

GOURMETご紹介



株式会社 日本総合研究所
サイエンス事業本部
芝野 真次

本日のMenu

前菜

... *What is GOURMET?* (これまでのPre-Postに替えて)

魚料理

... 貴方のお好きなお魚は？ (解析者の望むPre-Post)

メインディッシュ

... シェフのおすすめ (*GOURMET*の特徴)

デザート

... *Gourmet Demo*のpython & *GNU PLOT* 風味

What is GOURMET ?



進化し続ける変更しやすいPre-Post

- 利用者がデータの構造を自由に規定
- 利用者がデータの操作法を自由に変更
- 利用者がエンジンの動作を制御可能
- データの編集・描画が容易
- 他の研究者の利用法が理解しやすい
- 解析対象（エンジン）が変わっても操作法は同じ

=>GOURMET

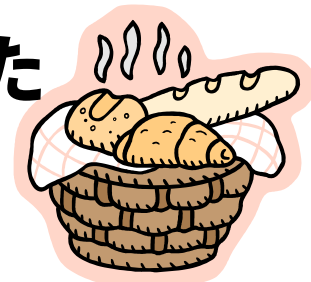
*Graphical Open User Interface for
Multiscale-analysis Environment*



既存Pre-Postとの相違点



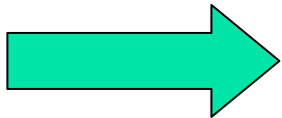
- **既存Pre-Postの特徴**
 - データの書式や種類が固定
 - エンジン間のデータ受け渡しは個別対応
- **GOURMETの特徴**
 - データの定義が自由
 - 書式も自由 (構文文法があるのみ)
 - データの構成を物理・化学から求めた



解析者の要望



- 解析エンジンは解析対象の空間スケールや解析対象物理量が異なるため、入出力データが異なり、それらの変換機構を持つ必要がある。
- ズーミング手法や解析手法には依然未知の部分があり、入出力データが頻繁に変更される可能性が高い。
- ズーミングエンジン作成者は変換対象となる解析エンジンの入出力データの物理特性は理解するものも、解析手法の詳細は理解しないですませたい。



これらをなるべく簡単に行いたい。



物理量とは



物理量	意味	UDF help
	名前	UDF Path
	型	UDF Type
	単位	UDF Unit
	数値	UDF Data
	ふるまい	Action file





