形と接する位置を、これから配置する長方形の候補位置とする（図 8 参照）。

著者らの実験では、「データ宝石箱」では、「 n の値を $n=2$ に固定しても、十分な配置結果が得られている。一方「データ宝石箱 II」では、十分な配置結果を得るために n の値を適応的に変更する必要がある。そのため「データ宝石箱 II」のほうが、候補位置が多くなり、そのぶん計算時間も増加する傾向にある。

3.4 候補位置の評価式

本アルゴリズムでは各々の候補位置に対して、長方形の配置へのふさわしさを評価値として算出し、評価値が最も良好である位置を長方形の位置として選択する。評価値の算出式について以下に説明する。

「データ宝石箱」では、ある候補位置に長方形を配置したことによる占有領域の拡大量を S とし、候補位置ごとにこれを算出する。 S の値には、占有領域の面積や外周長などを用いることができる。[条件 1] を満たし、かつ $S = 0$ である候補位置が 1 個見つかったら、図 5 の処理 2.2 を終了し、その位置に長方形を配置する。[条件 1] を満たし、かつ、 $S = 0$ である候補位置が存在しない場合には、[条件 1] を満たす候補位置の中で S の値が最小である位置に長方形を配置する。

「データ宝石箱 II」では、占有領域の拡大量 S の他に、テンプレートに記述された座標値と候補座標値との距離 D を導入して、 $aD+bS$ を候補位置の評価式とする。ここで a, b はユーザーが指定する正値の定数である。[条件 1] を満たす候補位置の中で $aD+bS$ が最小である位置を特定し、この位置に長方形を配置する。

3.5 三角メッシュの更新

長方形の位置を決定したら、本アルゴリズムでは以下の方法によって三角メッシュを更新する。

$S > 0$ である位置に長方形を配置する場合、いま配置する長方形は三角メッシュの四隅をはみだしてしまう。この場合には、まず長方形の占有領域を囲む長方形の 4 頂点のうちいずれかを移動し、いま配置する長方形も包括するような占有領域を作成する。

続いて、いま配置する長方形の中心点を三角メッシュに追加する。まず中心点を包括する三角形の 3 頂点を、その中心点と連結する。続いて、Delaunay の条件を満たすように三角メッシュの辺を入れ替える（図 9 参照）。

このように Delaunay 条件を満たす三角メッシュを使い続けることで、細長い三角形の生成を低減し、効率よく長方形の候補位置を算出する。

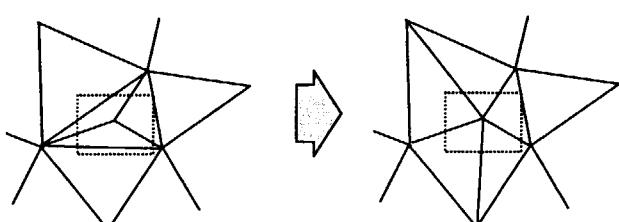


図 9. (左) いま配置した長方形の中心点を三角形の 3 頂点に連結した状態。(右) 三角形の辺

を局所修正して、三角メッシュを更新した状態。

4. 適用例

本章では、「データ宝石箱」を用いた情報可視化の事例をいくつか紹介する。

4.1 ウェブサイトのアクセス分布の視覚化

著者らはすでに、「データ宝石箱」をウェブサイトのアクセス分布の視覚化に適用した事例を報告している[3][4]。本節では、その概要と画像表示例について紹介する。また図10に、本事例の処理の概要を示す。

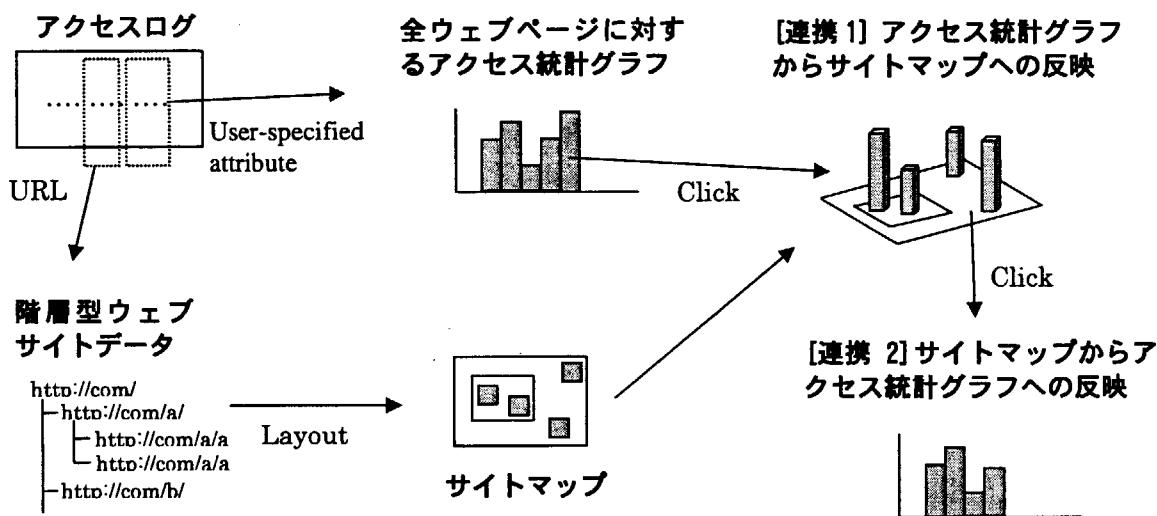


図10. ウェブサイトのアクセス分布視覚化事例の処理の概要。

入力データ

著者らが報告した視覚化事例では、ウェブサーバーに蓄積されるアクセスログファイルを入力データとした。アクセスログには、サイト閲覧者がウェブページにアクセスしたときの、1)サイト閲覧者のIPアドレス、2)認証を行った際のユーザー名、3)アクセス日時、4)リクエスト内容、5)ステータス、6)転送バイト数、7)アクセスされたページのURL、8)リンク元のURL、が記録されている。

サイトマップの自動生成

ウェブサイトの構造を表現するサイトマップを自動生成するために、本事例ではアクセスログからURLを抽出して、そのディレクトリ階層を参照してウェブページの階層型データを構築する。

続いて本事例では、「データ宝石箱」を用いて上記の階層型データを画面配置する。本事例では、ウェブページをアイコンで、ディレクトリを入れ子状の箱で表現することで、ウェブサイトのサイトマップを表現する。

アクセス統計グラフの表示

本事例では、サイト閲覧者のアクセス傾向を視覚化するために、アクセスログからユーザーの指定した属性を基準にしてアクセス数を集計した棒グラフを作成する。本報告ではこの棒グラフを、アクセス統計グラフと呼ぶ。アクセス統計グラフは、属性に基づいた分類を横軸に、アクセス数を縦軸に

とる。アクセスログの属性のうち、1)、7)、8)に関しては、アクセス数の多い順に一定数（著者らの実装では30項目）を、左から並べて表示する。

連携1：アクセス統計グラフからサイトマップへの反映

アクセス統計グラフで、ユーザーが関心のある項目をクリックすると、サイトマップ上で、指定された項目に関するアクセスがあったウェブページのアイコンをハイライトする。このときアイコンに高さを与えることで、個々のページのアクセス数を表示する。このようにして、アクセスログの特定の属性に対するアクセス分布を、サイトマップ上で視覚化できる。

