計算工学講演会論文集 Vol.3(1998年5月) 計算工学会

ＰＳＥにおける可視化対話インタフェースの考察

VISUAL INTERACTIVE INTERFACE FOR PSE

梅谷 征雄[1)]
Ｙｕｋｉｏ ＵＭＥＴＡＮＩ

１）工博 静岡大学教授 情報学部情報科学科（〒432-8011 浜松市城北３－５－１，umetani@cs.inf.shizuoka.ac.jp）

The method for systematically establishing visual and interactive computational interfaces required for PSE (Problem Solving Environments) are investigated in relation with the programming language model. Four kinds of models (procedural, domain-specific, object-oriented and dataflow) are examined and evaluated using an actual simulation example. The merits and demerits of each model are described in details.
Key Words : *PSE, programming language model, simulation*

１．はじめに

ＰＳＥ(Problem Solving Environment)が取り扱う物理モデルの数値シミュレーションには、１）特殊な計算ノーハウを必要とする、２）計算規模が大きい、３）モデル合わせのための微妙なパラメータ調整が必要、４）演算精度の監視が必要、などの特徴があり、これに対して、高水準記述からのコード生成、解法エキスパートの活用、高性能計算サーバとのスムーズな連携、計算と可視化の連携、自動精度モニタリングなどの試みが行われている。ここでは、計算と可視化の連携を容易にするための対話インターフェースと、ＰＳＥでサポートすべき機能について検討する。特に言語モデルと対話の関係を考察する。言語のモデルとして、手続き型、応用向き、オブジェクト指向、データフローの４者を取り上げ，それらの可視化対話の方法を具体例に即して述べ、各々の得失を検討する。

２．可視化と対話のレベル

計算と可視化の緊密な連係を実現するためには、可視化対話のレベルをどこに取るかが重要なポイントとなる。言語モデルに準拠してその方法を考察する。

最もポピュラーなものとして手続き型言語モデルがある。これは FORTRAN や C 言語を構成するデータ構造やソース文のレベルで表示や対話を行なうもので、この種のプログラミング言語を使う場合にはごく自然なアプローチである。文官の中断点の設定／解除、中断点におけるデータの表示やパラメータの変更、先行中断点への復帰などが対話の単位となる。 このレベルの長所は汎用的であることと処理の流れが良く見えることにあるが、反面機能的な対話を行うにはミクロすぎるので、問題に合わせて中断点ごとにデータの表示方法等をユーザが工夫する必要がある。

応用分野を指向した高水準言語を使用すればこの欠点はかなりの程度カバーできる。例えば偏微分方程式により定式化される流体や電磁界のシミュレーションに対しては、境界領域形状、境界条件、空間メッシュ、離散化方式、線形計算アルゴリズムなどのレベルで問題と解法を記述する高水準言語が提案されており[1,2,3]、それらを用いれば応用を志向した可視化と対話が自然に行える。問題がこの枠組みに収まらないときには適用できないこと、および適用可能でもシミュレータが既に FORTRAN などの手続き型言語で作られているときには再定式化が必要となることがこの方法の弱点である。

第３の方法はオブジェクト単位に可視化や対話を行なうオブジエクト指向のアプローチであり[4,5]、C++などのオブジェクト指向言語で書かれたアプリケーションには自然に導入できるがそうでないときはやはり再構成が必要となる。この方法の利点はオブジェクト間の階層関係とシミュレータの全体構成を意識した対話ができることにある。

第４のアプローチは可視化システム ＡＶＳ[6]などで採られているデータフロー指向のアプローチである。これはネットワークプログラミングとも呼ばれ、処理手順をデータの変換手順に合わせて構造化するものである。変換されて行くデータとそれらの変換処理要素（フィルタ）を対象として表示と対話を行なうもので、データフロー言語を使う場合は勿論手続き型言語によるアプリケーションの構造化も比較適容易にでき、変換要素の採り方により抽象化のレベルを変えることができる。データフローアプローチはパラメータ変更の影響を見るのに適しており、また並列・分散処理との相性が良いのが特長である。