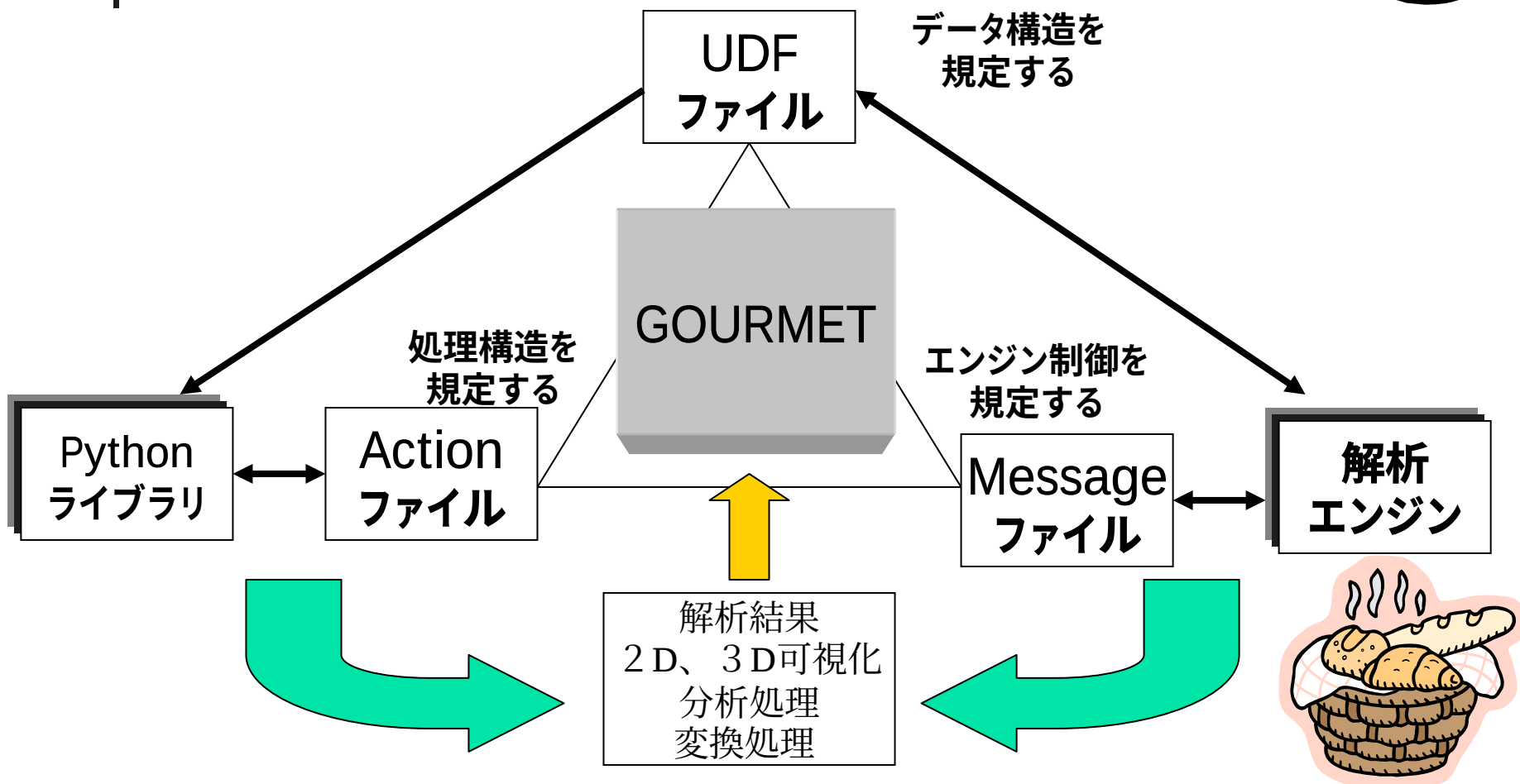
GOURMETの特徴



- **物理量を定義するUDF書式を持っている。**
 - **物理量の意味 (help), 名前(Path), 型 (Type), 単位(Unit), 数値(data)を持っている。**
- **物理量の振る舞いを規定するAction fileを持っている。**
- **エンジンの情報を制御するMessage Fileを持っている。**



機能構成



GOURMETとエンジンの関係



COGNAC

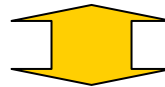
SUSHI

MUFFIN

PASTA

...

Platform Interface Library



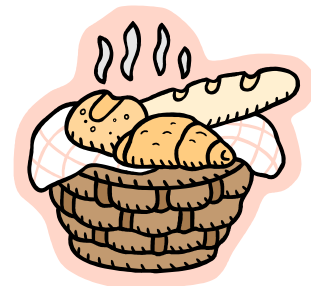
GOURMET



粗視化MD分子構造ビルダー



- 既存の書式規定型のファイルの書式と読み込み後のUDFファイルの構造を規定するだけで、既存ファイルをUDFファイルに変換可能
 - PDBファイル & molファイルをサポート
- 粗視化動力学エンジンに必要な情報を自動的に付加
 - 結合角、二面角、粗視化ポテンシャル情報
- pythonで記述されており、利用者により、容易に変更。高度化が可能
 - サポート書式などは容易に拡張可能