連携2：サイトマップからアクセス統計グラフへの反映

サイトマップで、ユーザーが関心のあるウェブページのアイコンをクリックすると、そのページへのアクセスを集計した統計グラフが表示される。これによりユーザーは、サイト全体のアクセス傾向だけでなく、特定のページに対するアクセス傾向も知ることができる。

ここで、約2000ウェブページを公開しているウェブサイトを題材として、1週間のアクセスログから得られるアクセス傾向を視覚化した実験例を示す。ウェブページに対するアクセスだけを視覚化の対象にするために、本実験ではまず前処理として、URLが画像ファイルやスタイルファイルなどを示している行を、アクセスログから削除した。

このアクセスログを日付で分類集計して、横軸が日付、縦軸がアクセス数を示すアクセス統計グラフを作成した（図11(左)参照）。さらに、このアクセス統計グラフを構成する7本の棒グラフを、1時間単位で分割して24色に色分けした。

同様に、アクセスログをステータスで分類集計したアクセス統計グラフを作成した（図11(右)参照）。このグラフでも、棒グラフを1時間単位で分割して24色に色分けした。

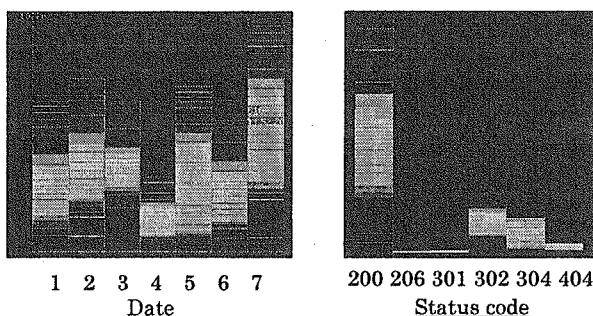


図11 (左) 日付で分類集計したアクセス統計グラフ。(右)ステータスで分類集計したアクセス統計グラフ。

図11(左)より、このウェブサイトでは最終日のアクセス数が最も高いことがわかった。ここで[連携1]を用いて、最終日の棒グラフのある1時間をクリックして、サイトマップ上でその1時間のアクセス分布を表示した（図12参照）。このアクセス分布から、なぜ最終日のアクセスが多かったのか、その背景を探索した。

図12の右上部に描かれた円の内部に、ほとんどのページがアクセスされたディレクトリを発見した。[連携2]を用いて、これらのページへのアクセスをサイト閲覧者のIPアドレスで分類して表示すると、すべてのページに同一IPアドレスからのアクセスがあることがわかった。これらの結果から、あるディレクトリのファイルをすべて見ている熱心なサイト閲覧者が存在していたことがわかった。

また、図12の右下部に描かれた円の内部に、非常にアクセスの多いページを見た。[連携2]を用いて、そのページへのアクセスを対象として、リンク元のURLで分類したアクセス統計グラフを表示した。すると、ある新聞会社のURLからのリンクによって訪れているサイト閲覧者が多いことがわかった。リンク元である新聞会社にアクセスしてみると、新聞会社のオンラインニュースにそのページが紹介されていたことがわかった。

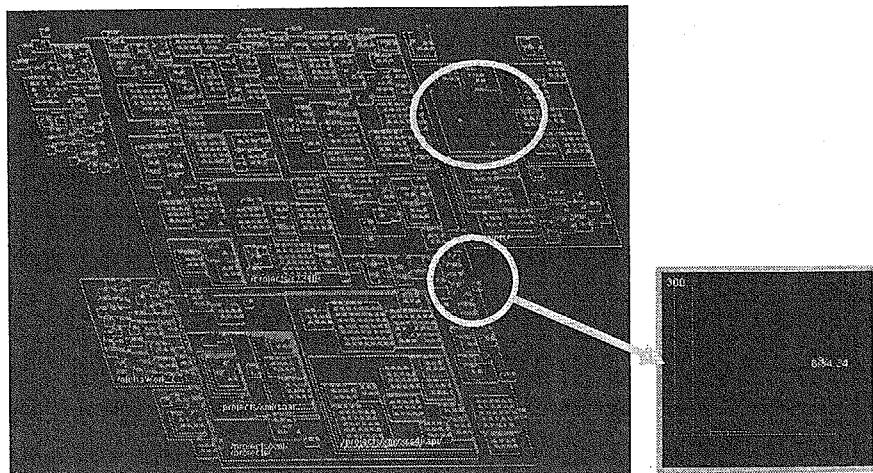


図12. [連携1]を用いて、アクセス統計グラフ中のある1時間をクリックし、その時間のアクセス分布をサイトマップ上で表現したもの。さらに[連携2]を用いて、サイトマップ上のウェブページのアイコンをクリックすると、そのウェブページに対するアクセス統計グラフを表示できる。

従来のウェブアクセス分析ツールでは、棒グラフ、折れ線グラフ、ランキング表、などといった単純な表現だけで、ウェブサイト全体の概略的なアクセス傾向を表現することが多い。このような概略的な表現方法だけでは、必ずしもすべてのアクセス傾向を発見できるとは限らない。「データ宝石箱」を用いてウェブページ単位でアクセス数を表現することにより、詳細なアクセス傾向の発見とその背景の分析を支援することができるので、ウェブアクセス分析ツールの改善に寄与できると考えられる。

例えば本事例で[連携1]を用いて、ウェブサイト全体のアクセス分布を視覚化することで、特徴的なアクセス傾向をもつウェブページを見ることができた。例えば図12の右上部のディレクトリのように、個々のウェブページへのアクセスは決して多くないながらも、ディレクトリ内のすべてのウェブページにアクセスされているというような、地味ながら興味深いアクセス傾向を発見することができた。このようなアクセス傾向の発見において、本事例は従来のツールに比べて有利であるといえる。

さらに[連携2]を用いて、そのアクセス傾向の背景を知ることができた。例えば図12の右下部のウェブページのように、ユーザーが関心のある任意のウェブページのアクセス傾向を表示することができた。本事例はすべてのウェブページのアクセス数表示を一画面で実現しているため、任意のウェブページのアクセス傾向を、1クリックで直接探索することが可能である。この点において本事例は、従来のツールに比べて有利であるといえる。

4.2 分散計算環境におけるプロセス分布の視覚化

著者らは現在、「データ宝石箱」を分散計算環境のモニター画面として用いる実験をしている。その一例として、分散計算環境におけるプロセスの推移をリアルタイム表示する視覚化ツールの事例を示す。

本事例では、Grid Computing のフレームワークである OGSA (Open Grid Service Architecture) の API を用いてプロセスを分散した。図 13(上)に示す通り、本事例ではサーバー群の窓口にあたる親サービスを用意し、クライアントからのジョブを受け付ける。親サービスはそのジョブを複数のプロセスに分割し、複数の子サービスに割り当てる。このとき本事例では、図 13(下)に示すように、プロセスを未処理プロセスと処理済プロセスに分類し、さらに処理済プロセスをサービスごとに分類することで、プロセスの推移を階層型データとして表現する。この階層型データの時間変化を逐次的に画面表示することで、プロセスの推移を視覚化する。

