

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 5 月 26 日現在

機関番号：17102

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2011～2013

課題番号：23540454

研究課題名(和文)身近な非線形現象に対するマルチスケールの手法の確立と応用

研究課題名(英文) Establishment of Multiscale Analysis for Daily Nonlinear Phenomena and its Application

研究代表者

高見 利也 (Takami, Toshiya)

九州大学・情報基盤研究開発センター・准教授

研究者番号：10270472

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,800,000円、(間接経費) 1,140,000円

研究成果の概要(和文)：期間全体を通して、身近に見られる非線形現象の実験的な解析と、計算機シミュレーションによる再現、および、メカニズムの解明を実施した。特に、ミルク表面のコーヒーフラクタルパターン形成の現象に関しては、その初期過程がビスカスフィンガリングであるという明確な解析結果を得ることが出来た。本研究では、観察される現象を出来るだけそのまま解析することを目指したため、通常とは異なるマルチスケールのアプローチの開発が必要となった。この領域では、時間方向マルチスケール解析の有効性を明らかにし、今後の研究へとつなげる成果を得た。

研究成果の概要(英文)：We have experimentally studied daily nonlinear phenomena over the whole period of this research in order to simulate those phenomena on computer and to clarify the mechanism. In particular, we have found that the initial pattern formation of coffee fractals on milk is explained by viscous fingering. Since we have tried to analyze those phenomena 'as is', it is required to develop multiscale approach. In the field of the multiscale analysis, we showed efficiency of the multiscale method for time-direction, which leads to the next study on the multiscale analysis of nonlinear phenomena.

研究分野：物理学

科研費の分科・細目：数理物理・物性基礎

キーワード：非平衡・非線形物理学 マルチスケール解析

## 1. 研究開始当初の背景

日常生活中に見られる複雑な物理現象をそのままの形で解析するためには、高精度実験の対象として慎重に準備された「純粋な」現象にはない、様々なスケールの動力学過程の相互作用を考慮することが重要になる。これらをスケールに応じて分離し、部分系毎に解析する従来の物理学的研究手法では、単一スケール内の問題に対しては精密な成果をあげることが可能だが、スケール間の相互作用という問題に対しては、数学的に記述できる部分の解析にとどまっている。マルチスケール現象の本質的な部分を明らかにするために、そして、従来型の微分方程式による記述で不十分な部分を補うために、計算機シミュレーションを利用した新たな手法の開発が必要である。

近年、異種 multi-scale モデリング (E. Weinan and B. Engquist, "The heterogeneous multi-scale methods," *Comm. Math. Sci.* 1, 87-133 (2003)), Equation Free アプローチ (I. G. Kevrekidis, et al., "Equation-Free, Coarse-Grained Multi-scale Computation: Enabling Microscopic Simulators to Perform System-Level Analysis," *Comm. Math. Sci.* 1, 87-133 (2003)) など、スケール分離した対象間を結合して研究する手法が提案されて来っており、これらの方法を効果的に適用して、非線形現象の解析に利用するための方策が待たれる。

## 2. 研究の目的

身近に見られる日常的な現象を対象として、シミュレーションを効果的に活用した研究手法を確立し、非線形現象の解析に応用することが目的である。具体的には (a) 「液滴分裂現象」、(b) 「樹状フラクタル形成」、及び、(c) 「コーヒードロップレット」という、日常で見られる一見「おもしろい」現象を、「物理学的観点からも」興味深い現象であることを明らかにするとともに、このような非線形現象を数値解析する新しい手法の構築を通して、マルチスケール現象の理解を深めることを目指す。

本研究の特色となる点をあげておく。精密実験が可能なマルチスケール現象が研究対象として望まれるが、往々にして現象のマルチスケール性を取り除くことで精密解析が可能になっている場合があることに注意が必要である。本研究では、あえて「日常」の現象を観測・測定することで、マルチスケール性に起因する物理現象をそのままの形で扱うこと、また、そのために計算機シミュレーションを有効に利用することが特色である。

