

Web対応分子科学・構造/流体解析データ可視化システム『SpaceFinder』のご紹介

ダイキン工業株式会社電子システム事業部CCSグループ

<https://doi.org/10.15017/1470478>

出版情報：九州大学情報基盤センター広報：全国共同利用版. 3 (2), pp.108-119, 2003-07. 九州大学
情報基盤センター
バージョン：
権利関係：



Web対応分子科学・構造/流体解析データ可視化システム 『SpaceFinder』のご紹介

ダイキン工業株式会社 電子システム事業部 CCS グループ info@ns.comtec.daikin.co.jp

1. SpaceFinder の概要

SpaceFinder は、ダイキン工業株式会社で開発した数値計算結果可視化ソフトウェアです。

SpaceFinder は、各種の分子科学、構造解析、流体解析の結果をサーバシステム上に登録し、Web システムを利用して、簡易に検索、3 次元表示で閲覧を行うことができます。

現在コンピュータの普及／計算速度のアップにより構造解析、流体解析、分子設計など様々なシミュレーションが行われています。ただ、これらの結果は専用マシンの専用ソフトでしか見ることができませんでした。

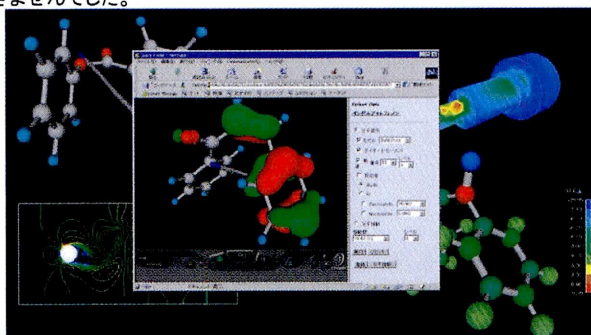


図 1 SpaceFinder による表示例

SpaceFinder は Web ブラウザを利用しますので、専用端末は必要とせず既存のハードウェア資源が有効活用できます。たとえば、使いなれた PC から簡単に構造解析や流体解析の結果を観察することができます。よって、多くの方が利用できるシステムです。また、Web ブラウザからアクセスしますので、オペレーションも簡単であり専用ソフトで必要となる時間のかかる操作方法の教育を必要としません。

3次元表示には、VRML ファイルを使用していますので、PC 上で3次元の回転、拡大/縮小が可能です。さらに表示方法の変更も可能ですので、解析結果に対する的確な考察ができます。(図 3～8 参照)

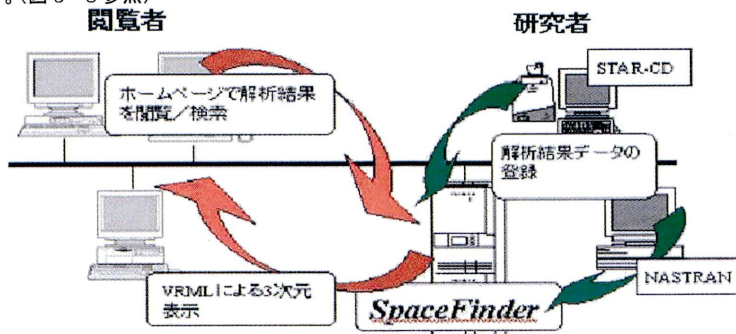


図 2 SpaceFinder のシステムイメージ

SpaceFinder の導入により、九州大学 情報基盤センター 研究用計算機システムでは、利用者が、各種の計算結果を簡易に3次元表示して解析結果を考察することができます。また、学外へのプレゼン用のツールとしても利用できます。たとえば、研究室毎に独自に作成されているホームページ上にSpaceFinderで作成したVRMLファイルを貼り付けることにより、これまで2次元ファイルフォーマットで表現していた研究成果などをより表現豊かな3次元表示に切りかえられます。

2. SpaceFinder の特徴

SpaceFinder には従来の3次元可視化ソフトウェアとは異なる下記のような特徴があります。

- ① Webブラウザを通して数値計算結果の3次元後処理が可能。
- ② ホームページを見るような簡単な操作で数値計算結果の3次元後処理が可能。
- ③ SpaceFinderはサーバーにのみインストールするので、クライアントになるPCには特別なソフトや設定が不要。
- ④ ユーザー独自で開発した数値計算プログラム以外に汎用の構造解析・流体解析・分子軌道計算ソフトウェアなど様々なプログラムに幅広く対応。
- ⑤ 数値計算結果の管理機能も装備。