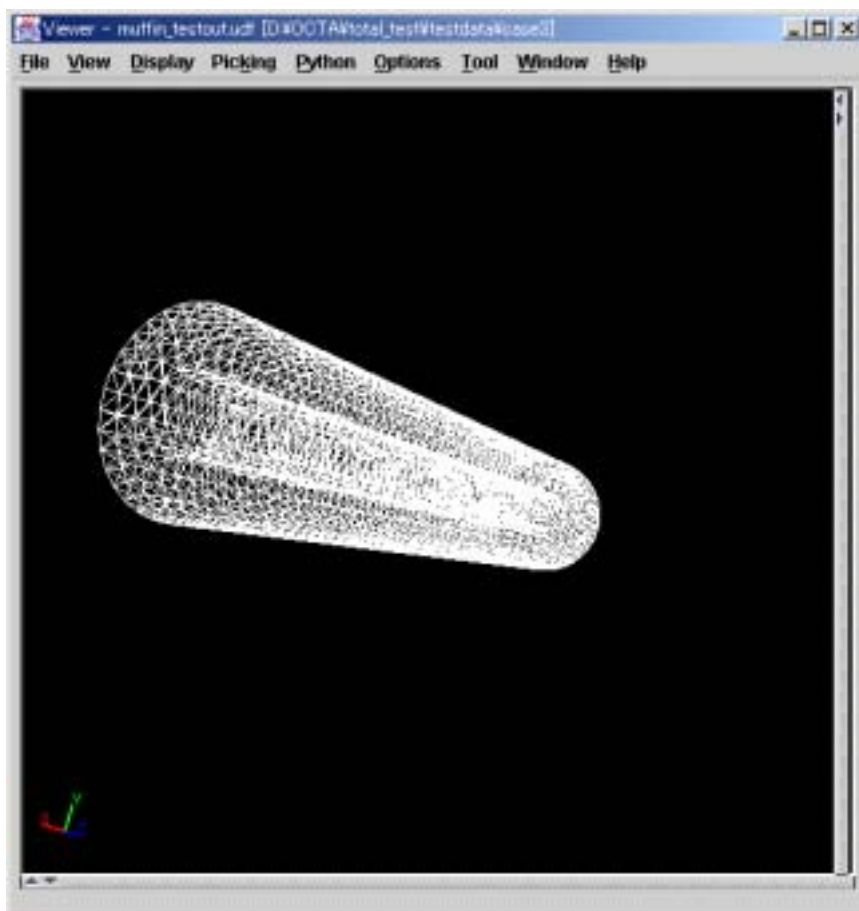
FEM Pre-Processorとの連携



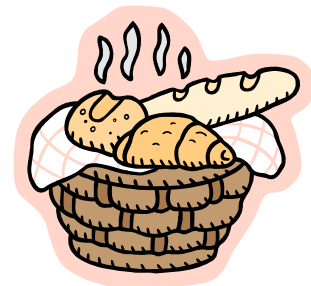
- 汎用データフィルタリング機能
 - 粗視化MD分子構造ビルダーでも用いた書式型データからUDF構文へのデータ変換機構を利用
 - NASTRANのbulk data file書式の複雑なメッシュデータを読み込み可能
 - 新たなデータ構造への拡張も容易



変換後メッシュデータ表示例



NASTRAN bulk file-
MUFFIN3用に
サンプルとして作成
した変換フィルタを
利用して変換処理を
行い、GOURMETで
表示した



エンジンマネージャ機能



- ネットワーク上にある登録済みエンジンの起動・一旦停止・パラメータ変更・状況監視が可能
- エンジン実行を提供するサーバで稼動
- エンジンとの情報の授受はUDF構文を用いているので、拡張が容易

クライアント

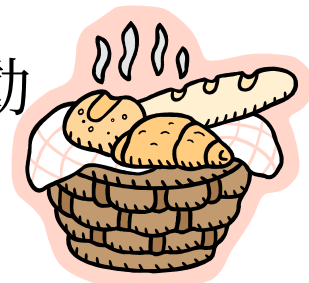
GOURMET



エンジンサーバ

エンジンマネージャ

解析エンジン稼動



アクション機能



- GOURMETでは、pythonによる簡易プログラミングを行うことができる
 - エンジン開発時や分析時には柔軟な作業を行える
- But ...
完成したエンジン利用システムとして実行する際、操作が煩雑
- Then ...
Python スクリプトライブラリ管理
 - 利用者の作成したスクリプトを登録・管理できる
- ReadyMadeからEasy OrderMadeに！



