



PSE(Problem Solving Environment)の現状と動向

平成15年2月21日

株式会社 富士総合研究所
計算科学技術研究センター 松原聖

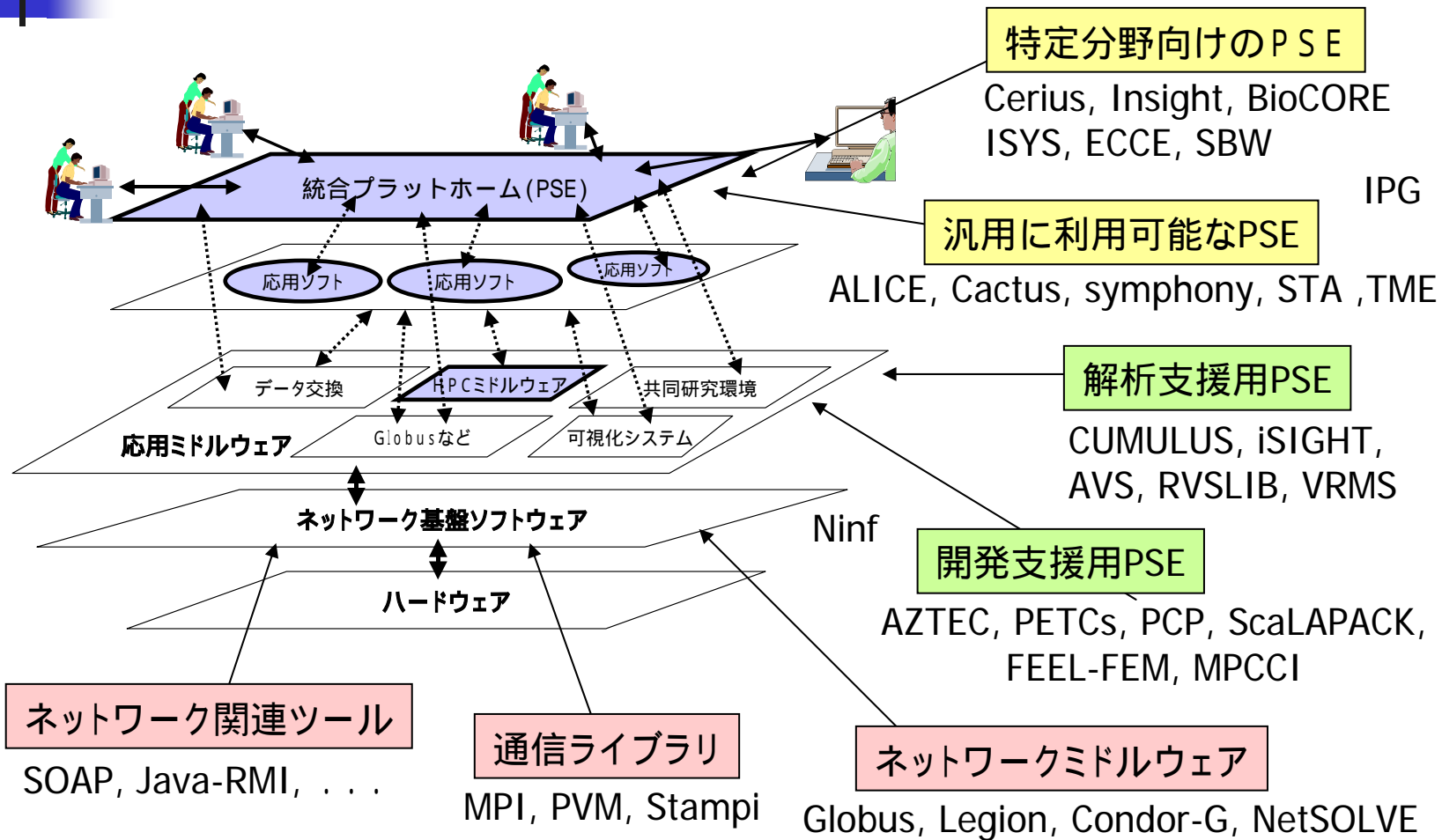
PSEの定義

- PSEは計算科学分野における計算機の利用方法を変革する技術である。PSEを利用して、問題を定義し、修正することができ、解決方法を選択することができる。このためにハードウェアとソフトウェアを使いこなすことができる。結果の解析や可視化や記録ができる。さらに高度な問題解決を支援する。OSやプログラム言語、プロトコルではなく、対象分野の言語でPSEとコミュニケーションできる。(W. E. Johnstonら、1999)



- 我々は、特に、ネットワーク上に分散した資源(ソフトウェア、データ等)を統合化してより高度で複雑なシミュレーションを行うための機能、多数のソフトウェアやデータベース等を駆使した解析を正確に再現するための機能に着目している。

PSEの分類



- 例えば、上記のようにいくつかのレベルに分類できる。ただし、上記で分類したシステムにも、幅広い分野にわたる機能を持つシステムもある。

特定分野向けのPSE

- 計算化学やバイオ等の特定分野では、多くのアプリケーションを統合したシステムが商用になっている。
- これらのシステムなしでは、設計等の業務が不可能なレベルにある。
- Cerius; ホモロジから触媒解析までのPSE
 - <http://www.accelrys.com/cerius2>
- Insight; 分子モデリング可視化環境
 - <http://www.accelrys.com/insight/>
- ECCE; 計算化学分野のPSE