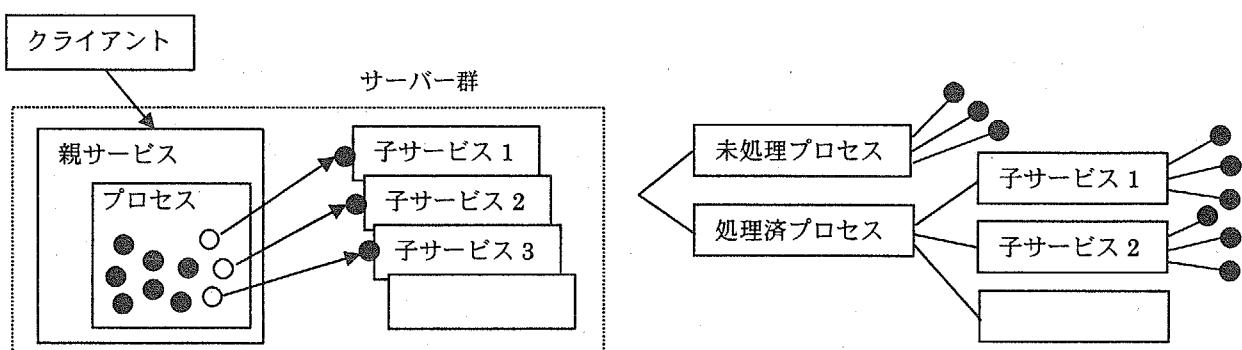


図 13. 本事例における分散計算環境のプロセス分布。(上) システム構成。(下) プロセス推移を階層型データとして表現したもの。

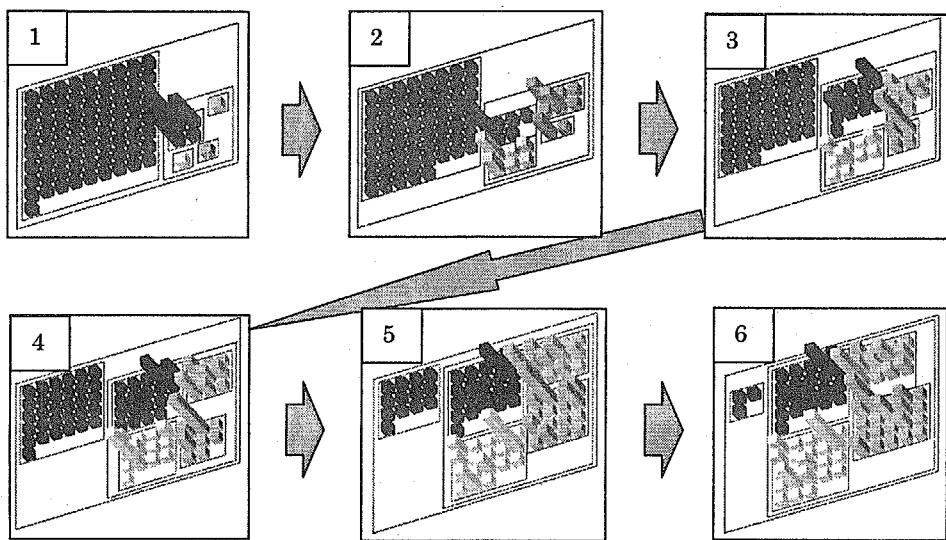


図 14. 本事例によるプロセス分布の視覚化結果。

本事例によるプロセス分布の視覚化結果を、図 14 に 6 コマの画像で示す。図中の左側にある青い棒が未処理プロセスを表しており、右側にある 4 色の棒が 4 個のサービスに割り振られたプロセスを表

している。各々の棒グラフの高さは、各プロセスの所要時間を示している。本事例では「データ宝石箱 II」を用いることにより、逐次的に推移するプロセス分布をシームレスに画面表示している。また、階層型データの画面配置 1 回の計算時間は 1 秒以下であり、リアルタイムなプロセス監視に十分利用できることがわかる。

4.3 大規模テキストデータにおけるキーワードの視覚化

私たちの周囲には、多種な大規模テキストデータが存在する。例えばニュース記事、ウェブサイト、図書情報、論文データベース、実験データ、医療データ、などがこれに相当する。これら大規模テキストデータの有力な分析手段として、キーワードの抽出と構造化があげられる。

大規模テキストデータから得られるキーワード群を、階層型データとして構造化するケースは多い。例えば、大分類を表すキーワードを上位階層とし、その下に中分類を表すキーワード、さらにその下に小分類を表すキーワード…というようにして階層構造を構築することができる。あるいは、あるキーワードを出発点にして、それと相関性の高いキーワード群を連結し、さらにそれらと相関性の高いキーワード群を連結し…というようにして有向グラフを構築することができる。

構造化されたキーワード群を視覚化する試みは、例えば文献 [7] などで報告されている。文献 [7] に報告された拡張 ConeTrees に代表されるような、キーワード群を線で連結する表現形式による視覚化手法は、キーワード群の相関性や親子関係の視覚化に適しているといえる。

「データ宝石箱」も同様に、構造化されたキーワード群の視覚化に用いることができる。「データ宝石箱」では、2 次元的なデータ配置により高さ方向を属性値（例えばキーワードの出現頻度、最新出現日、各種スコアなど）の表現に用いることができるので、構造と属性値の相関性の視覚化などに向いているといえる。

図 15 に、階層型データとして構造化された大規模キーワード群の視覚化の例を示す。今後の課題として、この視覚化結果からどのような知見を得ることができるか検討したい。

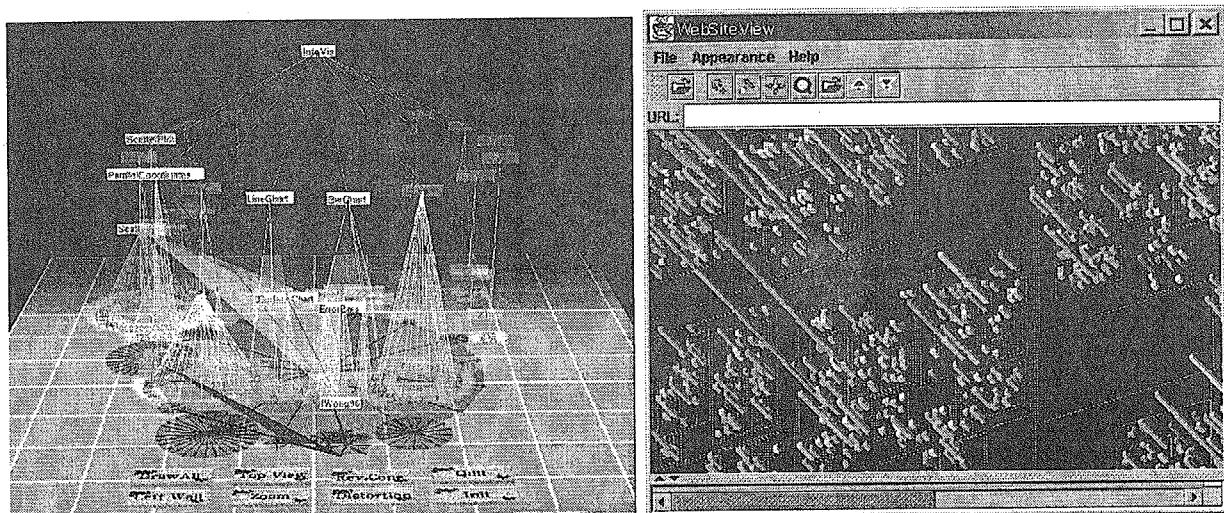


図 15. 大規模キーワード群の視覚化の例。(左) 拡張 ConeTrees による視覚化例。(右) 「データ宝石箱」による視覚化例。

5. 関連研究

本報告に関連する研究分野として、階層型データの視覚化手法をいくつか紹介する。

階層型データの視覚化手法の多くは、階層型データを木構造として図示している。大規模データへの対応や、ナビゲーションなどの操作性などの観点から、Hyperbolic Tree [5], Cone Tree [6, 7], Fractal Tree [8]、などの多くの研究が報告されている。

