

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 5 日現在

機関番号：32612

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2015～2019

課題番号：15K05201

研究課題名(和文) 不純物・相転移を伴う複雑流体の分子論からの数値解析

研究課題名(英文) Molecular Dynamics Study on Complex Fluid with Impurities and Bubbles

研究代表者

渡辺 宙志 (Watanabe, Hiroshi)

慶應義塾大学・理工学部(矢上)・准教授

研究者番号：50377777

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,600,000円

研究成果の概要(和文)：ポリマーなどの不純物や、気泡生成などの相転移と流れがカップルした複雑流体の振る舞いを分子動力学法によるシミュレーションにより解析した。特に、円柱後方に発生するカルマン渦に注目し、高分子を添加すると渦がぼやけること、高分子の長さが重要であること、気泡生成を伴う流れでは、渦が発生する場所が後方にずれ、その結果円柱にかかる渦からの反作用が消えることなどを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

流体は、ごく微量の不純物が混ざっただけでその物性を大きく変えることが知られている。工学応用上、その振る舞いを理解することは非常に重要であるが、不純物と流体を構成する分子との相互作用がミクロスケールであるのに対し、結果として現れる流れがマクロスケールであることから、解析が難しかった。本研究は大規模シミュレーションによりそのスケール差を克服することに成功し、複雑流体の性質について新たな知見を与えた。

研究成果の概要(英文)：The behavior of complex fluids, which contains polymers or bubbles, was investigated by molecular dynamics simulations. We have studied the Kalman vortexes occurring at the rear of the cylinder and found that the vortexes become blurred for fluid with polymers. This phenomenon did not occur when the length of the polymer was short, indicating that the length of the polymer was important. In a flow with bubble formation, the position of the vortex generation shifted to the rear and the reaction from the vortexes on the cylinder disappears. These findings can only be obtained by studying the molecular scale by molecular dynamics methods.

研究分野：統計力学

キーワード：分子動力学法 複雑流体 ハイパフォーマンスコンピューティング

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

(1) 気泡や高分子などの不純物を含む液体は、その量ごく微量であってもマクロな性質が大きく変化する。その振る舞いを知ることは工学応用上、極めて重要であるが、不純物と溶媒分子が相互作用するミクロなスケールと、媒質を連続な場とみなせるマクロな流れのスケールには大きな乖離があり、ミクロな変化がマクロに及ぼす影響を統一的に理解することは困難であった。

(2) ミクロな変化がマクロに及ぼす影響を調べるのに、原子スケールから現象を解像する分子動力学シミュレーションが有力であるが、複雑流体を再現するには数億～一兆原子規模の大規模シミュレーションが必要となる。このような計算にはスーパーコンピュータの利用が必須となるが、2000年代後半より CPU の動作周波数は向上しておらず、計算性能の向上はおもにコアの増加と SIMD 幅の増加によって担われてきた。「京」の次の国策スーパーコンピュータは、「京」に比べて、さらに SIMD 幅が広がることが予想されており、その広い SIMD 幅を有効に活用するアルゴリズムやアプリケーションの開発が必要であった。

2. 研究の目的

(1) 大規模な分子動力学シミュレーションを行うことで、高分子や気泡などを含む複雑流体を原子スケールから解像し、その影響を詳細に解析する。そもそもこのような複雑流体を分子動力学法で再現できるかどうかはチャレンジングであり、シミュレーション、解析手法を確立させる。

(2) 超幅広 SIMD 時代に備えるため、大きなビット数を持つレジスタを有効活用する数値計算アルゴリズムを開発する。分子動力学法においては、データ構造と SIMD 化効率、そしてキャッシュ効率が複雑に関係しており、その関係を明らかにする。

3. 研究の方法

(1) 大規模な分子動力学計算により、複雑な流体の振る舞いを原子スケールから解像する。特に、円柱周りの流れに着目し、高分子の添加や気泡生成が渦形成にどのように影響するか調べる。

(2) 古典分子動力学法で広く用いられている Lennard-Jones ポテンシャルに着目し、その力の計算を効果的に行う SIMD 化の実装を調べる。特に、データ構造と効率の関係について明らかにし、今後の幅広 SIMD アーキテクチャに備える。

(3) 大きなビット長を持つレジスタを活用するアルゴリズムを開発する。特にビット演算は、理想的にはレジスタのビット長に比例した性能向上が見込めるため、ビット演算を駆使した乱数生成アルゴリズムを考案、実装する。