3. SpaceFinder の機能一覧

3-1. 計算ソフトウェアとのインターフェイス

以下の計算ソフトとインターフェイスを持ちます。

1) 分子科学分野

- ① Gaussian98 計算結果ファイル(. log)
* 各種分子表示を行うためには、GAUSSIAN 計算時に以下のキーワードを指定して計算したものを登録してください。
- 軌道・反応性を表示するには
GFPRINT POP=FULL
- 分子振動を表示するには
FREQ
- ② MOPAC2000 計算結果ファイル(. out)
* 各種分子表示を行うためには、計算時に以下のキーワードを指定して計算したものを登録してください。
- 軌道・反応性を表示するには
VECTORS BONDS ALLVEC
(VECTORS を指定する時は、必ず、ALLVEC もいっしょに指定下さい。)
- 分子振動を表示するには
FORCE

2) 構造・流体解析分野

- | | |
|--------------------|---------------------|
| ①MSC/NASTRAN V69以上 | Output2 ファイル(. op2) |
| ②MSC/MARK K5以上 | T19 ファイル(. T19) |

3-2. 表示機能

SpaceFinder は下記のような多彩な表示方法をサポートしています。

①リスト表示

下記の内容が解析データごとにリスト表示できます。

- ・タイトル名、コメント、登録者、HTMLによる文書など (図1:タイトル・リスト画面)

②3次元(VRML)表示機能

分子科学

- ・分子モデル表示:ボール&スティックモデル、スペースフィルモデル
- ・ダイポールモーメント(図4:ダイポールモーメント表示)
- ・分子軌道表示:アイソサーフェス(等値面) (図5:分子軌道表示)
- ・電荷表示(図6:電荷表示)
- ・分子振動表示

流体解析

- ・各種プロパティごとの色分け表示
- ・表示手法:カラーコンタ、ラインコンタ、ベクトル、流線、アイソサーフェイス(等値面)
(図7:流速のカラーコンタ表示)
- ・表示面:XYZ 断面、任意断面、メッシュモデル、モデル輪郭線
- ・表示機能:流速、圧力などのスカラ値の変更

構造解析

- ・各種プロパティごとの色分け表示
- ・表示手法:カラーコンタ、ラインコンタ、ベクトル、変位モデル(図8:応力のカラーコンタ表示)
- ・表示面:形状表面、XYZ 断面、任意断面
- ・表示機能:応力、変位などスカラ値の変更、応力テンソルより最大主応力、最小主応力、ミーゼス応力

③登録機能

解析結果データ登録時に下記の設定及び登録が可能です。

- ・設定:入力プロパティの指定、初期3次元表示画面の設定
- ・登録が可能な項目:タイトル、コメント、登録者入力、HTMLによる文章ファイルとのリンク登録

④管理機能

データ管理機能

- ・2階層(セクション、データベース)によるデータ管理
- ・データの登録、削除、変更

セキュリティ管理機能

- ・ログイン認証: ユーザ ID、パスワード、グループ ID の登録、削除
- ・NIS(ネットワークインフォメーションシステム)に対応した認証も可能

データデータベースアクセス管理機能

- ・各データベースに対して、各ユーザ ID、グループ ID 毎にデータ参照、データ登録・削除などの利用ユーザアクセス管理が可能。

履歴管理機能

- ・登録、削除、変更したときの実行クライアント IP、日時保存などの履歴管理が可能。
- ・各データ毎のアクセス回数を保存

⑤その他

- ・VRML ファイルの保存機能

(画面表示例)