帯グラフや円グラフを入れ子構造にすることで、階層型データの統計的特徴を表現する手法もいくつか報告されている [9, 10]。その代表的な手法であるTreemap [9]の拡張手法として、単純な帯グラフの入れ子構造の代わりに、2次元空間の長方形分割によって階層型データを表現する手法が報告されている [11, 12]。また、近年報告された Quantum Treemap [13] は、著者らが試みているような階層型データのアイコン表示にも適している。

「データ宝石箱」は2次元の入れ子構造で階層型データを表現しているが、3次元の入れ子構造を半透明表示することで階層型データを表現する手法もいくつか提案されている [14, 15]。

本報告に関連する別の研究分野として、ウェブサイトの視覚化手法をいくつか紹介する。

ウェブサイトを視覚化する手法の多くは、ウェブページ間のリンクをアーチとするグラフ構造の視覚化手法を適用している [16-18]。グラフデータの視覚化手法自体の技術的な難易度が高いこともあって、これらの手法は実用化が進んでいないように思われる。

ウェブサイトを階層型データとして視覚化する手法もいくつか報告されており、すでに実用化も進められている [19, 20]。これらの手法は階層型データを木構造として図示していることから、「データ宝石箱」によるウェブサイト表現とは指向が異なる。

ウェブへのアクセス結果の視覚化手法は、個人のアクセス経路の視覚化という観点では多くの研究が報告されている [21-23]。しかし、本報告で示したようなウェブサイト全体のアクセス傾向という観点からの視覚化手法は見当たらない。

分散計算環境の視覚化、テキストデータ群のキーワードの視覚化、に関するサーベイは今後の課題としたい。

6. まとめ

本報告では、著者らがすでに提案している階層型データの視覚化手法「データ宝石箱」の概要を紹介し、その適用例を示した。また本報告により、「データ宝石箱」について以下のような特徴を示すことができた。

- 数百、数千、あるいはそれ以上の規模のデータを一画面に表現できるので、データのもつ局所的な傾向や詳細な傾向を発見しやすい。
- 画面配置に要する計算時間が小さく、リアルタイムな処理に向いている。
- データは2次元的に配置されるので、高さ方向の座標軸を用いてデータの属性を表現するのに向いている。また3次元CGのスキルや装置が必要ない。

第4章で示した適用例以外にも、「データ宝石箱」は多種なデータの視覚化に適用できる。例えば

- 計算機のファイルシステムや、会社の人事組織など、典型的な階層型データ。
- 顧客情報、経理情報、自治体情報、その他いわゆるビジネス系のデータ。
- 遺伝子などの大規模情報のクラスタリング結果。

などの視覚化に有用であると考えられる。

謝辞

「拡張 ConeTrees 技法」の画像例をご提供くださいました、お茶の水女子大学大学院藤代一成教授および山下由美氏に感謝します。また有益な助言を下さった、日本アイ・ビー・エム（株）東京基礎研究所研究員諸氏、および東京大学堀井秀之教授に感謝します。

参考文献

- [1] 伊藤, 梶永, 池端, データ宝石箱: 大規模階層型データのグラフィックスショーケース, 情報処理学会グラフィクスと CAD 研究報告, 2001-CG-104, 2001.
- [2] 山口, 伊藤, データ宝石箱 II ~ 位置情報テンプレートを用いた大規模階層型データのグラフィックスショーケース, 情報処理学会グラフィクスと CAD 研究報告, 2002-CG-108, 2002.
- [3] 山口, 伊藤, 池端, 梶永, サイトマップ表示とアクセス統計表示の連携によるウェブサイト視覚化ツール, 情報処理学会論文誌投稿中.
- [4] 山口, 池端, 伊藤, 梶永, データ宝石箱を用いたウェブアクセスログの視覚化, 第 30 回可視化情報シンポジウム, 2002.
- [5] Lamping J., et al., The Hyperbolic Browser: A Focus+context Technique for Visualizing Large Hierarchies, *Journal of Visual Languages and Computing*, 7, 1, pp. 33-55, 1996.
- [6] Carriere J., et al., Research Paper: Interacting with Huge Hierarchies beyond Cone Trees, *IEEE Information Visualization '95*, pp. 74-81, 1995.
- [7] 山下, 藤代, 高橋, 堀井, 拡張 ConeTrees 技法による DAG 情報の可視化, Visual Computing グラフィクスと CAD 合同シンポジウム 2002, pp. 1-6, 2002.
- [8] Koike H., Fractal Views: A Fractal-Based Method for Controlling Information Display, *ACM Transactions on Information Systems*, 13, 3, pp. 305-323, 1995.
- [9] Johnson B., et al., Tree-Maps: A Space Filling Approach to the Visualization of Hierarchical Information Space, *IEEE Visualization '91*, pp. 275-282, 1991.
- [10] Chuah M., Dynamic Aggregation with Circular Visual Designs, *IEEE Information Visualization '98*, pp. 35-43, 1998.
- [11] Bruls D.M., et al., Squarified Treemaps, *Data Visualization 2000 (joint Eurographics and IEEE TCVG Symposium on Visualization)*, pp. 33-42, 2000.
- [12] Shneiderman B., et al., Ordered treemap layouts, *IEEE Information Visualization Symposium 2001*, pp. 73-78, 2001.
- [13] Bederson B., PhotoMesa: a zoomable image browser using quantum treemaps and bubblemaps, *UIST 2001*, pp. 71-80, 2001.
- [14] Rekimoto J., The Information Cube: Using Transparency in 3D Information Visualization, *Third Annual Workshop on Information Technologies & Systems*, pp. 125-132, 1993.
- [15] Sprenger T. C., et al, H-BLOB: A Hierarchical Visual Clustering Method Using Implicit Surfaces, *IEEE Visualization 2000*, pp. 61-68, 2000.
- [16] Shiozawa H., et al., WWW Visualization Giving Meanings to Interactive Manipulations, *HCI International '97*, pp. 791-794, 1997.
- [17] Doemel P., WebMap - A Graphical Hypertext Navigation Tool, *2nd Intl. Conf. WWW*, 785-789, 1994.
- [18] Hendley R. J., Drew N. S., Wood A., Beale R., Narcissus: Visualizing Information, *Symp. Information Visualization*, 90-96, 1995.
- [19] Inxight Star Tree (TM) SDKs, http://www.inxight.com/products_sp/ht_sdk/index.html
- [20] Durand D., et al., MAPA: A System for Inducing and Visualizing Hierarchy in Web sites, *9th ACM Conference on Hypertext and Hypermedia*, pp. 66-76, 1998.
- [21] Ayers E., Stasko J., Using Graphic History in Browsing the World Wide Web, *4th Intl. Conf. WWW*, 1996.
- [22] Frecon E., Webpath- A Three Dimensional Web History, *IEEE Information Visualization '98*, pp. 3-10, 1998.
- [23] Snowdon D., Fahlen L., Stenius M., A 3D Collaborative Virtual Environment for Web Browsing, *Virtual Reality World Wide '97*, 1997.