4. 研究成果

(1) 高分子液体におけるカルマン渦の解析

流れの中に円柱があると、その後方にカルマン渦と呼ばれる、周期的な渦の放出が起きる。この流れは理想的にはレイノルズ数で記述されるが、液体に高分子を添加すると、長さのスケールが複数になるため、レイノルズ数だけでは記述できない複雑流体となる。実験的に、高分子を添加すると (a) カルマン渦がぼやける、(b) 放出周波数が低下する、(c) 高分子の鎖長が短い場合はそのような影響を受けないことがわかっているが、流れの中で高分子がどのような状態になっているかは不明であった。そこで、分子動力学シミュレーションを行うことで、高分子がカルマン渦形成に与える影響について調べた。その結果、実験で見られた (a) カルマン渦のぼやけ、(b) 放出周波数の低下、(c) 高分子の鎖長依存性を定性的によく再現することができた。さらに、流れ場の中での高分子の振る舞いを調べるために慣性半径を評価したところ、短鎖長の高分子は、流れの全域にわたってほぼ球形分子として振る舞っていたのに対し、長鎖長の高分子はせん断により引き延ばされ、渦に巻き込まれており、その戻ろうとする力が渦を抑制しているメカニズムが明らかとなった[1]。

(2) キャビテーションによる流れへの影響

船のスクリューなど、液体中で物体が運動すると、物体表面で圧力が低下することで気泡が生成、消滅する場合がある。これはキャビテーションと呼ばれ、騒音や金属の壊食等の問題を引き起こす。流体モデルでは気泡生成の瞬間は扱うことができないため、生成後の気泡の成長を追うこと

になるが、分子動力学計算であれば、系が自発的に相転移を引き起こすため、自然なモデル化が可能となる。我々は、気液相転移を起こす粒子モデルにおいて円柱周りの流れを解析した。その結果、温度や流速を調整することで、円柱の後方で気泡が生成する条件を見出した。円柱後方で気泡が生成することで渦の発生個所が後方にずれ、さらに渦からの周期的な反作用が円柱に作用しなくなることがわかった。本研究により、気泡をモデル化せずに、系が自発的に相転移を引き起こす条件において、相転移がマクロな流れに明確な影響を与えることを示すことができた[2]。

(3) AVX2, AVX-512 を用いた Lennard-Jones ポテンシャルの SIMD ベクトル化

分子動力学シミュレーションでは力の計算がホットスポットであり、この力の計算をいかに効率よく計算するかが計算全体の性能に強く影響する。我々は古典分子動力学計算で広く用いられている Lennard-Jones ポテンシャルについて、Intel の x86 アーキテクチャの ISA である AVX2, AVX-512 を用いた SIMD 化の検討を行った。その結果、データ構造を問わず SIMD 化は行えること、しかし、Array of Structure と呼ばれるデータ構造を採用した方が高い性能が得られることを見出した[3]。特に、3次元系において、パディングを入れて4成分、さらに運動量も含めた原子あたり8成分とするデータ構造を採用すると、データ転送、およびキャッシュラインの効率から有利であることがわかった。さらに、同じ命令セットを実装している CPU であっても、XeonPhi では AVX-512 を利用したほうが高速であったのに対し、Xeon(SkyLake)では AVX2 を利用したほうが高速であることがわかった。本研究により、どのような実装が高速であるかは CPU ごとに異なることが明らかとなり、プログラマの負担はますます大きくなっていることがわかった。今後は中間言語を採用するなど、なんらかの対応が必要になると予想される。

(4) 任意の確率で独立にビットが立っているビット列の高速生成

近年のコンピュータは多階層化しており、それぞれ異なる並列化パラダイムが要求される。スーパーコンピュータやクラスタ等ではマルチノード計算を行うためにプロセス並列が必要となり、CPU 内でもマルチコア化されているため、スレッド並列が必要になる。さらに、SIMD レジスタを使うためにはデータ並列が必要となる。そんな中、「究極の並列化」はビット演算である。ビット演算は、ビットごとに独立な計算を実行するため、たとえば64ビットレジスタであれば64個の計算を同時に実行することができる。今後、レジスタのビット数が増えることが予想されており、ビット演算による計算の加速の重要性も増すことが期待される。そこで我々はビット演算を利用した「各ビットが任意の確率で独立に1」となるビット列を高速に生成するアルゴリズムを考案、実装した(図1)。単純に実装する場合は、32ビットであれば32回の乱数生成が必要となるが、有限桁近似法と、立つビット数が少ない場合に効果的なアルゴリズムを組み合わせることで、高々7回までの乱数生成で、任意の確率のビット列を再現できることを示した。このランダムビット列生成アルゴリズムを、Directed Percolation のマルチスピンコーディング実装に応用し、スカラー実装に対して最大14倍の高速化に成功した(図2)[4]。