３．実例

本章では２章で触れたいくつかのアプローチを具体例に即して述べることとする。取り上げる例題は MOS 半導体のデバイスシミュレーション[7]である。これは模式的には図１のような半導体内部の電子密度と正孔分布密度を与えられた不純物濃度と境界条件の元で解き、それに基づきゲート電圧・電流グラフの様なデバイス特性を得るものである。電子密度 n と正孔分布密度 p は、以下の３本の偏微分方程式を連立させ、有限要素法や差分法で離散化近似を行なった後、数値的に解いて求める。

ポアソン方程式　　e　Δψ = q (n - p - Nd + Na)
電子電流方程式　　div　Jn = q Urg
正孔電流方程式　　div　Jp = -q Urg
e:Si の誘電率　ψ:電位　Nd - Na:不純物濃度
Jn:電子電流密度　Jp:正孔 電流密度　q:電子電価
Urg:キャリアの再結合の割合

ここで、
Jn = k T μn nie exp(q ψ/ (k T)) ▽ (exp (-q ψ/ (k T)) n / nie)
Jp = k T μp nie exp(-q ψ/ (k T)) ▽ (exp (q ψ/ (k T)) p / nie)となり、
Vt = k T / q , η= exp (-q ψ/ (k T)) n / nie, ρ = exp (q ψ/ (k T)) p / nie とおけば、

電子電流方程式
Vt div (μn nie exp(ψ/ Vt) ▽η) = U rg
正孔電流方程式
Vt div (μp nie exp(-ψ/ Vt) ▽ρ) = - U rg
k:ボルツマン定数　T:絶対温度　μn:電子移動度
nie:有効真性キャリア密度　μp:正孔移動度
と表わせる。以後の計算では、Urg = 0 を仮定する

(１) 手続き型言語からのアプローチ

上記のような偏微分方程式の数値解は、通常 FORTRAN の様な手続き型言語で解法をプログラムすることにより求められる。具体的にはプログラムで操作する配列などのデータの表示や文間の中断点での対話などを行なうことになる。対話実行を行なう標準的な言語処理ソフトウエアが用意されれば実現できるが、機能的な対話にはレベルが低く過ぎること、境界形状など非言語的な情報の取り扱いが不便であることなどの問題がある。

(２) 応用向き言語からのアプローチ

応用向きの高水準言語 DEQSOL[1]を用いる場合の例をしめす。 DEQSOL ではプログラムが、形状、メッシュ、データ、物性値、境界条件、初期条件、解法手順などの機能別に記述されるので、どのような DEQSOL プログラムにたいしても、汎用的に図２のようなウインドウを使って可視化と対話をおこなうことができる。対話の方法としては、左右のボタンと中央の画面をつかって、境界形状、境界条件、メッシュ、パラメータ値などを変更したり、上部のボタンにより解法手順に対する文単位ならびに式のレベルに立ち入った実行制御が可能である。

(３) オブジェクト指向のアプローチ

オブジェクト指向のアプローチでは、クラス群を定義し、クラスに属するオブジェクトに対する操作の列としてプログラムを構成する。各クラスに属するデータ等のメンバを操作するメソッドを定義することにより、オブジェクトを単位とした対話が可能となる。

図３に本デバイスシミュレータの C++言語によるオブジェクト指向プログラミングの一部を示す。図３にて、SwPointPtr, SwEdgePtr など(以降は Sw*Ptr と略記)は点や縁など形状要素のクラスを、SwFEMMesh はメッシュのクラスを、SwFEMVar は変数や定数のクラスを、SwLinSystem は線形計算のクラスを、SwMatrix と SwVector は行列とベクターのクラスを、Sw*Form は離散化方程式のクラスを、Sw*Bc*ﾊは境界条件のクラスを意味する。また（１）は形状定義の部分、（２）はメッシュ定義の部分、（３）は変数、定数定義の部分、（４）は方程式定義の部分、（５）は境界条件設定の部分、（６）はそれを含んで解法手順を記述する部分である。このプログラムに出現するオブジェクト間の引用関係を図４に示す。ここで矢印は、矢印の先にあるオブジェクト内のメソッドが矢印の元のオブジェクトのメンバを引用することを意味する。