データマネージャ機能



- サーバアプリケーション
- UDFデータ管理機能を提供するサーバ上で稼動

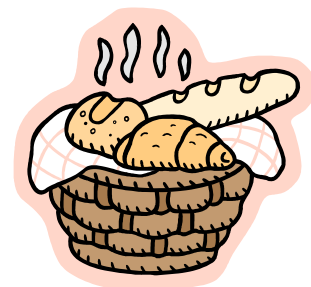
クライアント

GOURMET

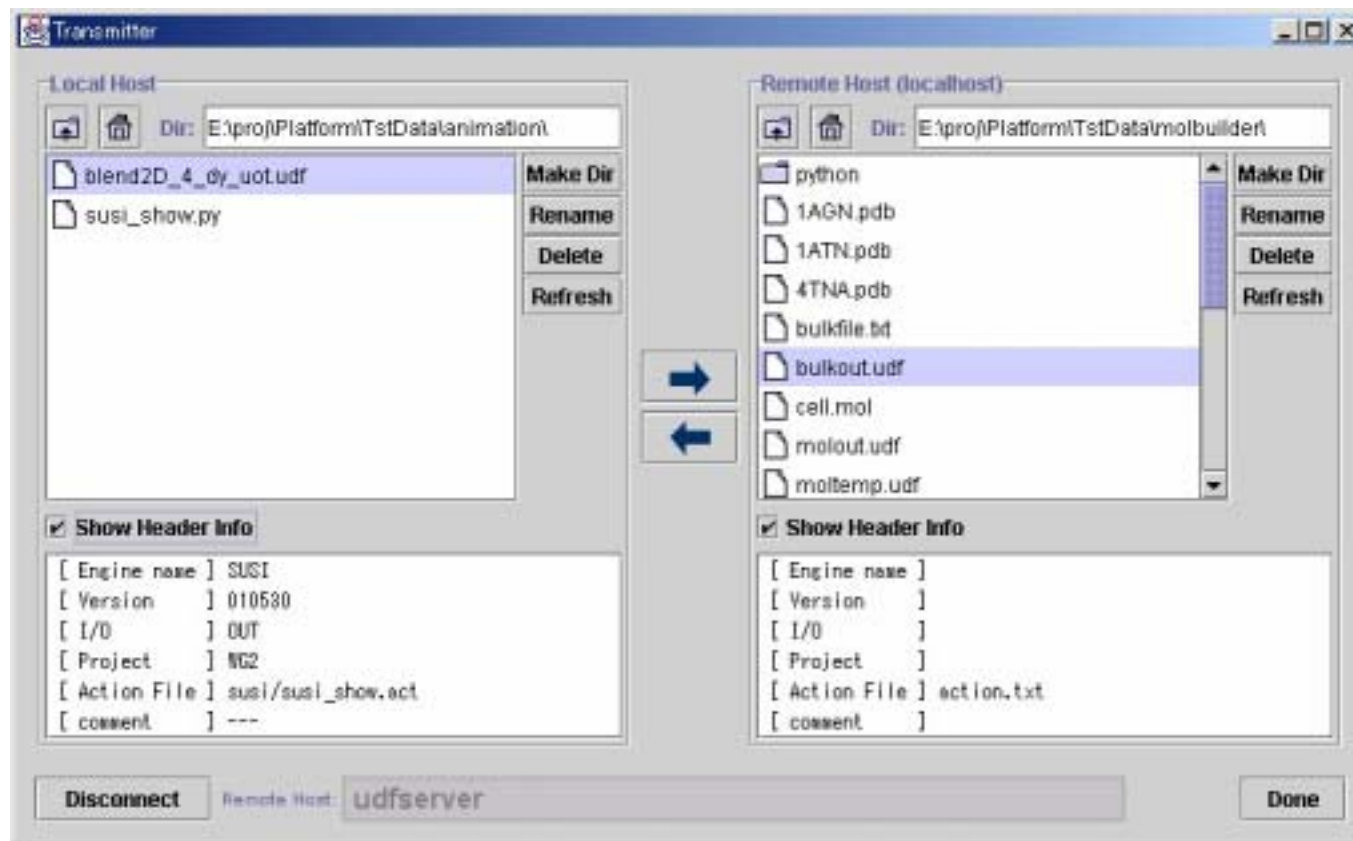


UDFデータ管理サーバ

データマネージャ



データマネージャ使用例



UDFファイル
の
管理
転送
情報参照

を行うことが
できる



GUI機能拡張



- Help
 - UDF定義に説明を記述し、GUIで参照
- Select
 - UDF定義でデータ候補を記述し、GUIで選択
- Unit
 - 単位変換機能
- Picking
 - オブジェクト選択機能
- 2Dプロット機能改良
 - 内蔵GraphSheetによるグラフ用データ作成機能
 - gnuplotインタフェースライブラリ提供