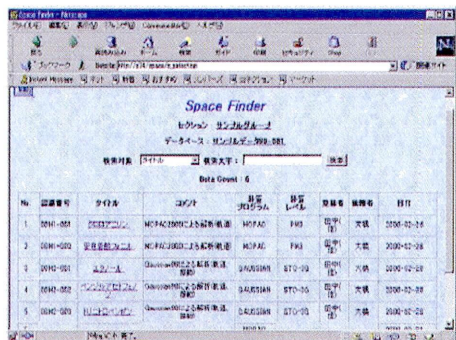


図3 タイトル・リスト画面

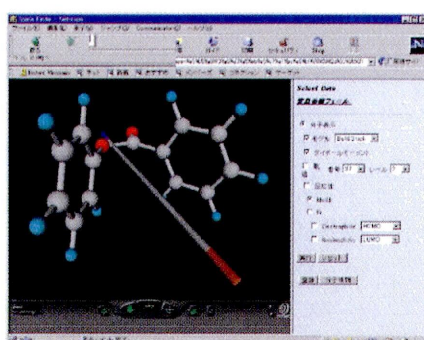


図4 ダイポールモーメント表示

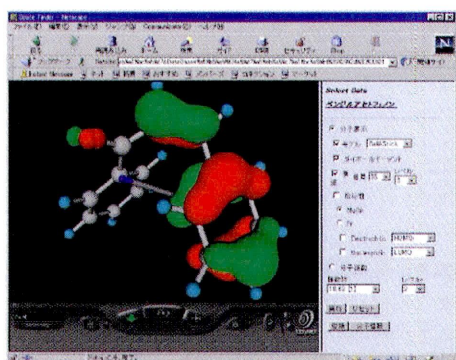


図5 分子軌道表示

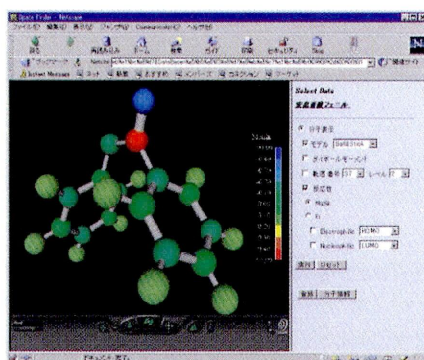


図6 電荷表示

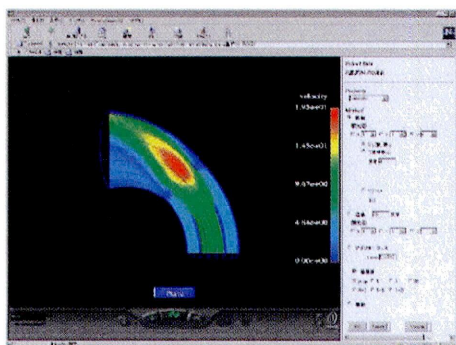


図7 流速のカラーコンタ表示

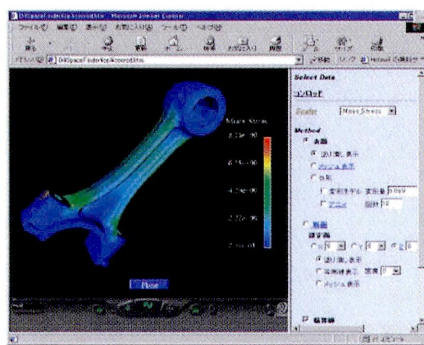


図8 応力のカラーコンタ表示

4. SpaceFinder 起動の URL

起動時の URL により日本語と英語のメニューおよびオンラインヘルプの切り替えが可能です。

各 URL は以下のようになります。

日本語の場合 : <https://kyu-ss.cc.kyushu-u.ac.jp/space>

英語の場合 : https://kyu-ss.cc.kyushu-u.ac.jp/space/index_e.cgi

5. ユーザー登録

URL を指定すると認証画面が表示されます。

SpaceFinderサーバーに登録されているユーザ名とパスワードで入力、「実行」をクリックすることによりメインメニューに移ります。但し、初めて SpaceFinder を利用する場合のみユーザー名/パスワードを入力後、「ユーザー登録」をクリックして下さい。

6. データ登録

(1) データ準備

解析コードより出力された解析結果ファイルをWebサーバー上にある利用者のホームディレクトリに用意し、Web上より参照できるようにファイルリンクもしくはコピーして下さい。

コピーの時 % sfcop File_name /home/usr/sftmp/user_ID

リンク時 % sfln File_name /home/usr/sftmp/user_ID

(注意) sfcop, sflnはユーザー登録後に行って下さい。

(2) データ登録

認証後、「登録」メニューよりデータ登録を行います。

解析結果データを選択し、「データチェック」をクリックします。

次のメニューにて正常にデータが読み込めたかリストで確認し「登録」をクリックして下さい

7. データ参照

登録済みのデータを可視化する方法について「分子科学分野」及び「構造／流体解析分野」毎に、ご説明致します。

まず、「参照」メニューにより登録したデータリストが表示されます。
「Data ID」項の番号をクリックすると3次元Viewerが起動されます。

セクション: USERS
データベース: ichikawa003

検索対象: [All] 検索文字: _____

表示件数: [10件] 検索 [詳細検索]