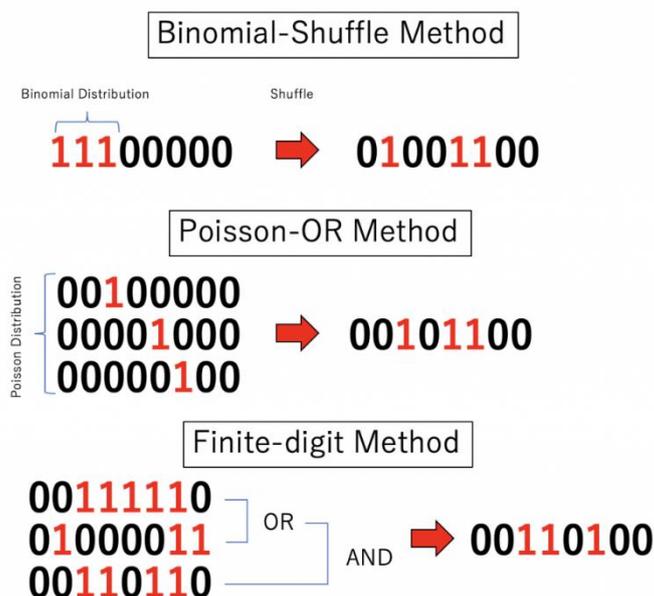


図 1: ランダムビット列の生成方法

Binomial-Shuffle 法: 二項分布で立てるビット数を決めてから、立てる位置を後で決める(シャッフルする)。

Poisson-OR 法: 1ビットだけランダムな位置に1を持つビット列を、ポアソン分布により決めた数だけ論理和(OR)を取ることで目的のビット列を生成する。

有限桁法: 確率が二進法で有限桁数で表現できる場合、その桁数の数だけ乱数生成を行うことでビット列を生成できる。

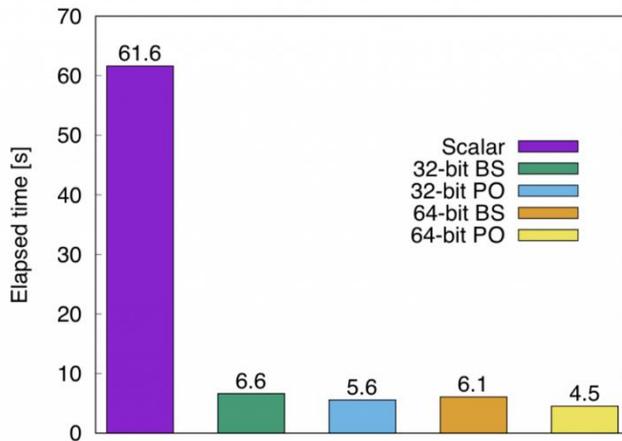


図 2: Directed-Percolation のマルチスピンコーディング実装。臨界点上での時間発展にかかった時間。スカラー実装 (Scalar)、有限桁法+Binomial-Shuffle (BS) 法による、有限桁法+Poisson-OR (PO) 法による補正それぞれについて、32 ビット、64 ビットの場合を表示。最大で 14 倍の高速化に成功している。

参考文献

- [1] Polymer effects on Karman Vortex: Molecular Dynamics Study, Yuta Asano, Hiroshi Watanabe, Hiroshi Noguchi, J. Chem. Phys., 148, 144901 (2018).
- [2] Effects of cavitation on Karman vortex behind circular-cylinder arrays: A molecular dynamics study, Yuta Asano, Hiroshi Watanabe, Hiroshi Noguchi, J. Chem. Phys., 152, 14657 (2020).
- [3] Fast algorithm for generating random bit strings and multispin coding for directed percolation, Hiroshi Watanabe, Satoshi Morita, Syngae Todo, Naoki Kawashima, J. Phys. Soc. Jpn., 88, 10244 (2019).
- [4] SIMD Vectorization for the Lennard-Jones Potential with AVX2 and AVX-512 instructions, Hiroshi Watanabe and Koh M. Nakagawa, Comput. Phys. Commun., 237, 1–7 (2019).