3.10 ITBL における可視化システム

Visualization system on ITBL

鈴木 喜雄

日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

〒110-0015 東京都台東区東上野 6-9-3 8 階

Yoshio SUZUKI

Center for Promotion of Computational Science and Engineering,

Japan Atomic Energy Research Institute

6-9-3 Higashi-Ueno, Taito-ku, Tokyo 110-0015, Japan

Visualization systems PATRAS/ITBL and AVS/ITBL, which are based on visualization software PATRAS and AVS/Express respectively, have been developed on a global, heterogeneous computing environment, Information Technology Based Laboratory (ITBL). PATRAS/ITBL allows for real-time visualization of the numerical results acquired from coupled multi-physics numerical simulations, executed on different hosts situated in remote locations. AVS/ITBL allow for post processing visualization. The scientific data located in remote sites may be selected and visualized on a web browser installed in a user terminal. The global structure and main functions of these systems are presented.

Keywords: Grid computing, real-time visualization

1. ITBL の背景と構成

日本原子力研究所計算科学技術推進センターでは、高速ネットワークの整備と併せて注目されるようになったグリッドコンピューティング要素技術¹⁾など最新の情報処理技術の活用により、旧科学技術庁傘下機関の協力のもと、Information Technology Based Laboratory (ITBL) プロジェクトを推進している。本プロジェクトでは、「世界最高レベルの研究環境を整備・維持し、研究推進の一層の向上を図るとともに、産学官の研究への迅速かつ的確な情報提供を進めるため、科学技術・学術情報基盤の整備を推進する」ことを目標に、「研究開発の IT 化を進めることにより、先端的な科学技術の各分野において技術革新を実現するため、平成 17 年までに、国内すべての研究機関のスーパーコンピュータを大容量ネットワーク上に共有化し、高度なシミュレーションなどを行う仮想研究環境 ITBL を構築する」ことを目指している²⁾。日本原子力研究所は、理化学研究所と共同で ITBL に必要な共通基盤技術の開発にあたっている³⁾。

図 1 に ITBL の構成を示す。ITBL は複数の計算機から構成されると考え、運用上独立とみなせる単位をサイトと呼ぶ。ITBL に参加するサイトのうちいずれか一つのサイトに利用者への証明書発行を承認するための RAO (Registration Authority Officers) 端末を設置する。各サイトにおいては、1 セットの ITBL サーバを設置する。ITBL サーバは、利用者端末とサイトを構成する実行計算機群の仲介的役割を果たす。ここで、ITBL の安全性を高めるため、ITBL サーバの機能を物理的に異なる 3 つの計算機「ITBL フロントサーバ」「ITBL 中継サーバ」「ITBL データサーバ」で稼動さ

せている。

ITBL サイトを構成する計算機群のうち、ITBL サーバ以外の計算機を、計算ジョブ実行計算機(以下、単に実行計算機)と呼ぶ。利用者のアプリケーションプログラムは、実行計算機上で実行される。関西研究所木津地区 ITBL 棟に導入された ITBL 計算機システムは、この実行計算機という位置付けで導入されており、ITBL 技術の利用・普及のために整備が進められている。利用者端末は、Web ブラウザが動作可能な PC あるいはワークステーションである。Web ブラウザは Java applet を動作させる機能を持つ必要がある。利用者端末には、ブラウザ以外の特別なソフトウェアのインストールは不要であるが、利用者認証のために証明書のインストールが必要である。

ITBL 基盤ソフトウェアの開発として、ITBL システムが容易に利用できるための様々なソフトウェアが開発されているが、ここでは、実行計算機上で実行される数値シミュレーションの結果可視化システムとして開発されている PATRAS/ITBL 及び AVS/ITBL の概要について述べる。

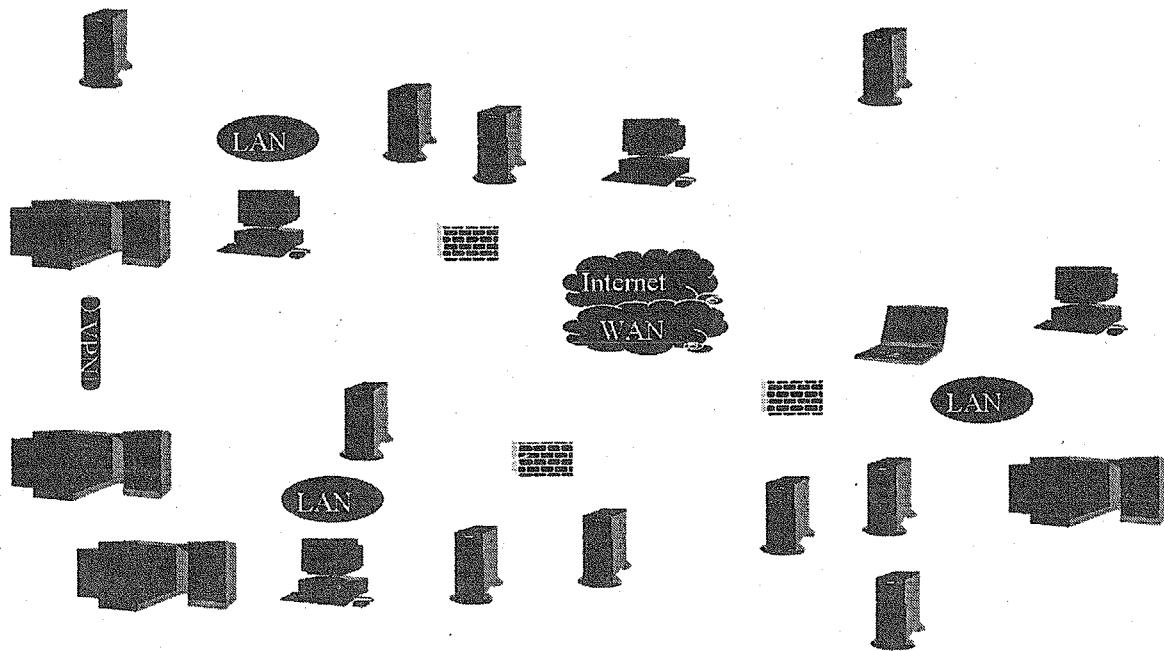


図 1 ITBL 構成図

2. PATRAS/ITBL

PATRAS/ITBL は、ITBL で実行されるシミュレーションにおいて実時間可視化が行えるよう、計算科学技術推進センターが NEC 社と共同で開発を行っている可視化ソフトである。第 1 章に記述されているように、ITBL では、数値シミュレーションは地理的に離れた場所に設置された複数台のスーパーコンピュータを有効に利用して行うことが念頭に置かれているため、実時間可視化ソフトは、このような状況で行われるシミュレーションに対応している必要がある。さらには、このような地理的に離れた場所にいる複数の研究者間でシミュレーション結果の議論を行えるよう、協調的に可視化が行える機能の開発が行われている。PATRAS/ITBL は、このような可視化が実現できるシステムとして開発されている^{4,5,6)}。PATRAS/ITBL を利用するためには、必要な組み込み用サブルーチンをシミュレーションプログラムから呼び出し、必要に応じてユーザ関数の