 - <http://www.emsl.pnl.gov:2080/docs/ecce>
- BioCORE; 生物学における協力研究環境
 - <http://www.ks.uiuc.edu/Research/biocore/>
- ISYS; バイオインフォマティクスのPSE
 - <http://www.ncgr.org/isys>
- SBW; システムバイオロジワークベンチ
 - <http://www.sbw-sbml.org>

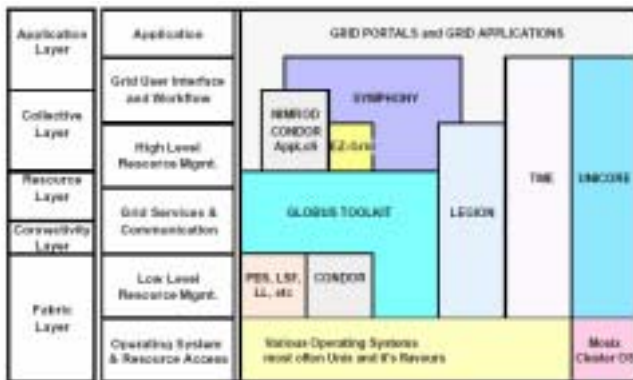


図は、<http://www.emsl.pnl.gov:2080/docs/ecce>より

汎用にご利用可能なPSE

- システムへの要求仕様は議論され、すでに固まっている。
- 研究レベルで、各種のシステムが提案されている。今後、実用化が課題である。

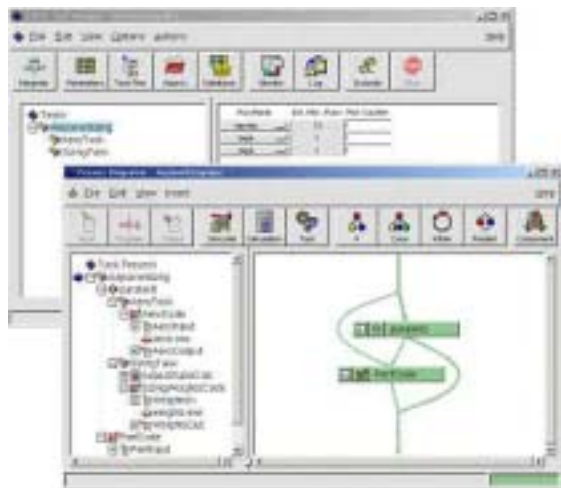
- IPG; HPCとデータグリッド
 - <http://www.ipg.nasa.gov>
- ALICE; 大規模計算のための統合環境
 - <http://www-unix.mcs.anl.gov/alice/>
- Cuctus; 協調研究環境
 - <http://www.cactuscode.org>
- Symphony; Javaベースの分散資源の組み立て
 - <http://research.cs.vt.edu/pse/projects.html>
- TME; アイコンでのジョブ制御
 - http://ccse.koma.jaeri.go.jp/projects/Projects_data/data_093/projects_093.html