前を表示 次を表示 戻る
1 ~ 1 を表示 合計: 1 件

No.	Data ID	タイトル	コメント	計算ソフト
1	15	リンノルデータ		NASTRAN

(1) 参照 ～ 分子科学分野 ～

SpaceFinder の初期画面で「参照」を選択します。

セクション: 基礎化学研究室
データベース: 分子軌道計算

参照 登録 管理 認証

先に登録したデータ ID を選択します。

参照画面

セクション: 基礎化学研究室
データベース: 分子軌道計算

検索対象: [ALL] 検索文字: _____

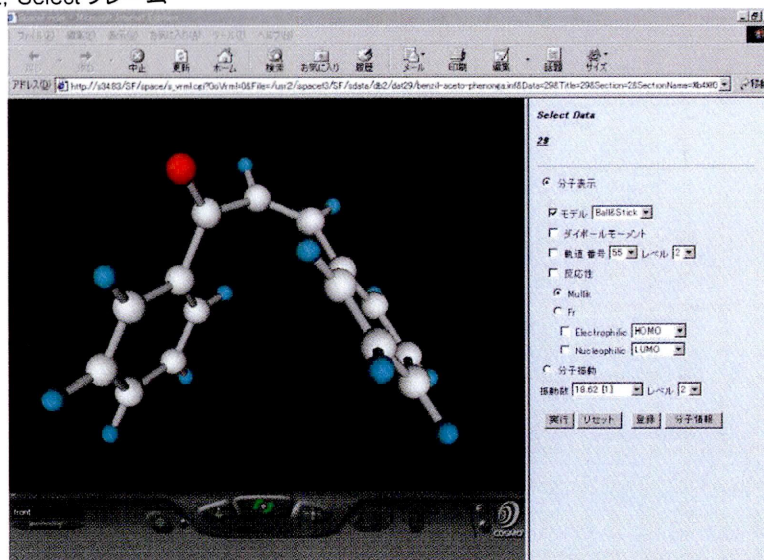
表示件数: [10件] 検索 [詳細検索]

前を表示 次を表示 戻る
1 ~ 6 を表示 合計: 6 件

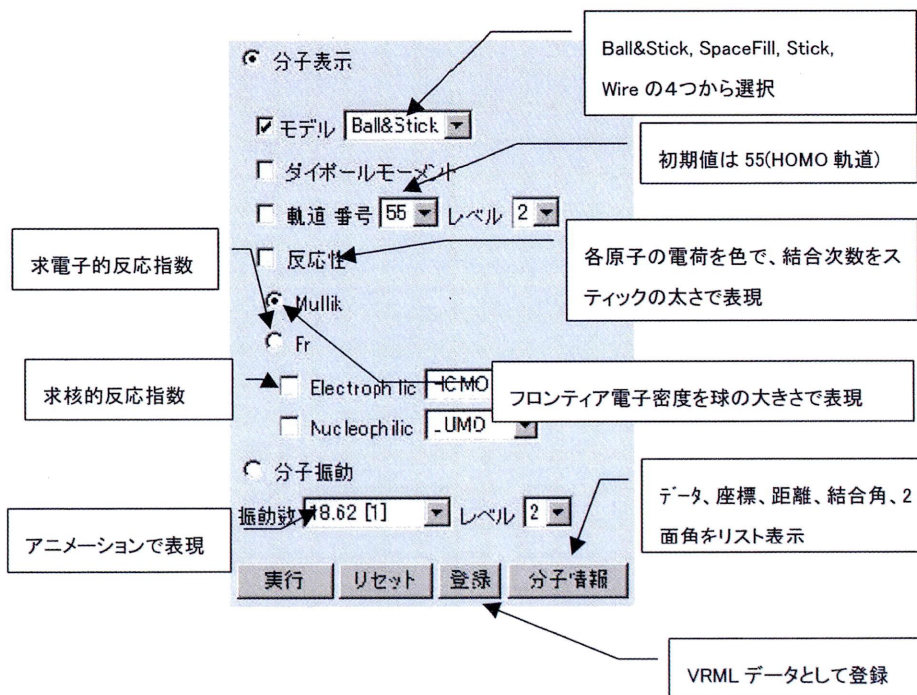
No.	Data ID	タイトル	コメント	依頼者	登録者
1	31	トリニトロベンゼン	GAUSSIAN98による解析	市川	山田
2	30	エタノール	GAUSSIAN98による解析	市川	山田
3	29	ベンジルアセトフェノン	GAUSSIAN98による解析	市川	山田
4	28	フェノール	MOPAC2000による解析	田中	山本
5	27	クロロアニリン	MOPAC2000による解析	田中	山本
6	26	安息香酸フェニル	MOPAC2000による解析	田中	山本