コーディングを行わなければならない⁷⁾。可視化の図種としては、オブジェクト、等高線、流線、ベクトル矢印、等値面などが採用されている。可視化処理はシミュレーションが実行される実行計算機の各プロセッサで実行され、最終的に時刻ステップごとに1枚の可視化画像が生成される。各プロセッサ上では、当該プロセッサが担当する部分領域についての可視化処理を実行する。部分領域境界における可視化処理のため、隣接するプロセッサ間で必要なデータをやり取りする。各プロセッサ上で生成された画像はZバッファ値配列データを持っており、これを参照し陰面処理することにより、最終的に特定の1つのプロセッサ上で1枚の画像に合成される。ここで並列可視化処理のためMPIが利用されている。生成された可視化画像はITBLサーバを経由して利用者端末に転送されるが、画像圧縮技術を用いることにより、転送されるデータ量が削減されている。図2にPATRAS/ITBLのGUI画面を示す。

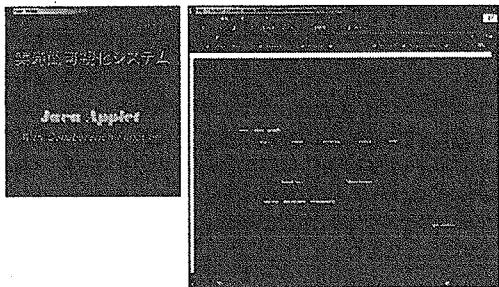


図2 PATRAS/ITBLのGUI画面。

3. AVS/ITBL

AVS/ITBLは、市販ソフトであるAVS/Expressをベースに開発されている。AVS/Expressは科学計算結果のポスト可視化に広く用いられているが、ITBLではデータ読み込みモジュールを拡張することにより、拠点サイトの可視化サーバから任意サイトのITBL実行計算機のディスクに置かれているデータを直接読みに行くことが可能となっている。また、AVS/Expressによって可視化される画像に対して、ネットワークファイル(Vファイル)を指定するだけで、Webブラウザ上で表示できるよう開発されている(Web可視化)。従って、可視化サーバを持つ従来からのAVS/Expressの利用者だけでなく、ITBL環境を利用する全ての利用者が可視化資産を共用でき、可視化を利用した共同研究の促進を図ることができる。図3(a)にWeb可視化の例を示している。利用者はshowImageとshowPolygonを選択することが可能で、showImageボタンをクリックすると、生成された画像が2次元イメージ(GIFデータ)として表示され、showPolygonボタンをクリックすると、3次元イメージ(GFAデータ)として表示される。このようにWebブラウザで表示を行うためには、開発されたCGI連携モジュール及び画像データ生成モジュールを用いて予めAVS/Expressのネットワークを作成しておく必要がある(図3(b))。CGI連携モジュールは、可視化ネットワーク内にインスタンスされている任意の可視化モジュールの可視化パラメータとリンクし、可視化パラメータの参照・更新を可能にする。このようにして、可視化パラメータがCGI連携モジュールにリンクされると、これら可視化パラメータに対して、図3(a)の右側領域に表示されているような入力インターフェースが利用者のブラウザに自動的に生成される。

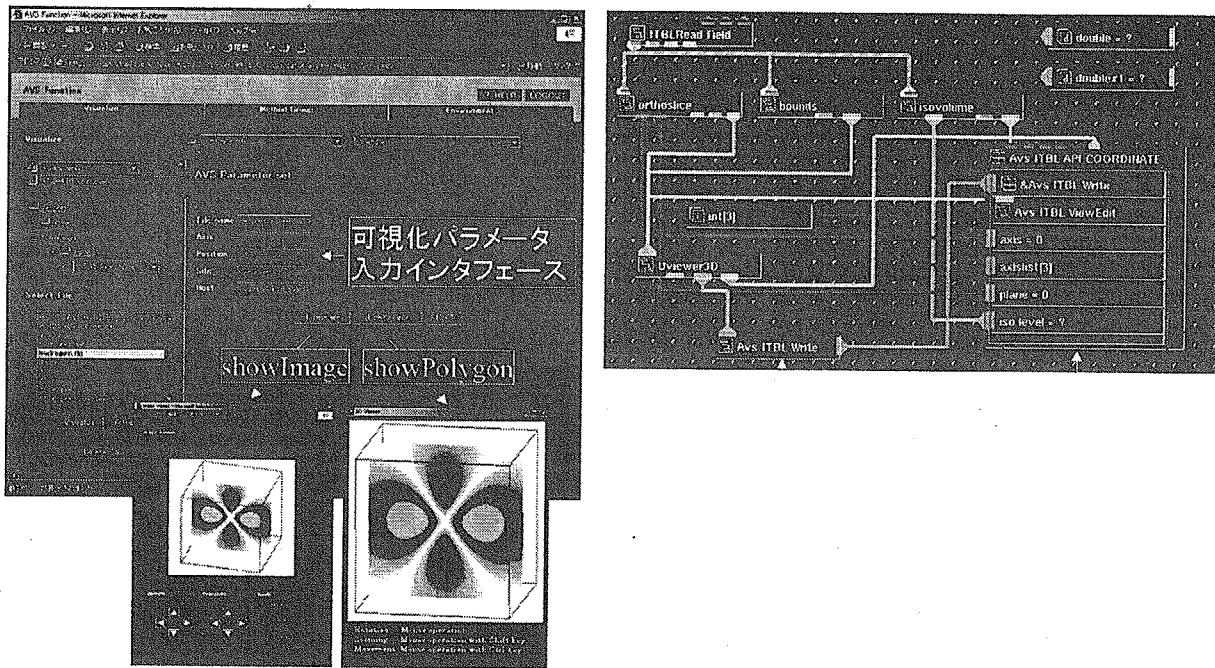


図3 AVS/ITBLのWeb可視化GUI画面(a)と可視化ネットワーク(b)。

4. まとめ

ITBLの概要とその可視化システムであるPATRAS/ITBLとAVS/ITBLの概要についての記述を行った。これら開発は、これまで計算科学技術推進センターで開発された遠隔関数呼び出し型ツール間通信ライブラリStarpc^⑧および異機種並列計算機間通信ライブラリStampi^⑨が活用されており、これらライブラリの利用により遠隔地間での可視化が可能となっている。

今後、これら可視化システムの機能をより充実していくことにより、ITBL環境において、より快適な可視化解析が行えるよう開発を行っていく予定である。

参考文献

- [1] Foster, I. and C. Kesselman, Ed., Morgan Kaufmann (1998).
- [2] 山口勇吉, 武宮博, 日本数値流体力学会誌, Vol. 9, No. 3 (2001) pp. 83-88.
- [3] <http://www.itbl.jp>
- [4] 村松一弘, 大谷孝之, 松本秀樹, 武井利文, 土肥俊, JAERI-Data/Code 1998-014 (1998).
- [5] Chen, J. X. et al., Computational Science & Engineering, Vol. 3, No. 4 (1996) pp. 13-17.
- [6] Mulder, J. D. and van Wijk, J. J., Proc. Visualization' 95, IEEE Computer Soc. Press (1995) pp. 304-311.
- [7] ITBL環境適合型可視化システムの開発におけるライブラリ・インターフェースの機能拡張リファレンスマニュアル (2002).
- [8] 武宮博, 山岸信寛, JAERI-Data/Code 2000-006 (2000).
- [9] 今村俊幸, 小出洋, 武宮博, JAERI-Data/Code 2000-002 (2000).