図４のダイヤグラムを使ってオブジェクト指向プログラムの対話実行を次のように行うことができる。画面上のオブジェクトをクリックしてメソッドを指定すると実行制御は矢印を逆にたどってそれが引用するオブジェクトを再帰的に次々に呼び出し、完了すればもとに復帰する。その過程で中断、データメンバの表示、
後戻りなどの対話が行える。オブジェクト指向の利点は常にオブジェクト間の全体的な関連を視野に入れて対話が行えることにある。

(４) データフロー指向のアプローチ

データフロープログラムはデータの変換過程に着目した図式である。図５に本デバイスシミュレータのデータフロープログラム例を示す。データフロープログラムの実行制御は、入力となるデータノードを選択してクリックすることによりそのデータの影響が及ぶノードを次々に発火させる。その過程で中断、表示、後戻りなどの対話が行える。このアプローチはデータ変換過程が一目瞭然にわかること、並列・分散処理に適合すること、データの一部が変化したときに再計算が効率的に行なえることなどの利点がある。

４．ＰＳＥが行うべきこと

上記のアプローチで示した可視化対話を実現するに当たり、ＰＳＥが行うべきこととユーザが行うべきことの区分けと、対話処理で重要な応答性の見通しを考察する。

第１の手続き型言語のレベルについては、プログラム

テキストからＰＳＥが自動的に対話画面を生成することはそれほど難しくない。しかし標準形式以外の表示画面を用意することはユーザの仕事となり、ＰＳＥはそれをバインドする機能を持つに留まるであろう。応答性は言語処理系の作りによるが、コンパイル方式を取った場合はプログラムテキストの変更に対してある程度の遅延を覚悟しなくてはならない。

第２の応用向き言語のレベルもプログラムテキストが用意されれば自動的に対話画面を構成することは困難でない。応答性は処理系の作り方によるが仮にＪａｖａ言語のような遅延バインディングが許される言語系を用いれば、方程式の項や境界条件などの大きな変更に対しても高い応答性を確保できる可能性がある。

第３のオブジェクト指向の場合は、プログラムテキストから図４のダイヤグラムを生成しそれに基づく対話制御を行うことはＰＳＥの仕事となる。しかしオブジェクトの設計はユーザに委ねられているので、表示機能の準備は標準的なものを除けばユーザの仕事になる。この事情は手続き型言語の場合と同じである。変更範囲が局在化されることから、応答性は一般に手続き型よりも良いことが期待される。

第４のデータフロー指向の場合は、データフロー型へのプログラムの再構成はユーザの仕事、それに基づく実行制御はＰＳＥの仕事となる。表示画面の設計も標準的なものを除いてユーザに委ねられる。データの変化した部分だけを再計算するので、応答性は４つの中で最も優れていることが期待できる。

５．むすび

シミュレーションソフトウエアの可視化／対話化の方策を、言語モデルを基準として手続き指向、応用向き言語指向、オブジェクト指向、データフロー指向の４つの候補について検討し、それぞれの具体的なイメージを提示して得失を論じた。それぞれ長所と短所があるが、手続き型プログラムから割合スムーズに移行でき、対話のニーズが高いことが予想されるパラメータ感度解析に優れた応答性を期待でき、またネットワークコンピューティングなど今後のシミュレーション形態にも適合するデータフロー指向の可視化対話モデルを推して、ひとまずの結論とする。