Unit機能



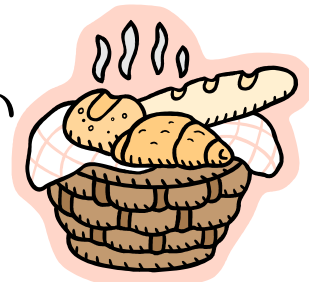
- 多くの解析エンジンは無次元の物性値を扱う
- But ...

従来の方式では計算方法をマニュアルで調べ、
無次元化計算を行う必要があった

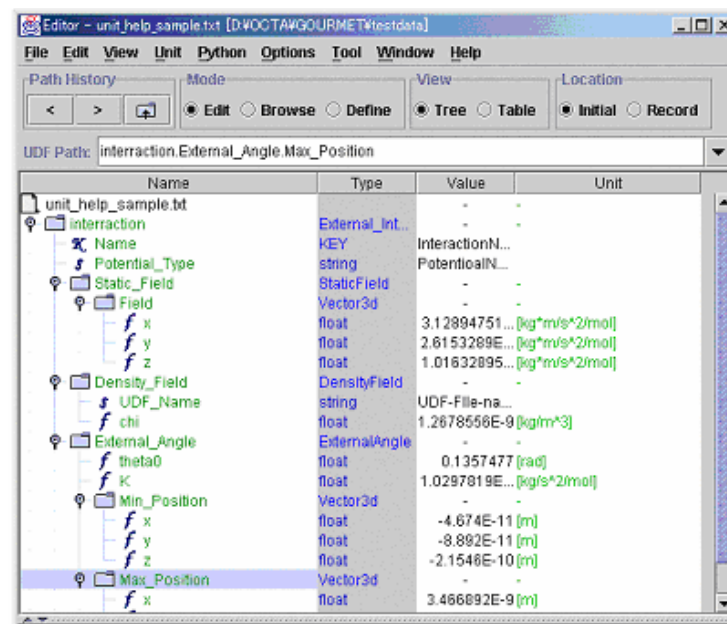
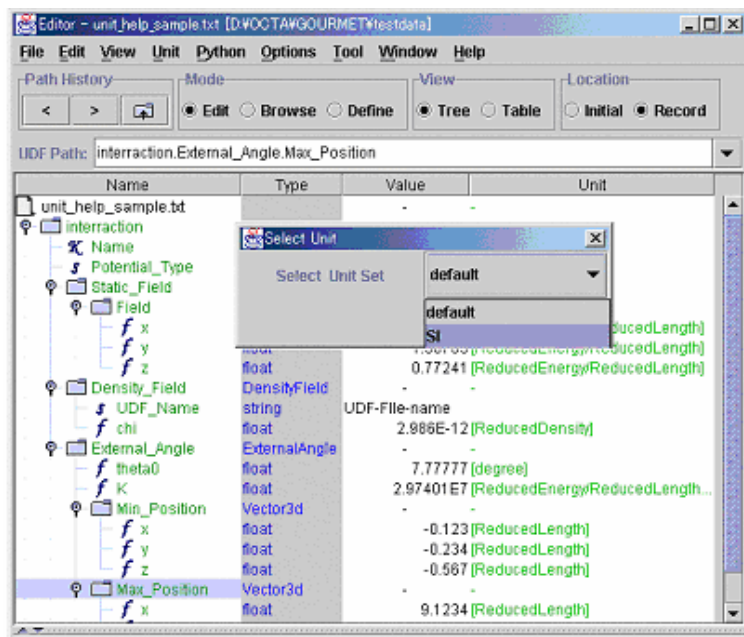
- Then ...