ブラウザがもう1つ起動され、下図のように登録時に設定した内容で結果表示されます。

VRML, Select フレーム

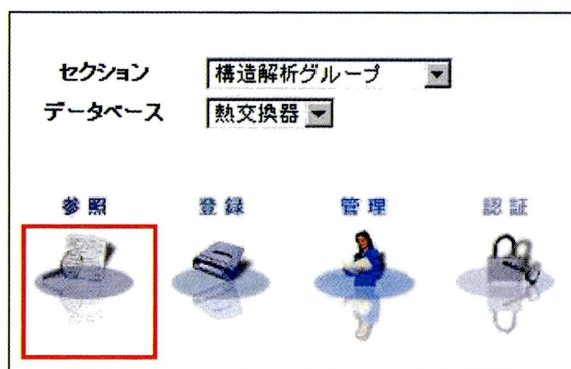


Select フレーム



(2) 参照 ～ 構造／流体解析分野 ～

SpaceFinder の初期画面で「参照」を選択します。



先に登録したデータIDを選択します。

参照画面

セクション：構造解析グループ
データベース：熱交換器

検索対象: ALL 検索文字:

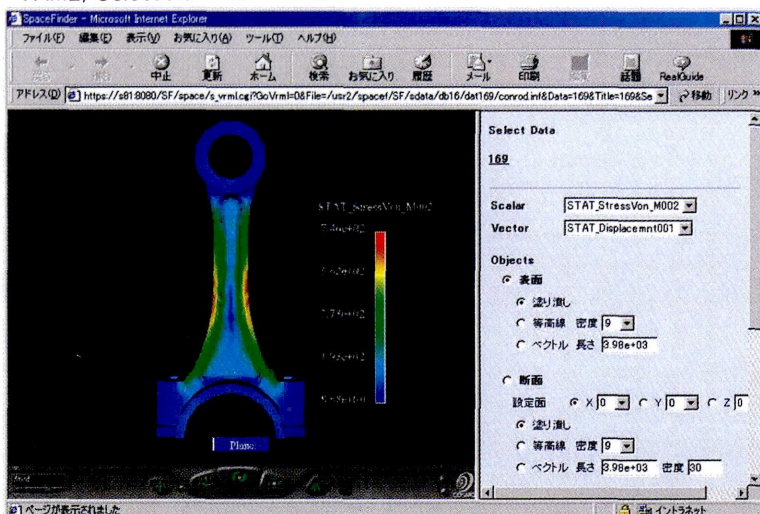
表示件数: 10件 検索 詳細検索

並び表示 並び表示 戻る
1～10を表示 合計: 10件

No.	Data ID	タイトル	コメント	依頼者	登録者
1	296	熱交換機のVRML登録	放射音の低減	田中	市川
2	295	天板の振動抑制	放射音の低減	田中	市川
3	298	ピストン45度の強度	ピストン45度の強度	山下	田中
4	276	止め具	集中過量の評価	鈴木	小林
5	275	冷却フィン	サンブラーピース	山本	斎藤
6	112	放熱板の形状検討	空冷ファンの設置場所の検討	丹本	小林

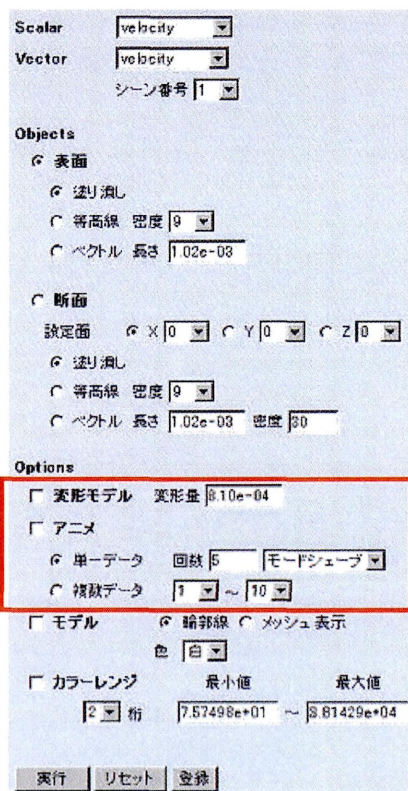
ブラウザがもう1つ起動され、下図のように登録時に設定した内容で結果表示されます。