図は<http://research.cs.vt.edu/pse/projects.html>より

解析支援用PSE

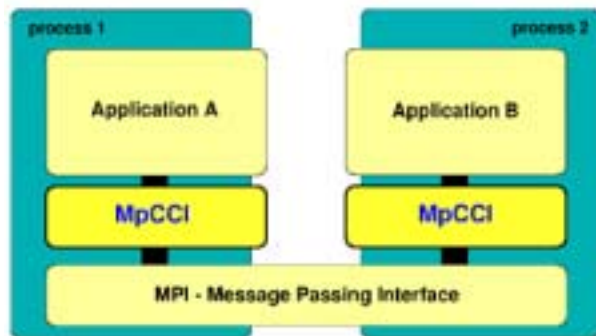
- 最適化、ステアリング、可視化等の解析支援については、特定の機能については、実用化されている。
- 広い範囲をカバーできるシステムが今後の課題である。
- CUMULVS ; ステアリングシステム
 - <http://www.csm.ornl.gov/cs/cumulvs.html>
- ISIGHT ; 最適設計システム
 - <http://www.engineous.com/products.htm>
- AVS ; 可視化システム
 - <http://www.avs.com>
- RVSLIB ; 可視化、ステアリング
 - <http://www.sw.nec.co.jp/APSOFT/SX/rvslib/index.html>
- VRMS ; 計算化学用ステアリング
 - <http://www.fujiric.co.jp/ccse/project/vrms/>



図は、<http://www.engineous.com/products.htm>より

開発支援用PSE

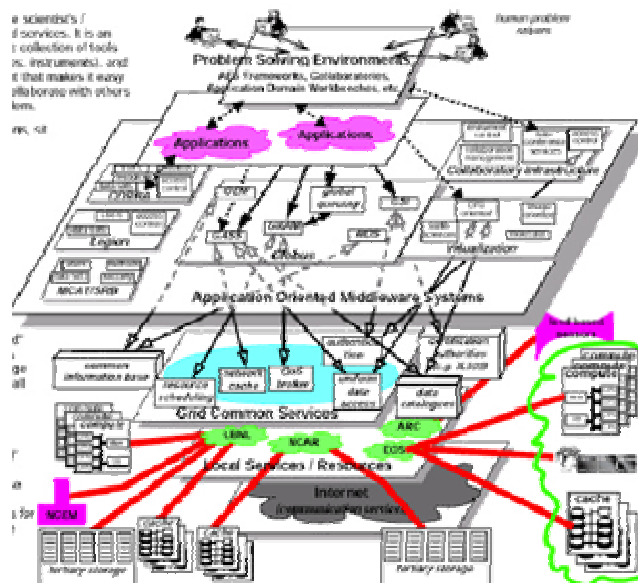
- 線形ソルバやライブラリについては、並列機能も含め一通りの内容が整備されソフトが公開され、広く利用されている。
- PDEソルバは研究レベルで多くのシステムが開発された。広い範囲での適用が難しい。



- NetSOLVE, FEEL-FEM; PDEソルバ
 - <http://icl.cs.utk.edu/netsolve/> 等
- AZTEC, PETCs; 疎行列線形計算
 - <http://www.cs.sandia.gov/CRF/aztec1.html>
 - <http://www-fp.mcs.anl.gov/petsc/index.html>
- MPCCI; 連成計算ライブラリ
 - <http://www.mpcci.org>
- ScaLAPACK; 並列計算ライブラリ
 - <http://www.netlib.org/scalapack/>
- PCP; 並列計算プラットフォーム
 - <http://www.aist.go.jp/infobase/pcp/platform/>