無次元化計算は、GOURMETが行う

- 無次元化方法はUDFで定義される
- 無次元化方法をユーザが知る必要が無い

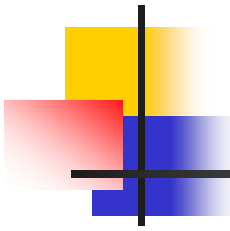


単位系変換の利用例



単位系の変換・逆変換をGUIで行うことができる
(データ毎のスケール変換も可能)

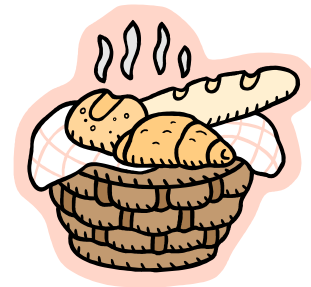




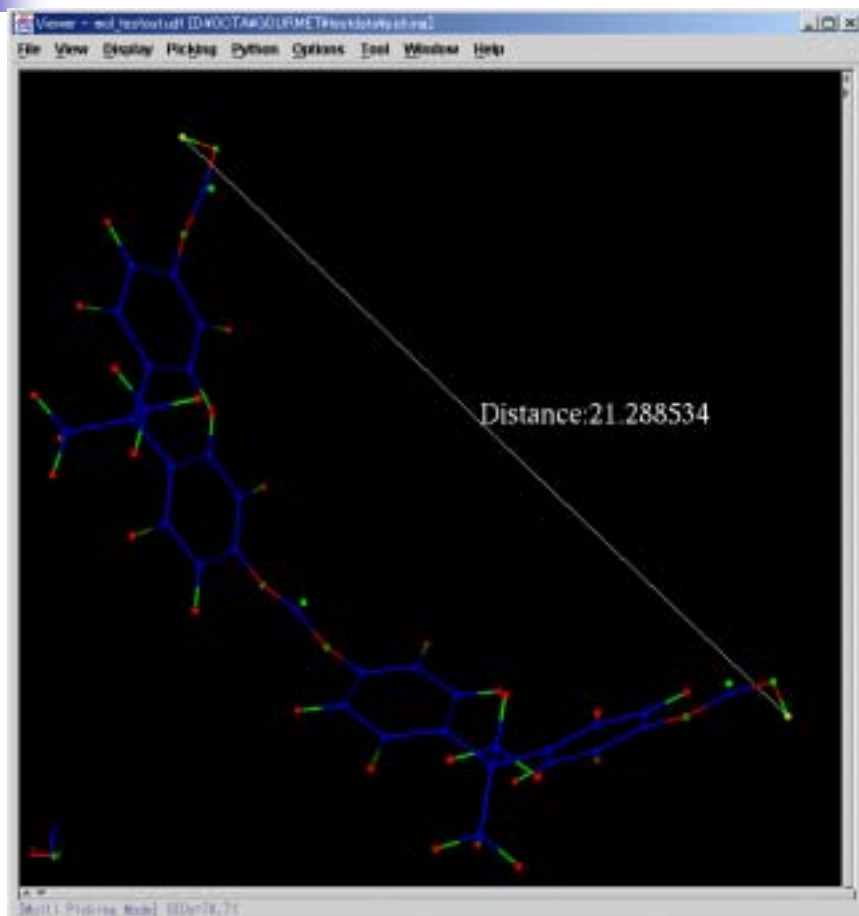
Picking機能



- 3次元表示された描画オブジェクトをマウス選択し、
- そのオブジェクトに定義された任意のアクションを行う
 - 例えば1分子の選択と再表示など
- 解析結果の分析作業を支援する