VRML, Select フレーム

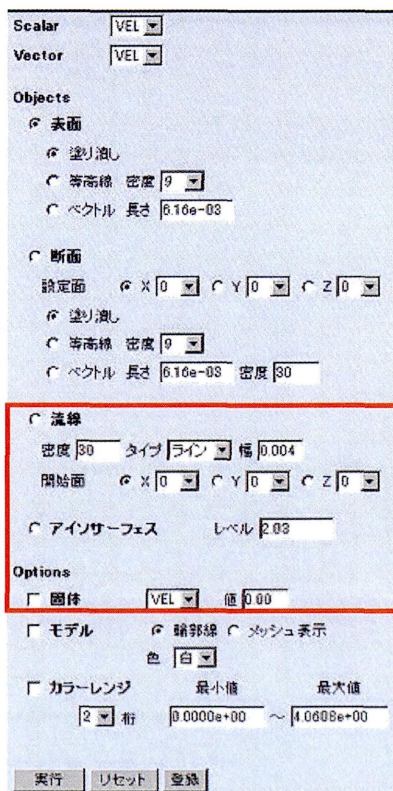


Select メニューは構造解析と流体解析用では以下の赤枠内が異なります。

構造解析用メニュー



流体解析用メニュー



構造解析用メニュー

Scalar

Vector

シーン番号

Objects

☒ 表面

☒ 塗り潰し

☐ 等高線 密度

☐ ベクトル 長さ

☐ 断面

設定面 ☒ X ☐ Y

☒ 塗り潰し

☐ 等高線 密度

☐ ベクトル 長さ 密度

Options

☐ 変形モデル 変形量

☐ アニメ

☒ 単一データ 回数 モードシ

☐ 複数データ ~

☐ モデル ☒ 輪郭線 ☐ メッシュ表

色

☐ カラーレンジ 最小値 桁 ~

実行 リセット 登録

応力値、温度などの物理量を指定し、色として表現

変位や流速などベクトル量を指定し、変形図や矢印として表現

時刻暦データの場合、シーン番号を指定

解析モデル表面での表示方法を指定

X,Y,Z断面もしくはI,J,K断面での表示方法を指定

ベクトル量を変形図として表現

単一データの場合は線形/Sin 補間によるアニメーション。時刻暦の場合の指定シーン間でアニメーション化

変位図や断面図の場合、元形状を表示

色の最大/最小値、および数値の表示桁数を指定

VRML データとして登録

流体解析用メニュー

☒ 流線

密度 タイプ 幅

開始面 ☒ X ☐ Y

☐ アイソサー フェス レベル

Options

☐ 固体 値

流線で流速を表現

温度などのスカラー値を3次元コンタ(アイソサーフェス)で表現

流速=0、温度=初期値などのアイソサーフェス表示により固体部を表現

8. クライアントマシン推奨環境

- CPU:Pentium 100MHz 以上
- OS: Windows98、ME、NT 4.0、2000、XP
- Webブラウザ(JavaScript 対応必要)と VRML プラグインソフトウェア
 - Netscape4.0.5 以上
 - MS Internet Explorer 4.0 以上
 - CosmoPlayer2.0 以上

9. おわりに

最近ではコンピュータの普及／計算速度の大幅な向上により、大規模な数値計算が可能になり、様々なシミュレーションのニーズが高まっています。

SpaceFinderは、Web ブラウザを使って数値計算結果を迅速・簡単・詳細に参照できる画期的な3次元可視化ソフトウェアです。

SpaceFinder は、専用の可視化ソフトウェアを使うことなく、Web ブラウザ上で利用者自身が手軽かつスピーディに数値計算結果を確認できますので、今後、分子科学／構造解析／流体解析などの研究分野で幅広くご利用頂き、利用者の研究のお役に立てればと考えております。

なお、SpaceFinder の利用方法の詳細につきましては、九州大学 情報基盤センターにある「SpaceFinder 導入説明」又は「SpaceFinder マニュアル」をご参照下さい。

SpaceFinderマニュアル参照先は下記となります。

- 日本語版 :https://kyu-ss.cc.kyushu-u.ac.jp/sf_htdocs/manual/user/jp/sfm_contents.htm
- 英語版 :https://kyu-ss.cc.kyushu-u.ac.jp/sf_htdocs/manual/user/en/sfm_contents.htm