This is a blank page.

付録

第4回創造的研究のための大規模データマネージメントシンポジウムの参加者リスト

This is a blank page.

氏名	会社名
アイカワ ヒロフミ 相川 裕史	日本原子力研究所
アイハラ マサキ 相原 正樹	奈良先端科学技術大学院大学
アカイ ヒサスミ 赤井 久純	大阪大学
アラカワ タクヤ 荒川 拓也	富士通株式会社
イクタ ユウキチ 生田 祐吉	株式会社富士通プログラム技研
イケイ ミツル 池井 満	インテル株式会社
イケダ マイ 池田 舞	応用技術株式会社
イシガミ タカシ 石上 隆司	株式会社ヴァイナス
イシャ ヒデオ 井舎 英生	有限会社テクノアートクルーズ
イセ シロウ 伊勢 史郎	京都大学
イシガイ ケンタロウ 磯貝 健太郎	日本原子力研究所
イチダ タカユキ 市田 孝之	株式会社シフトロック
イトウ タカユキ 伊藤 貴之	日本IBM株式会社
イトウ トモノリ 伊藤 智紀	サイエンス・テクノロジー・システムズ株式会社
イトウ マサヤ 伊藤 正也	通信・放送機構
イトウ ヨシヒコ 伊藤 義彦	日本IBM株式会社
イヌイ ヨシハル 乾 吉治	株式会社日本総合研究所
イハラ ヒトシ 井原 均	日本原子力研究所
ウエジマ ユタカ 上島 豊	日本原子力研究所
ウエノ キヨウゾウ 上野 恽三	住商エレクトロニクス株式会社
ウツミ タカユキ 内海 隆行	日本原子力研究所
ウメダ ユキオ 梅谷 征雄	静岡大学
エビネ ユウイチ 海老根 祐一	日本SGI株式会社
オオツボ カズヤ 大坪 和弥	大阪市立大学
オカモト ケイゾウ 岡本 圭三	株式会社ケー・ジー・ティー
オギハラ ヨウコ 荻原 陽子	応用技術株式会社
オログチ タカシゲ 笠口 隆重	富士通株式会社
カサイ ヒデアキ 笠井 秀明	大阪大学
カワイ マサユキ 河合 優行	株式会社日本総合研究所
カワグチ ヨウコ 河口 洋子	株式会社ケー・ジー・ティー
カワタ シゲオ 川田 重夫	宇都宮大学
カワノ アカシ 河野 証	コンパックコンピュータ株式会社
カンナリ マサアキ 神成 政明	日本原子力研究所
キクザワ ケン 菊沢 憲	東日本電信電話株式会社
キタオ アキオ 北尾 彰朗	日本原子力研究所

氏名	会社名
キタガワ チナツ 北川 千夏	株式会社ケー・ジー・ティー
キタダ ケン 北田 健	大阪市立大学
キッカワ シゲト 吉川 慎人	株式会社ケー・ジー・ティー
キノシタ シンジ 木下 伸二	きのこでーた
キハラ カズマ 木原 数馬	ISJ HIGHTEC.corp
キム ヨンシャン 金 栄璽	株式会社日本総合研究所
キムラ ヒデオ 木村 英雄	日本原子力研究所
クレス リュウタロウ 来栖 竜太郎	株式会社富士通プログラム技研
コウガ 甲賀ジェームス	日本原子力研究所
コダマ ケイジ 児玉 欣二	株式会社ケー・ジー・ティー
コンドウ タカオ 近藤 孝夫	日本原子力研究所
サイトウ テツヤ 齋藤 哲也	財団法人地球環境産業技術研究機構(RITE)
サカイ トモ 酒井 智	日本原子力研究所
サカイ ミナ 酒井 美奈	株式会社ケー・ジー・ティー
サカキ ヒロカズ 榎 裕和	コンパックコンピュータ株式会社
ササキ アイ 佐々木 亜衣	日本原子力研究所
ササキ アキラ 佐々木 明	日本原子力研究所
サタケ シンイチ 佐竹 信一	東京理科大学
サタダニ ジュンイチ 佐田谷 順一	コンパックコンピュータ株式会社
サトウ テツオ 佐藤 鐵夫	株式会社佐藤製作所
シゲカネ フミヒサ 重兼 史尚	財団法人京都高度技術研究所(ASTEM)
シゲナリ リイチ 重成 理一	株式会社富士通徳島システムエンジニアリング
シミズ ヨシナオ 清水 良直	インテル株式会社
ショウ カズキ 城 和貴	奈良女子大学
ショウダ ヒデアキ 正田 秀明	日本SGI株式会社
ショウチ ヤスマサ 城地 保昌	日本原子力研究所
スギハラ ショウイチ 杉原 正一	有限会社マンダリシャ
スズキ コウイチロウ 鈴木 孝一郎	富士通株式会社
スズキ ヨシオ 鈴木 喜雄	日本原子力研究所
セツ ジキユウ 薛 自求	財団法人地球環境産業技術研究機構(RITE)
ソダ テツヤ 園田 哲也	コンパックコンピュータ株式会社
タカイエ タケシ 高家 敏	三菱スペース・ソフトウエア株式会社
タカハシ シュン 高橋 俊	株式会社日立製作所
タカハラ コウジ 高原 浩志	日本電気株式会社
タガワ ムネノリ 田川 宗紀	株式会社けいはんな