## 3. 研究の方法

本研究では、(a)液滴の分裂、(b)樹状フラクタル、(c)コーヒードロップレットという現象を対象として、実験的手法とシミュレ-

シヨンの手法の結果を比較しつつ、マルチスケールの視点から考察する。このうち、実験的研究は研究分担者の下川が担当する。研究代表者(高見)と分担者(小林)が所属する九州大学においては、既存の設備を利用してシミュレーションによる研究を実施する。研究分担者の藤崎は、九州大学で実施するシミュレーション手法を、マルチスケールという観点から評価・検討する。これらのシミュレーションを実施する際に、これまでに提案されて来ている複数の手法を利用して比較するため、オープンソースで開発されている OpenFOAM を利用する。

研究実施方法として、対象とする現象について概要を述べ、それぞれに関して明らかにすべき点を列挙する。

### (1) 液滴分裂現象の解析

流体中を重力に従い滴が運動する時、複数回連続してバイナリ分裂する現象が見られる。この現象は計算機シミュレーションでも再現されているが、ここでは、実験結果との定量的な比較を実施した上で、界面の集団的運動と流体の運動とのマルチスケール性に注目して解析を行う。

### (2) 樹状フラクタル形成の動力学

レイリー・テラー不安定性に起因して生ずる表面パターンが、樹状フラクタルへと成長する現象である。現状では、パターンを再現することに成功していないため、垂直方向の対流運動による中心方向への引き延ばしという動力的な効果を取り入れてシミュレーションと実験の比較を進める。

### (3) コーヒードロップレットの生成と運動

一般に界面活性作用のある分子を含む液滴を適当な高さから落下させると、一旦水面下に沈みこんだ後、ミルク冠のような形で跳ね上がり、孤立した液滴が水面上に生成される。この液滴の内部運動や、界面付近のミクロの構造、生成条件などを明らかにするためのシミュレーション手法を考察する。

これら物理現象を研究対象として扱うが、一般に非線形現象の研究では、実験的研究と同様計算機によるシミュレーションも重要になる。そこで、数値計算手法として、マルチスケール解析を応用した方法を検討し、計算のアルゴリズムまで含めて研究する。

## 4. 研究成果

本研究課題では、上記研究の方法で列挙した身近に見られる現象を対象としているが、これらの研究成果について、物理学的な成果と、マルチスケール数値計算手法に関する成果とに分けて報告する。

### (1) 身近な非線形現象の物理学的な成果

液滴の分裂の動力学については、実験的な測定により、分裂前後の液滴の沈降速度変化、分裂モードの分布などについてのデータを取得し解析を行った。この現象は、インクを液体中に落とした時などにも見られるため

古くから知られた現象であり、二成分流体、あるいは、渦運動の興味深さを示すために使われることが多い。これは重力によって駆動される渦輪の動力学としてとらえられるが、渦輪の分裂過程まで含めた理論的に厳密な扱いは困難なため、実験的な測定と、数值的

