階層的モデリング：必要性と実現のための戦略

名古屋大学大学院 土井正男

1. はじめに

階層的モデリングとは、複雑な現象を一つのモデルだけで現象をシミュレーションするのではなく、階層に特有ないくつかのモデルを組み合わせて、現象全体をシミュレーションしようとする考え方である。物理学者にとってこの考え方はごく当たりまえのように見えるが、計算科学において、階層的モデリングという言葉が使われ始めたのは比較的最近のことである。計算科学の今日的なテーマ、地球規模の気象の予測、地震の予測、ジェットエンジンの燃焼材料の設計などのたくさんの問題においては、問題の中に色々なスケールの現象が含まれ、一つの計算式の高速計算だけで、問題を解くことができなくなっている。そのために、現象をいくつかの階層に分け、階層ごとのモデルを組み合わせて全体のシミュレータをつくらなければならないという考えが生まれてきた。色々なスケールや物理の問題が含まれているという意味でマルチスケール、マルチフィジクス (multi scale, multi physics)の問題といわれることもある。

計算科学における階層的モデリングというのは、言うに易く、行ないは難しの典型的な例である。問題は、階層をつなぐという作業を計算機にやらせることである。そこでは、温度、圧力という物理学的概念を、計算機に理解させることが必要になる。これをどのように実現するかは、物理学概念のむつかしさの問題だけでなく、プログラムの設計、開発、情報共有など組織と文化の絡んだ問題である。

1998 年から 4 年間、私は”高機能材料設計プラットフォームの開発”というプロジェクトに携わって、高分子材料の階層的モデリングの方法について OCTA というシステムを開発した。ここでは、OCTA の開発に当たって、私がどのよう考え、どのようなものを作ってきたかについて書いてみたい。

2. シミュレーションエンジン

私たちは、高分子のメソスケールの現象をあつかうモデルとして、四つを選びプログラム開発を行った。選んだものは、最先端の理論に基づくものというより、どちらかというと、学問的に確立しているが、汎用のシミュレーションプログラムとしては提供されていなかったものである。

(1)粗視化分子動力学エンジン　COGNAC

COGNAC は分子動力学法の計算を行なうプログラムである。ユーザが設定した任意の分子模型に対して、流動、変形、電場、化学反応などの現象をシミュレーションできる。他のメソスケールシミュレータと組み合わせて、界面近傍の高分子のシミュレーションができる点に特徴がある。

(2)レオロジー特性予測エンジン　PASTA

PASTA はレプテーション模型に基づいて、分子量分布のある高分子の粘弾性を予測するプログラムである。非線型粘度、伸張粘度、分子拡散などが計算できる。

(3)界面エンジン　SUSHI

SUSHI は、高分子を含む界面にたいして、平均場近似に基づいて高分子の形態やセグメント分布を計算するプログラムである。ブロック高分子のつくるミクロ相分離構造、高分子界面活性剤の自己組織化、ミセル化、界面への高分子の吸着平衡等の研究に応用することができる。

(4)多相系エンジン　MUFFIN

MUFFIN は、多相の連続体にたいして、流動、変形、拡散・輸送などの現象をシミュレーションす

るプログラムである。MUFFIN は実際には Elastica, ElaDyna, GelDyna, Electrolyte, MEMFluid, PhaseSeparation という６つのパッケージからなり、多相材料の弾性変形、ゴムやゲルの変形、電気化学系、マイクロ流動、相分離などの現象を扱う事ができる。

3. シミュレーションプラットフォーム

以上のシミュレータは、高分子材料のいくつかの特徴的なスケールを扱うものであるが、それでもソフトマターの抱える問題のごく一部しか扱うことはできない。階層的なモデリングによってソフトマターのあらゆる階層がシミュレーションできるようになるためには、世界の大学や研究機関でつくられている、たくさんのシミュレーションプログラムを取り込む必要がある。大学ではたくさんのプログラムが書かれているが、ほとんど使われることなく消えていってしまう。これは研究者の秘密主義のためではなく、人に使ってもらうプログラムを書くための手間がたいへんであるという事による。私たちは研究者がプログラムを相互利用するときの土台になるようなものを作りたいと考えた。プログラムが、十分わかりやすい形で提供される環境を整えれば、異なるプログラムの扱う情報を変換する仕事は、ユーザがやるであろう。大切な事は、プログラムの入出力ファイルの中のデータの意味を他のユーザが理解できるようにする事である。

このような考えの下に私たちは UDF(User Definable Format)というデータ形式を考案し、それを扱うたプログラム GOURMET を開発した。UDF は、科学技術計算で扱うデータの汎用表現を目的に設計されており、すべての数値データに対して、名前と単位を与える事ができる。UDF で書かれたファイルの中のデータは、データベースのデータのように、任意の順序で取り出し、書き換える事ができる。GOURMET は UDF ファイルに対して、データの構造を表示し、データ入力、編集、データの抽出、解析、グラフ化、３次元表示などを行なうプログラムである。どのような言語で書かれたプログラムであっても、データの入出力を UDF の形式で書けば GOURMET の環境を利用する事ができる。Python というプログラム言語を搭載しており、簡単なシミュレーションプログラムはそれだけを用いて作る事ができる。

4. おわりに

OCTA はソフトマテリアルを扱うための統合化シミュレータであるが、閉じたものではない。OCTA の設計においては、多くの人の手によってその後も発展して行くようなシステムを作ることを目標とした。OCTA が提供しているものはシミュレーションプラットフォームと言う大きなテーブルと、その上に載ったいくつかの単品の料理（エンジン）だけである。単品でも食事はできるが、手を加えてアレンジすればおいしいコース料理になる。新しい素材を使って新しい料理を付け加えることも可能である。皆さんに利用していただいてプログラム協調の土台となれば幸いである。

参考文献

[1] http://octa.jp： OCTA の公式ホームページである。
[2] OCTA マニュアル,"ソフトマテリアルのための統合化シミュレータ","Integrated simulation system for soft materials" いずれも上記 URL よりダウンロード可能
[3] Material Modeling Platform, Masao Doi, proceeding of the 15th Toyota Symposium for Scientific and Engineering Computations for the 21th Century, Elsevier, to be published
[4] 階層的モデリング,土井正男、パリティ 2002 年 8 月号