謝辞

ＭＯＳデバイスシミュレータのDEQSOLによるプログラム例を提供頂いた日立超ＬＳＩエンジニアリング株式会社の平山裕之氏、ならびにオブジェクト指向プログラム例を提供頂いた(株)日立製作所中央研究所の佐治みゆき氏に感謝の意を表します。

参考文献

1) 佐川暢俊，金野千里，梅谷征雄：数値シミュレーション言語ＤＥＱＳＯＬ，情報処理学会論文誌 30 巻１号, 1989

2) J. R. Rice, R. F. Boisvert : Solving Elliptic Problems Using ELLPACK, Springer-Verlag,1984

3) S. Doi, H. Fujio, K. Sugihara : Automatic parallel program generation for finite element analysis, Quality of Numerical Software, pp.255-265, Chapman& Hall, 1997

4) T. I. Boubez, A.M. Froncioni, R.L.Peskin: A Prototyping Environment for Differential Equations, ACM Transactions on Mathematical Software, Vol. 18, No.1, pp. 1-10, 1992

5) Y. Dubois-Pelerin , T. Zimmermann : Object - oriented finite element programming : An efficient implementation in C++ , Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering 108 , pp. 165 – 183, 1993

6) AVS ユーザーズガイド, クボタコンピュータ株式会社, 1992

7) 村田健郎ほか３名編：工学における数値シミュレーション，pp.119 - 135 ，丸善，昭和 63 年

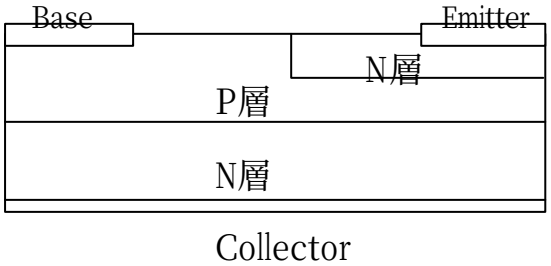


図１ＭＯＳデバイス構造模式図

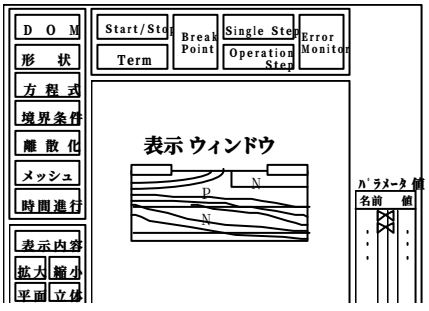


図２ 応用向き可視化対話ウインドウ（DEQSOL）

```
Void main (    ) {
(1)  Sw Point Ptr          P00 (0.0, 0.0) ;
     Sw Point Ptr          P10 (0.0, 0.0) ;
                  ・・・
     Sw Edge Ptr           COL1(P00, P11) ;
                  ・・・
     Sw Quad Ptr           C1(COL1, V10, H01, LEFT1) ;
                  ・・・
     Sw Surface Ptr        CA=C1+C2+C3 ;
                  ・・・
     Sw Surface Ptr        TOTAL = CA+BA+EA ;

(2)  Sw FEM Mesh           mesh  (TOTAL) ;
       mesh. setMesh  (COL1,5) ;
                  ・・・
       mesh. genMeshset (    ) ;
     Sw Subreg                  colaBound=mesh. genBound Region (COLA) ;
                  ・・・

(3)  SwFEMVar              phi (mesh),  dphi(mesh)  ・・・
                           n(mesh),  p(mesh) ;
     double                epsd,  nrphi,  ・・・;

     Sw Lin System         dev Lin Sys1,  dev Lin Sys2,  dev Lin Sys3 ;
     Sw Matrix             M1,  M2,  M3 ;
     Sw Vector             bVec1,  bVec2,  bVec3 ;
     devLin Sys1. set Matrix (M1) ;
(4)  devLin Sys1. set RHSVec (bVec1) ;
     devLin Sys2. set Matrix (M2) ;
     devLin Sys2. set RHSVec (bVec2) ;
     devLin Sys3. set Matrix (M3) ;
       devLin Sys3. set RHSVec (bVec3) ;

     While  ( epsd  > 1.0 e-3)  {
       Sw Diff1 Form            diff1  (mesh, es, n, p, br) ;
         M1=diff1. assemble (    ) ;
         bVec1=q  *(n-p-nd+na)-es  *lapl (phi) ;
(6)
       Sw First BC1         dphibc1  (dphi, 0.0, COLA+EMIT+BASE)
(5)    Sw Second BC1        dphibc2  (dphi, 0.0, LEFTA+TOPA+RIGHTA) ;
         dev Lin Sys1. apply Dirich BCs (dphibc1) ;
         dev Lin Sys1. apply Neuman BCs (dphibc2) ;
```