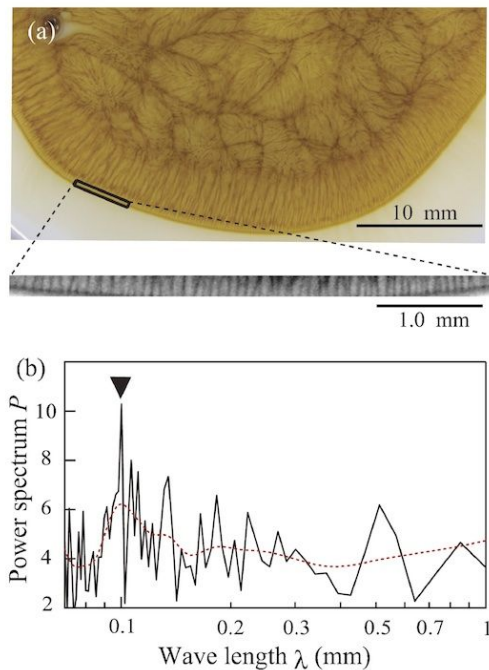


図 1 表面パターンの周期構造

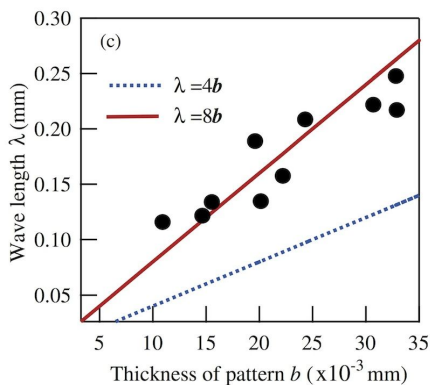


図 2 波長と厚みの関係

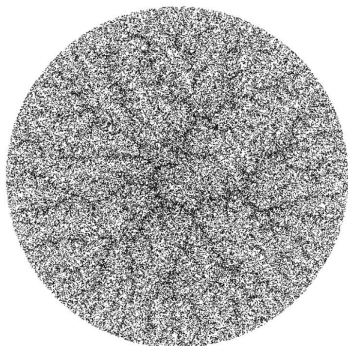


図 3 逆 DLA モデルによるパターン

なシミュレーションによる再現の段階にとどまっている。本研究において様々な条件下の実験を行った結果、分裂段階で現れるモード(分裂数)に、最初の液滴のサイズへの依存性があることが明らかになった。この結果をもとにして、渦輪の不安定性の問題との関連を考慮した理論的な解析へとつなげていきたいところである。

コーヒー表面のパターンに関しては、境界面上の二次元流体の運動と、高さ方向の対流などの大きな運動が結合して、複雑な現象として現れていることが明らかとなった。まず、樹状フラクタルになる場合と、それ以外のパターンになる場合が観察されるが、容器の形状(高さと半径のアスペクト比)をパラメータとしてどちらのパターンになるかを観察したところ、明確な相図が得られた。これにより、下部の流体による比較的スケールの大きなゆっくりとした運動が、表面のパターン形成の定性的な違いに影響を与えていることが明らかになった。

樹状フラクタルの形成のメカニズムに関して、得られたパターンの周期性(図 1)に注目して解析した結果、少なくとも形成の初期過程では、ビスカスフィンガリングの機構が重要な役割を果たしていることが明らかになった。ここでは、パターンの初期過程で円周上に現れるスティック状のパターンに注目し、この周期の幅と円形に広がった表面流体の厚みとの関係を明らかにした(図 2)。これにより、古くから知られている二次元の流体で得られるビスカスフィンガリングの機構と全く同様であることがわかった。この結果は、2014 年に論文として公開した。

さらに、樹状フラクタル形成の初期段階が、ビスカスフィンガリングであることを受けて、この機構がその後の形成にそのまま適用できると仮定した場合のパターンを求めるために、逆 DLA モデルを導入した。計算機実験によって、このモデルによる樹状パターンを求め(図 3)、このフラクタル次元を測定した。その結果、表面パターンで測定されるフラクタル次元( $D=1.9$  前後)に近い数値が得られた。

## (2) マルチスケール手法に関する成果

本研究では、有効なマルチスケール手法を開発するために、空間マルチスケール手法としてパスサンプリング手法、および、動的メッシュ法を検討し、時間マルチスケール手法として Parareal-in-Time 法による時間方向並列計算を検討した。この内、時間発展計算を高速化するための時間並列化法について、計算機上での効率実装を考慮した新しい手法を考案し、その性能や適用範囲に関して、検討を加えた。これらの結果に関しては、ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、および、計算機関連の国際会議にて発表した。

さらに、この手法の元となった Parareal-

in-Time 法を、時間スケールを複数含む物理系のシミュレーションへと応用するための検討を行った。空間スケールの異なる手法を組み合わせたマルチスケール計算は広く行われているが、時間に関するマルチスケール系を有効に扱う手法がこれまでになかったため、一般に高精度なマルチスケール計算を実施することが難しかった。本研究で検討した手法をさらに発展させることにより、高精度で高速なマルチスケールシミュレーション手法を構築することにつながる成果であると考えられる。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 10 件)[すべて査読あり]