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計8件（うち査読付論文 8件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Asano Yuta, Watanabe Hiroshi, Noguchi Hiroshi	4. 巻 152
2. 論文標題 Effects of cavitation on Karman vortex behind circular-cylinder arrays: A molecular dynamics study	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 034501 ~ 034501
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5138212	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Asano Yuta, Watanabe Hiroshi, Noguchi Hiroshi	4. 巻 88
2. 論文標題 Finite-Size Effects on Karman Vortex in Molecular Dynamics Simulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 075003 ~ 075003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.075003	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Hiroshi Watanabe	4. 巻 149
2. 論文標題 Stability of velocity-Verlet- and Liouville-operator-derived algorithms to integrate non-Hamiltonian systems	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 154101
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5030034	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Hiroshi Watanabe and Koh M. Nakagawa	4. 巻 237
2. 論文標題 SIMD Vectorization for the Lennard-Jones Potential with AVX2 and AVX-512 instructions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Computer Physics Communications	6. 最初と最後の頁 1--7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2018.10.028	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroshi Watanabe, Satoshi Morita, Synge Todo, Naoki Kawashima	4. 巻 88
2. 論文標題 Fast algorithm for generating random bit strings and multispin coding for directed percolation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 24004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.88.024004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Watanabe Hiroshi	4. 巻 86
2. 論文標題 Failure of Deterministic and Stochastic Thermostats to Control Temperature of Molecular Systems	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	6. 最初と最後の頁 075004 ~ 075004
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJ.86.075004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Asano Yuta, Watanabe Hiroshi, Noguchi Hiroshi	4. 巻 148
2. 論文標題 Polymer effects on Karman vortex: Molecular dynamics study	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 144901 ~ 144901
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5024010	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hiroshi Watanabe, Hajime Inaoka, and Nobuyasu Ito	4. 巻 145
2. 論文標題 Ripening Kinetics of Bubbles: A Molecular Dynamics Study	5. 発行年 2016年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 124707
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.4963160	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計19件（うち招待講演 4件 / うち国際学会 3件）

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 非ハミルトン系における数値積分法とシンプレクティック性
3. 学会等名 日本物理学会第73回年次大会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 AVX2/AVX-512を用いたLennard-Jones系ポテンシャルの力計算のSIMD化
3. 学会等名 x86/x64最適化勉強会8
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 短距離古典分子動力学法のSIMD化について
3. 学会等名 第1回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開ワークショップ
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 スパコンでできること、できないこと
3. 学会等名 武蔵野大学数理工学シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 スパコンでできること、できないこと
3. 学会等名 柏キャンパス一般公開特別講演会（招待講演）
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 離散ウェーブレット変換を用いた分子動力学法データの圧縮
3. 学会等名 日本物理学会2017年秋季大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 AVX命令を用いたLennard-Jonesポテンシャルの力計算のSIMD化
3. 学会等名 日本物理学会第72回年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 浅野優太、渡辺宙志、野口博司
2. 発表標題 分子動力学法を用いた希薄高分子溶液の流れ解析
3. 学会等名 日本物理学会第72回年次大会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 非一様系における温度制御
3. 学会等名 日本物理学会2016年秋季大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 渡辺宙志、野口博司
2. 発表標題 超並列分子動力学シミュレーションによる複雑流体の解析
3. 学会等名 ポスト「京」萌芽的課題キックオフミーティング
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 Hiroshi Watanabe
2. 発表標題 Temperature control of an inhomogeneous system with a thermostat
3. 学会等名 International Workshop on Complex Phenomena from Molecule to Society (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 気泡生成過程におけるKinetic equationの直接測定
3. 学会等名 日本物理学会第71回年次大会
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 多重気泡生成過程における気泡間相互作用の数値的解析
3. 学会等名 日本学会議公開シンポジウム「物性物理学・一般物理学分野の展開と大型研究計画」
4. 発表年 2016年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 短距離古典分子動力学法の「京」に向けた最適化
3. 学会等名 平成27年度「京」における高速化ワークショップ（招待講演）
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 多重気泡生成過程における気泡間相互作用の数値的解析
3. 学会等名 第6回CMSI研究会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Hiroshi Watanabe, Satoshi Morita, Hajime Inaoka, Haruhiko Matsuo, Synge Todo, and Nobuyasu Ito
2. 発表標題 Scalable and Highly SIMD-vectorized Molecular Dynamics Simulation Involving Multiple Bubble Nuclei
3. 学会等名 SC15（国際学会）
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 Hiroshi Watanabe
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation of Ostwald ripening in multiple-bubble nucleation
3. 学会等名 The CASSIA 3rd workshop - International workshop on complex phenomena from molecule to society (国際学会)
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 一般化Langevin方程式における温度とH定理
3. 学会等名 日本物理学会2015年秋季大会
4. 発表年 2015年

1. 発表者名 渡辺宙志
2. 発表標題 多重気泡生成過程のベタスケール分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 ソフトダイナミクス研究会
4. 発表年 2015年

〔図書〕 計1件

1. 著者名 下司雅章 編/片桐孝洋, 中田真秀, 渡辺宙志, 山本有作, 吉井範行, Jaewoon Jung, 杉田有治, 石村和也, 大石進一, 関根晃太, 森倉悠介, 黒田久泰 著	4. 発行年 2017年
2. 出版社 大阪大学出版会	5. 総ページ数 300
3. 書名 計算科学のためのHPC技術1	

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----