図３ C＋＋言語によるMOSデバイスシミュレータの記述例（一部分）

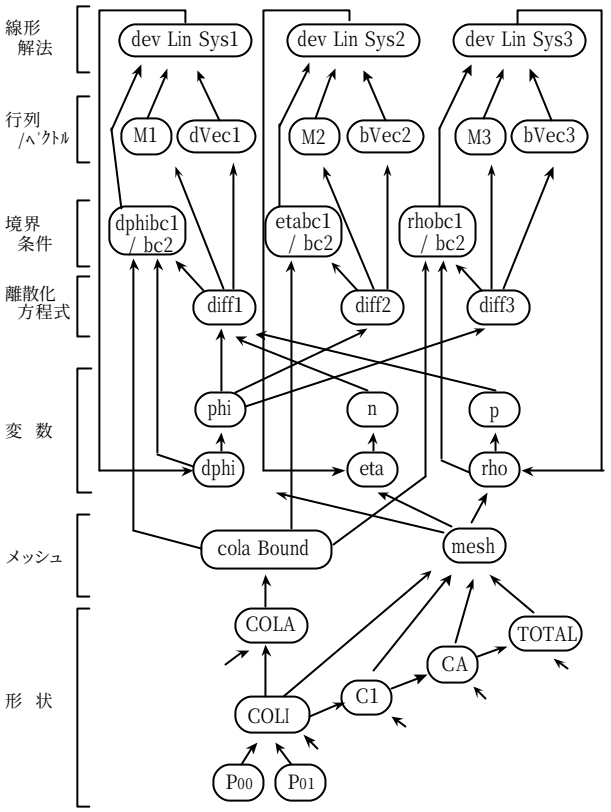
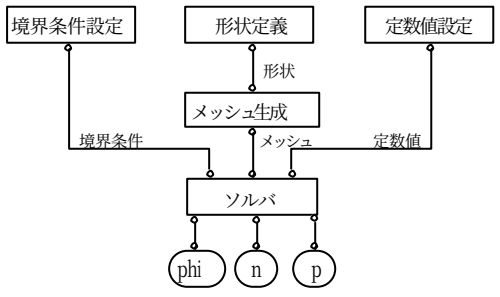
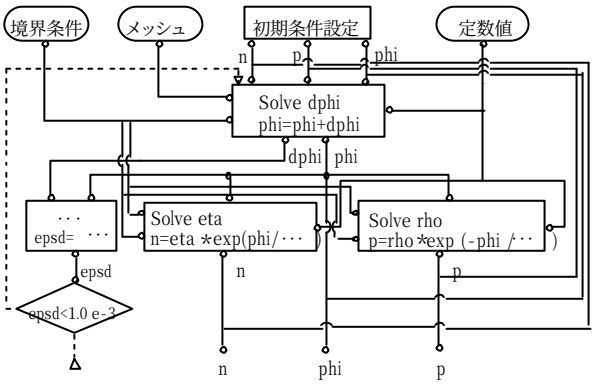


図４ オブジェクト間の引用関係



(a) 全体 データフロー



(b) ソルバ部データフロー

図５ MOSデバイスシミュレータのデータフロー図式