

インターネット適応型分子シミュレーションGUIの開発

岡本直樹 山本章紀 半田享 高田俊和*

(NEC 情報システムズ * NEC ラボラトリーズ)

1. はじめに

近年、インターネット技術の発展と普及はめざましく、計算化学の分野でも使い易い計算環境を目指して様々な試みがなされている。我々はこれまで、ネットワーク時代にふさわしい計算環境について検討し、インターネット適応型の分子軌道計算システム「バーチャルマイクロスコープ」[1]の開発に取り組んできた。本稿では、「バーチャルマイクロスコープ」をさらに改良し、計算しながら研究者同士会話が可能なコミュニケーションシステムを開発しここに報告する。本システムは、JST(科学技術振興事業団) 計算科学技術活用型特定研究開発推進事業「グローバルコンピューティング環境による汎用MCCFソルバーの開発」の一環で開発されている。

2. 分子シミュレーション

スーパーコンピュータにおける計算性能の著しい向上により、マテリアルサイエンスの分野においても、シミュレーションで物質の性質を予測したり、その反応機構を解析したりする試みが盛んになってきている。このような分子シミュレーションの最大の特長は、汎用性が高く高速に計算できるソルバーと使い勝手の良いユーザーインターフェースが整備されれば、研究者の考えついたアイデアの正当性を短い時間で素早く検証できる。今後数年程度でスーパーコンピュータの演算速度は、分子シミュレーションを実用的な水準に高める程に成熟すると期待されるので、このような分子シミュレーションシステムを開発することは、化学的手法による物の生産の本格化に向けて意義のあることである。

3. システム構成

化学反応を可視化することは、量子化学の専門家が研究開発をする上で非常に重要なことである。本システムは、分子軌道法、分子動力学、分子グラフィックス[2]、オンラインシミュレーション技術の結合により、WEBブラウザ上でオンラインシミュレーションを実現するためのシステムである。量子化学の専門家はリアルタイムに、あたかも化学反応を顕微鏡で覗いているかのように反応を観

察することができる。しかも、顕微鏡と異なり回転、拡大等も自由にでき、任意の角度、大きさで観察することが可能となっている。また、ネットワーク上の複数のコンピュータにおいて同一画面を観察でき、且つ音声システムを組み込むことにより研究者同士がディスカッションしながら計算結果を解析することが可能となっている。さらに、これまでスーパーコンピュータや並列コンピュータ等を使うには、UNIXの知識が必要であったが、本システムはWEBブラウザ上から入力データの作成～実行～解析まで行うため、UNIXの知識は全く不要であり、実験の専門家にとって有用である。

下記に本システムの構成を示す。インターネット上に計算サーバ、分子グラフィックサーバ、クライアントPCが繋がっており、ある1台が親となりシミュレーションを開始する。その他のPCが子となり、親PCと同一の画面を見ることが可能である。回転、拡大等の操作は親子全てのPCから可能となっている。また、親子間で音声によるコミュニケーションも可能である。

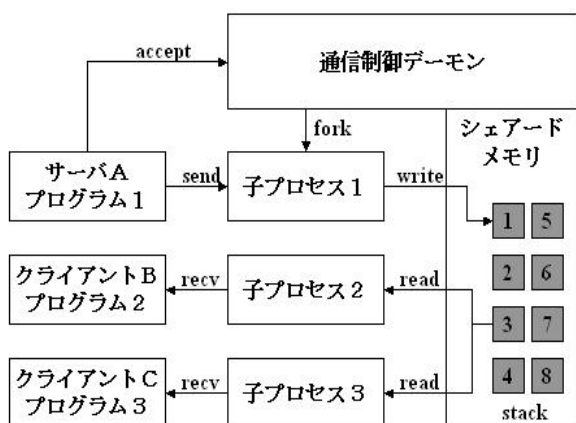


図1 分子シミュレーション構成図

・マルチユーザ対応データ制御プログラム

複数のユーザ(プログラム)が同じデータを参照することを可能とするため、シェアードメモリ

を利用したソケット通信デーモンを用意している。各ネットワーク上のプログラムが共通のサーバ名とメモリ番号を明記するだけで、同じメモリをアクセスすることができる。また各プログラムの性能を考慮して、シェアードメモリ領域を複数個用意することにより、最新のデータを参照することが可能となる。なお、本デーモンにアクセスするために必要な Fortran、C、Java の各言語のライブラリを有する。



- (1)プログラムは通信制御デーモンに対しアクセプトする。
- (2)通信制御デーモンは子プロセスを発行し、シェアードメモリ領域を確保する。
- (3)各プログラムと子プロセスはソケットを用いて通信を行う。
- (4)子プロセス同士シェアードメモリを介してデータのやり取りを行う。

図2 マルチユーザ対応データ制御概念図

・分子グラフィックス

本システムではさまざまなハードウェアに対応するためハードウェアに依存しない独自のプログラム(ソフトウェア処理)を採用している。粒子図・ボンド図以外にボリュームレンダリング・等値面表示機能などを有し、また並列処理を施すことにより、高速化が図られている。

・画像圧縮

分子グラフィックスで生成された 24bitRGB データを 8bitRGB に減色して、分子構造図向きの渦巻き型 RLE (Spiral Run Length Encoding) により、10%以下まで圧縮し、クライアント PC へ転送する。

・トラッキング

計算途中に表示する角度や大きさをインタラクティブに制御するために、本システムの GUI に Java アプレットを採用している。これにより、逐次最新の画像・データのグラフなどの表示をおこなうと共に、コントロールパラメータを CGI によってサーバに転送し、分子シミュレーション・分子グラフィックスプログラムをクライアントから制御できる。

・音声による対話

本システムでは分子シミュレーションをおこなう研究者と複数の閲覧者との対話システムを実現しており、計算中の結果を同時に閲覧するだけでなく、音声によるコミュニケーションも可能である。

・マーカコミュニケーション

同じ画像を見ている研究者同士、言葉だけでは実際のどの個所のことを話しているのかわかりづらいところがある。各クライアントの GUI にマーカ表示および通信機能を付加し、同時にお互いの示した位置を表示することによってコミュニケーションの充実を図っている。



図3 実行画面

4. おわりに

本稿では、研究者同士がインターネットを介し分子グラフィックスや、音声によりコミュニケーションをとり、情報の共有を図るシステムについて提案した。今後も、グローバルコンピューティング環境を活用したシステムの発展に向けて継続的に努力して行きたい。最後に、本システム開発に支援して頂いた、科学技術振興事業団(JST)殿に感謝します。

5. 参考文献

- [1]山本 / 岡本他,分子構造総合討論会(1998),講演予稿集,P168
- [2]半田 / 高田他,分子構造総合討論会(1996),講演予稿集,P780