- (1) M. Shimokawa and S. Ohta, Annihilative fractals formed in Rayleigh-Taylor instability, *Fractals* 20, 97-104 (2012). DOI: 10.1142/S0218348X12500090
- (2) T. Takami and A. Nishida, Parareal Acceleration of Matrix Multiplication, *Adv. Par. Comp.* 22, 437-444 (2012). DOI: 10.3233/978-1-61499-041-3-437
- (3) M. Shimokawa, Experimental Study on Transition in Fractal Patterns Derived from Vertical Flow, *J. Phys. Soc. Jpn.* 81, 094003 (2012). DOI: 10.1143/JPSJ.81.094003
- (4) Y. Matsunaga, H. Fujisaki, T. Terada, T. Furuta, K. Moritsugu, and A. Kidera, Minimum Free Energy Path of Ligand-Induced Transition in Adenylate Kinase, *PLoS Comput. Biol.* 8, e1002555 (2012). DOI: 10.1371/journal.pcbi.1002555
- (5) M. Shiga and H. Fujisaki, A quantum generalization of intrinsic reaction coordinate using path integral centroid coordinate, *J. Chem. Phys.* 136, 184103 (2012). DOI: 10.1063/1.4709723
- (6) M. Shimokawa, H. Kitahata, T. Sakurai, Size distribution of cell pattern observed in gravitational instability, *Phys. Rev. E* 87, 012903 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevE.87.012903
- (7) H. Fujisaki, M. Shiga, K. Moritsugu, and A. Kidera, Multiscale enhanced path sampling based on the Onsager-Machlup action: Application to a model polymer, *J. Chem. Phys.* 139, 054117 (2013). DOI: 10.1063/1.4817209
- (8) M. Shimokawa and T. Takami, Wavelength analysis of interface between two miscible solutions observed in formation of fractal pattern, *J. Phys. Soc. Jpn.* 83, 044001 (2014). DOI: 10.7566/JPSJ.83.044001
- (9) T. Takami and D. Fukudome, An efficient pipelined implementation of space-time parallel applications, *Adv. Par. Comp.* 25, 273-281 (2014). DOI: 10.3233/978-1-61499-381-0-273
- (10) T. Takami and D. Fukudome, An identity parareal method for temporal parallel computations, *LNCS 8384*, 67-75 (2014). DOI: 10.1007/978-3-642-55224-3\_7

[学会発表](計 25 件)

- (1) T. Takami, M. Shimokawa, H. Fujisaki, and T. Kobayashi, Coffee patterns generated by slow dynamics, 31<sup>st</sup> DDEU, 2011 年 9 月, Oldenburg, Germany [Poster]
- (2) 高見利也, 時空間のマルチスケール離散化法と物理現象, 第 2 回計算統計物理学研究会, 2011 年 9 月 金沢大 [招待講演]
- (3) 高見利也, 下川倫子, 藤崎弘土, 小林泰三, 遅いダイナミクスにより生成される表面パターン, 日本物理学会 2011 年秋の分科会, 2011 年 9 月, 富山大学 [Poster]
- (4) 藤崎弘土, 菊池浩人, 戸田幹人, 高見利也, 分子階層モデルを使った生体分子の量子ダイナミクス, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 2011 年 9 月, 富山大学
- (5) 高見利也, 西田晃, 時間方向並列化の線形計算への適用可能性, 情報処理学会第 131 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, HPC-131-6, 2011 年 10 月, 京都大学
- (6) 下川倫子, レイリーテラー不安定性条件下で形成される表面パターン, 地形のダイナミクスとパターンとその境界領域, 2011 年 11 月, 九州大学
- (7) M. Shimokawa, Surface pattern formed in Rayleigh-Taylor instability, International Symposium on Complex Systems, Dec. 2011, Tokyo [Poster]
- (8) 大隈強志, 高見利也, 松野哲也, 青柳睦, 分子動力学計算の時間方向並列化と通信パターン, ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 2012 年 1 月, 名古屋大 [Poster]
- (9) 高見利也, 時間方向並列計算とマルチスケール離散化法, 研究集会「非線形現象の解析・モデル化・制御」, 2012 年 3 月, 鹿児島大
- (10) 下川倫子, 高見利也, 藤崎弘土, 小林泰三, 粘性流体中を落下する滴の分離と変形, 第 67 回日本物理学会年次大会, 2012 年 3 月, 関西学院大学 [Poster]
- (11) 藤崎弘土, 菊池浩人, 戸田幹人, 高見利也, 分子階層モデルを使った生体分子の量子ダイナミクス II, 第 67 回日本物理学会年次大会, 2012 年 2 月, 関西