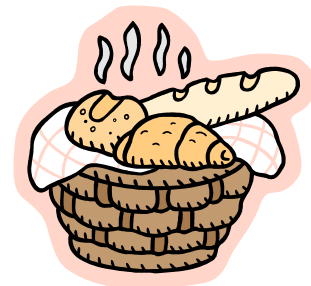


Picking機能利用例

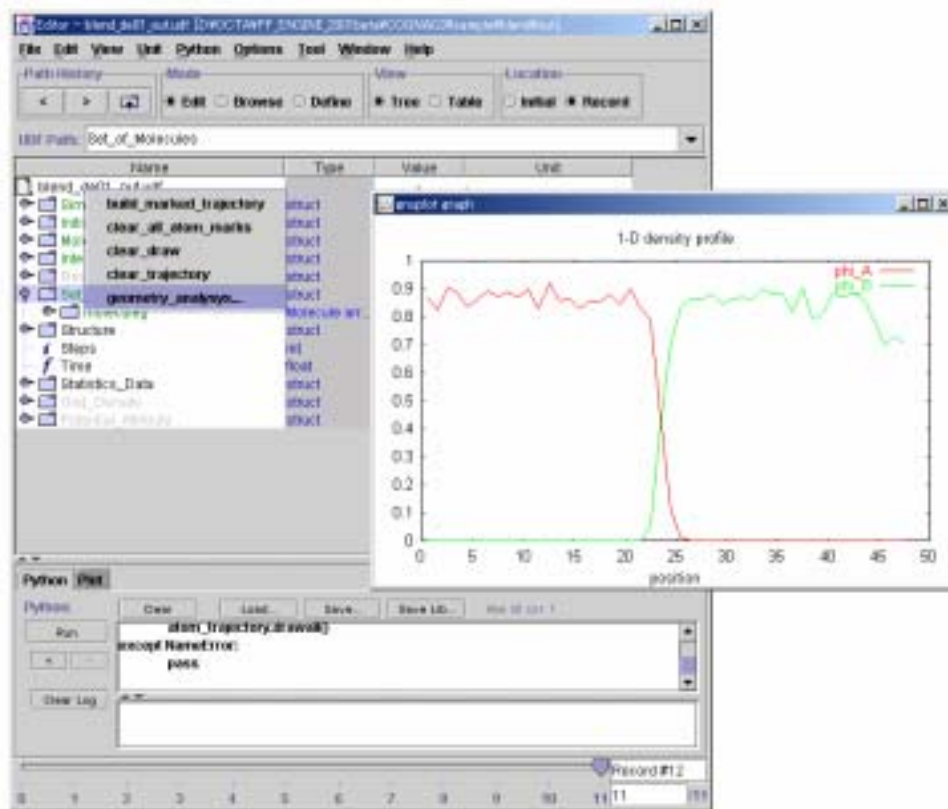


選択した2原子間の
距離計算表示

**(このままアニメーション
も可能)**



プロットアクションの実行例



COGNACの計算結果から1次元体積分率をプロットするアクションの実行例

(3アクションで
グラフ作成が可能)

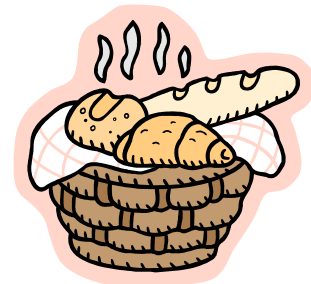




リリースまでの道のり



- 1999～開発開始
- 2000/6 α 版配布
 - システムが持つべき諸機能を検討
- 2001/6 β 版配布
 - アーキテクチャ再構築、高速度・省メモリ追求
- 2002/4 リリース
 - 利便性向上



改善点

- α版、β版を使ってくださった方々へ-



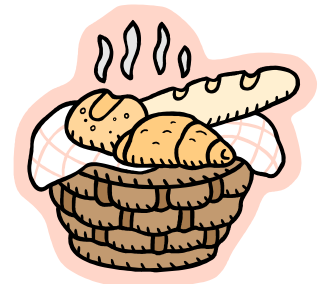
■ 速度向上

- I/O: 20倍
- 描画: 30~500倍 (メモリキャッシュ使用時)

■ 省メモリー化

- $\frac{1}{4}$ (サーバ・クライアントからローカル計算へ)

■ 操作性・利便性の向上

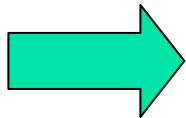




最後に



- 食材はそろった。
 - *COGNAC, SUSHI, PASTA, MAFFIN,*
- 貴方を一流のグルメするための道具もそろった。
 - **GOURMET with Python & GNUPLOT**
- さあ、貴方の好きな料理を召し上がれ！



GOURMET Demo (デザート)
をどうぞ！