ネットワークミドルウェア

- 近年、実用化されつつあり、いくつかの実用化プロジェクトが実施されている。
- 商用ソフトのベースに利用されているケースもある。

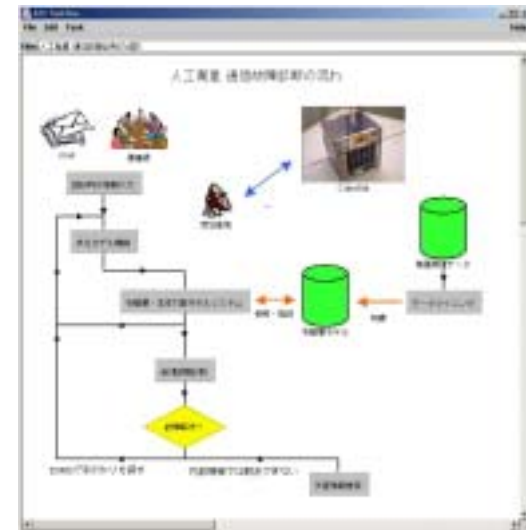
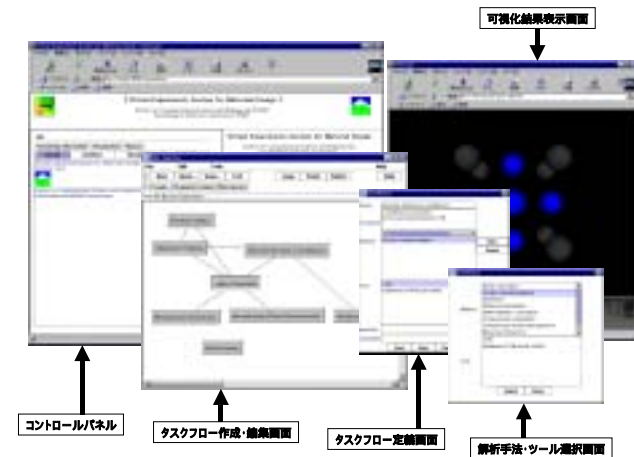


W. E. Johnston, D. Gannon, B. Nitzberg (1999)

- globus ; ネットワーク利用ミドルウェア
 - <http://www.globus.org/>
- Legion ; 高効率の計算資源の利用
 - <http://www.cs.virginia.edu/~legion/>
- Condor-G ; 計算資源管理および最適化
 - <http://www.cs.wisc.edu/condor/condorg/>
- NetSOLVE ; 計算資源
 - <http://icl.cs.utk.edu/netsolve/> 等

当社での既存の取り組み

- 科学技術振興調整費による総合研究「物質・材料設計のための仮想実験技術の研究」
 - <http://www.fuji-ric.co.jp/ccse/project/vemd>
- 科学技術振興調整費による総合研究「人間系の特性を考慮した大規模・複雑システムのモデル化、解析、制御、設計に関する総合的研究」(平成10年度～14年度)
 - <http://www.fuji-ric.co.jp/ccse/project/complex>



まとめ

- 特定分野のPSEは実用化されており、それぞれの分野において今後とも発展する。
- 設計者個別の問題への適用可能で、パソコンのOSのような汎用のPSEの開発が課題である。
 - ネットワーク上に分散した資源(ソフトウェア、データ等)を統合化してより高度で複雑なシミュレーションを行うことができるようになる。
 - 多数のソフトウェアやデータベース等を駆使した解析を正確に再現することができるようになる。
- 現状で、プログラム開発のためのライブラリ等は利用可能なソフトが一通りそろっている。
- ネットワークに関連するミドルウェアは実用化され、今後の利用形態が検討されている。