氏名	会社名
タケシマ ダイスケ 竹嶋 大輔	コンパックコンピュータ株式会社
タケダ ヒデアキ 武田 秀明	伊藤忠テクノサイエンス株式会社
タケダ ヤスヒロ 武田 康宏	日本原子力研究所
タジマ トシキ 田島 俊樹	日本原子力研究所
タツミ トモヒデ 巽 知秀	伊藤忠テクノサイエンス株式会社
タナカ シンジ 田中 信治	株式会社プロフェニックス
タナカ チカ 田中 智佳	三菱スペース・ソフトウェア株式会社
チハラ クニヒロ 千原 國宏	奈良先端科学技術大学院大学
ツジムラ トオル 辻村 透	通信・放送機構
トミタ カズミ 富田 和美	日本SGI株式会社
トムロ タカヒコ 戸室 隆彦	日本SGI株式会社
ナガオ モトック 長尾 源承	富士通株式会社
ナガサワ ミキオ 長澤 幹夫	株式会社ケー・ジー・ティー
ナカタ アソオ 中田 温朗	コンパックコンピュータ株式会社
ナカノ マサフミ 中野 正文	財団法人高度情報科学技術研究機構(RIST)
ニシムラ アキヒコ 西村 昭彦	日本原子力研究所
ハンマ 橋間 睦	読売新聞社
ハンモト セイジ 橋本 誠司	財団法人関西文化学術研究都市推進機構
ハンモト リョウ 橋本 亮	サイエンス・テクノロジ・システムズ株式会社
ハセガワ ケンサク 長谷川 賢作	株式会社富士通徳島システムエンジニアリング
ハタケマ カズトシ 畠山 和敏	シリコンスタジオ株式会社
ハナブサンイチ 英 建一	株式会社コンピュータ技研
ハラグチ ヒロシ 原口 弘志	株式会社ベストシステムズ
フジカワ ヤスヒコ 藤川 泰彦	株式会社ヴァイナス
フジタ シュウイチ 藤田 修一	日本原子力研究所
ホリ アソシ 堀 敦史	スイミー・ソフトウェア株式会社
ホリベ ヨシオ 堀部 吉夫	東京コンピュータサービス株式会社
マスイ イクヒサ 増井 郁久	株式会社日本総合研究所
マツオカ カズヒコ 松岡 和彦	日本SGI株式会社
マツダ フミオ 松田 文雄	バンテック株式会社
マツモト ヒロシ 松本 純	京都大学
マルノ タカシ 丸野 隆	IMGジャパン株式会社
ミズノ ヒサシ 水野 尚	東京コンピュータサービス株式会社
ミヤザキ ミキヤ 宮崎 幹也	日本原子力研究所
ミヤチ ヒデオ 宮地 英生	株式会社ケー・ジー・ティー

氏名	会社名
ムラマツ フミオ 村松 文夫	株式会社日立製作所
モリグチ ユキヒロ 森口 幸広	富士通株式会社
ヤマギワ ミヅル 山極 満	日本原子力研究所
ヤマサキ テルユキ 山崎 輝幸	株式会社ベストシステムズ
ヤマサキ イチロウ 山崎 一郎	日本原子力研究所
ヤマダ マサシ 山田 真史	日本電信電話株式会社
ヨコヤマ 横山 いずみ	奈良女子大学
ヨシカワ マサアキ 吉川 正晃	株式会社ケー・ジー・ティー
ヨシマス 吉増 ゆかり	東京コンピュータサービス株式会社
ワカバヤシ ダイスケ 若林 大輔	株式会社富士通ソーシアルサイエンスラボラトリ
ワダ ケイコ 和田 佳子	有限会社アントラット
ワダ ケンノスケ 和田 健之介	有限会社アントラット

国際単位系(SI)と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s ⁻¹
力	ニュートン	N	m·kg/s ²
圧力、応力	パスカル	Pa	N/m ²
エネルギー、仕事、熱量	ジユール	J	N·m
功率、放射束	ワット	W	J/s
電気量、電荷	クーロン	C	A·s
電位、電圧、起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	ファラード	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	V/A
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V
磁束	ウェーバ	Wb	V·s
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A
セルシウス温度	セルシウス度	°C	
光束	ルーメン	lm	cd·sr
照度	ルクス	lx	lm/m ²
放射能	ベクレル	Bq	s ⁻¹
吸収線量	グレイ	Gy	J/kg
線量当量	シーベルト	Sv	J/kg

表2 SIと併用される単位

名 称	記 号
分、時、日	min, h, d
度、分、秒	°, ', "
リットル	L, L
ト	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

$$1 \text{ eV} = 1.60218 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$1 \text{ u} = 1.66054 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10 ¹⁸	エクサ	E
10 ¹⁵	ペタ	P
10 ¹²	テラ	T
10 ⁹	ギガ	G
10 ⁶	メガ	M
10 ³	キロ	k
10 ²	ヘクト	h
10 ¹	デカ	da
10 ⁻¹	デシ	d
10 ⁻²	センチ	c
10 ⁻³	ミリ	m
10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ⁻¹⁸	アト	a

(注)

- 表1~5は「国際単位系」第5版、国際度量衡局1985年刊行による。ただし、1eVおよび1uの値はCODATAの1996年推奨値によった。
- 表4には海里、ノット、アール、ヘクタールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- barは、JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
- EC閣僚理事会指令ではbar、barnおよび「血圧の単位」mmHgを表2のカテゴリーに入れている。

換 算 表

力	N(=10 ³ dyn)	kgf	lbf
1	0.101972	0.224809	
9.80665	1	2.20462	
4.44822	0.453592	1	

$$\text{粘度 } 1 \text{ Pa}\cdot\text{s}(N\cdot\text{s}/\text{m}^2) = 10 \text{ P(ポアズ)}(\text{g}/(\text{cm}\cdot\text{s}))$$

$$\text{動粘度 } 1 \text{ m}^2/\text{s} = 10^4 \text{ St(ストークス)}(\text{cm}^2/\text{s})$$

圧力	MPa(=10 bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg(Torr)	lbf/in ² (psi)
1	10.1972	9.86923	7.50062 × 10 ³	145.038	
0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233	
0.101325	1.03323	1	760	14.6959	
1.33322 × 10 ⁻⁴	1.35951 × 10 ⁻³	1.31579 × 10 ⁻³	1	1.93368 × 10 ⁻²	
6.89476 × 10 ⁻³	7.03070 × 10 ⁻²	6.80460 × 10 ⁻²	51.7149	1	

エネルギー・仕事・熱量	J(=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal(計量法)	Btu	ft · lbf	eV	1 cal = 4.18605 J(計量法)	
								= 4.184 J(熱化学)	
1	0.101972	2.77778 × 10 ⁻⁷	0.238889	9.47813 × 10 ⁻⁴	0.737562	6.24150 × 10 ¹⁸			
9.80665	1	2.72407 × 10 ⁻⁶	2.34270	9.29487 × 10 ⁻³	7.23301	6.12082 × 10 ¹⁹			
3.6 × 10 ⁶	3.67098 × 10 ⁵	1	8.59999 × 10 ⁵	3412.13	2.65522 × 10 ⁶	2.24694 × 10 ²⁵			
4.18605	0.426858	1.16279 × 10 ⁻⁶	1	3.96759 × 10 ⁻³	3.08747	2.61272 × 10 ¹⁹			
1055.06	107.586	2.93072 × 10 ⁻⁴	252.042	1	778.172	6.58515 × 10 ²¹			
1.35582	0.138255	3.76616 × 10 ⁻⁷	0.323890	1.28506 × 10 ⁻³	1	8.46233 × 10 ¹⁸			
1.60218 × 10 ⁻¹⁹	1.63377 × 10 ⁻²⁰	4.45050 × 10 ⁻²⁶	3.82743 × 10 ⁻²⁰	1.51857 × 10 ⁻²²	1.18171 × 10 ⁻¹⁹	1			

放射能	Bq	Ci	吸収線量	Gy	rad	照射線量	C/kg	R	線量当量	Sv	rem
1	2.70270 × 10 ⁻¹¹	1	1	100	1	1	1	3876			
3.7 × 10 ¹⁰		1	0.01	1		2.58 × 10 ⁻⁴	1		0.01	100	1

(86年12月26日現在)

第4回創造的研究のための大規模データマネージメントシンポジウム論文集 2002年の月2日～4日、光量子科学研究中心、京都

R100

古紙配合率100%
白色度70%再生紙を使用しています。