学院大学

- (12) T. Takami, M. Shimokawa, H. Fujisaki, and T. Kobayashi, Particle simulations to create coffee patterns on milk, 7<sup>th</sup> DDAP, 2012年8月, 台北, 台湾 [Poster]
- (13) M. Shimokawa, Size distribution of cell pattern formed in experiment of gravitational instability, 32<sup>nd</sup> DDEU, 2012年9月, Gothenburg, Sweden [Poster]
- (14) 高見利也, 下川倫子, 藤崎弘士, 小林泰三, ミルク上のコーヒーパターン形成の粒子シミュレーション, 日本物理学会2012年秋の分科会, 2011年9月, 横浜国立大 [Poster]
- (15) 高見利也, 下川倫子, 藤崎弘士, 小林泰三, コーヒーフラクタルのDLA的モデルによる再現と解析, 第68回日本物理学会年次大会, 2013年3月, 広島大学 [Poster]
- (16) T. Takami and H. Fujisaki, Optimal control of nonlinear dynamics: quantum classical correspondence, 33<sup>rd</sup> DDEU, 2013年6月, Madrid, Spain
- (17) T. Takami, M. Shimokawa, H. Fujisaki, and T. Kobayashi, Random aggregation models and simulations for coffee fractals on milk, STATPHYS25, 2013年7月, Seoul, Korea [Poster]
- (18) M. Shimokawa and T. Takami, Transition between fractal and cell patterns derived from vertical convection, STATPHYS25, 2013年7月, Seoul, Korea [Poster]
- (19) 高見利也, 下川倫子, 逆DLA過程により形成されるパターンのフラクタル次元の変化, 日本物理学会2013年秋季大会, 2013年9月, 徳島大学 [Poster]
- (20) 下川倫子, 高見利也, 重力不安定性による表面パターンの粘度依存性, 日本物理学会2013年秋季大会, 2013年9月, 徳島大学 [Poster]
- (21) T. Takami, Identity parareal for time evolution problems, 4<sup>th</sup> AICS Symposium, 2013年12月, Kobe [Poster]
- (22) 高見利也, 福留大貴, 新しい時間並列化法 iParareal とマルチスケール解析, HPCS2014, 2014年1月, 一橋講堂, 東京 [Poster]
- (23) 高見利也, Parareal 法の応用とマルチスケール解析, 環瀬戸内応用数理研究部会 第17回シンポジウム, 2014年1月, 愛媛大学
- (24) 高見利也, 福留大貴, 恒等変換による時間並列化法 Identity Parareal の性能とパケットリレー通信, 情報処理学会第143回ハイパフォーマンスコンピューティング研究会, 2014年3月, 七尾市, 石川県

- (25) 高見利也, 下川倫子, 藤崎弘士, 小林泰三, 身近な非線形現象からマルチスケール解析へ, 日本物理学会 第69回年次大会, 2014年3月, 東海大学, 神奈川県 [Poster]

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕  
出願状況(計0件)  
取得状況(計0件)

〔その他〕  
ホームページ「身近な非線形現象からマルチスケールへ」  
<http://dogra.cc.kyushu-u.ac.jp/tkm/study/multiscale>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

高見 利也 (TAKAMI, Toshiya)  
九州大学・情報基盤研究開発センター・准教授  
研究者番号: 10270472

### (2) 研究分担者

藤崎 弘士 (FUJISAKI, Hiroshi)  
日本医科大学・医学部・准教授  
研究者番号: 60573243

下川 倫子 (SHIMOKAWA, Michiko)  
福岡工業大学・工学部・助教  
研究者番号: 80554419

小林 泰三 (TAIZO, Kobayashi)  
九州大学・情報基盤研究開発センター・学術研究員  
研究者番号: 20467880  
(平成25年度より連携研究者)

### (3) 連携研究者

戸田 幹人 (TODA, Mikito)  
奈良女子大学・理学部・准教授  
研究者番号: 70197896

高橋 公也 (TAKAHASHI, Kin'ya)  
九州工業大学・情報工学研究院・教授  
研究者番号: 70188001