

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 5 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2014

課題番号：23740287

研究課題名(和文)相転移を伴う非平衡輸送現象の理論的、数値的研究

研究課題名(英文) Numerical study on nonequilibrium phenomena involving phase transitions

研究代表者

渡辺 宙志 (Watanabe, Hiroshi)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号：50377777

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：液体を急減圧すると多数の気泡が出現し、その後、大きい気泡がより大きく、小さい気泡がより小さくなるOstwald成長という現象が起きる。この現象は発電所や冷却システムにおいて重要な役割を果たすが、その詳細は未解明であった。そこで我々は京コンピュータ上で数億粒子規模の大規模動力学計算を行い、急減圧された液体に発生する気泡のダイナミクスを解析した。急減圧直後は系の非一心性が原因で古典論では記述できないが、その後古典論で記述できるスケーリング領域があること、スケーリング指数が温度に依存し、それはミクロなダイナミクスから説明できることを見出した。

研究成果の概要(英文)：We have studied Ostwald ripening of bubbles by molecular dynamics simulations involving billions of particles. The scaling exponents were estimated from the bubble-size distribution function and the values of them were successfully described by the classical theory of Ostwald ripening, the Lifshitz-Slyozov-Wagner (LSW) theory. This is the first direct confirmation of LSW theory in bubble nuclei. As temperature increases, the crossover of the scaling exponent is observed. This crossover implies that the growth of bubbles changes from interface-limited to diffusion-limited. We also observed the growth rate of the bubbles (the kinetic term) directly for the first time. While the kinetic term is well described by the theory in the scaling region, it has broad distribution in early stage. This behavior shows that the inhomogeneity of the pressure in the system and the inhomogeneity is the reason why the classical theory fails to describe the early stage of the bubble nucleation.

研究分野：計算物性物理

キーワード：気泡生成 分子動力学法 Ostwald成長 キャピテーション

1. 研究開始当初の背景

(1) 発電所のタービンや、船舶のスクリューなどにおいて気泡生成現象は重要な役割を果たすが、強い非平衡現象であること、相転移を含む移動境界問題であることから扱いが難しかった。特にマイクロな相互作用の結果生じる相転移現象とマクロに現れる流動現象が、スケールが大きく異なりつつもお互いに影響を与えあうことが理論的、数値的な研究を難しくしており、マクロな現象を扱う際には、マイクロな相転移や気泡間相互作用などは経験的な支配方程式を与えるほかなく、その妥当性に疑問があった。

(2) 気泡生成現象を代表とする相転移を伴う非平衡現象は、分子レベルから扱えばマイクロな現象についても非経験的な扱いが可能となるが、その代償として大きな計算能力を要求する。気泡生成現象の全粒子計算は以前より行われていたが、計算能力の問題から、系に生じる気泡が数個程度に限られており、マクロな気泡間相互作用を解像するには至らなかった。また、本研究開始当初、次世代スパコンとして開発がはじまっていた「京」コンピュータを筆頭に、数万コアを超える超並列計算機が次々と登場し、その計算能力を十分に発揮できるアプリケーションを求められていた。

2. 研究の目的

(1) 系を構成する全ての粒子の運動を分子動力学法により追跡する全粒子計算により、マクロな気泡間相互作用をマイクロな粒子間相互作用から直接再現する。特に、個別の気泡ではなく、気泡の分布関数、及び気泡の成長率関数(kinetic term)を調べることで、Ostwald 成長を記述する古典論による予言と直接比較、検討する。

(2) 統計情報を得るのに十分な数の気泡を得るためには数億粒子規模の計算が必要と見込まれるため、それに耐える実用的な大規模並列分子動力学計算コードを開発する。ペタスケールの計算資源を使い切る計算を行うことで、来るエクサスケールにおける計算科学のあり方を検討する。また、大規模計算に伴って発生する大規模なデータ出力を抑えるため、効率的なデータ圧縮、解析の方法を検討する。

3. 研究の方法

(1) 系を構成する全ての粒子の運動を分子動力学法により追跡する全粒子計算により、マクロな気液混相流をマイクロな相互作用から直接再現する。特に、個別の気泡ではなく、気泡の分布関数、及び気泡の成長率関数(kinetic term)を調べることで、Ostwald 成長を記述する古典論による予言と直接比較、検討する。

(2) 数万~数十万プロセス並列規模において実用的な速度を持つ OpenMP/MPI ハイブリッド並列分子動力学コードを開発する。

4. 研究成果

(1) 非平衡研究を行うためには精密な平衡状態相図が必要となることから、三次元 Lennard-Jones 粒子系の気液臨界点における普遍性について調べた。分子動力学計算により気液共存状態を再現し、気液共存密度を温度の関数として求めることで気液共存線を決定した。直線径則を援用することで Binder 比から臨界点を決定し、気液共存線から磁化の臨界指数を、界面張力から相関長の臨界指数をそれぞれ求めたところ、磁化の臨界指数は三次元イジング普遍性と同一値を示したが、相関長の臨界指数は有意にずれた。しかし、界面張力を復元力とした界面張力波の影響により界面表面は揺らぎ、実効的な面積が増えるため、界面が完全に平坦だとすると界面張力を過小評価する。さらに、この実効的な面積の増え方も温度依存するため、ストレステンソルから求めた界面張力の温度依存性は正しくないことがわかった。そこで、界面揺らぎの大きさの有限サイズ効果を調べる事で真の界面張力の値を推定し、その温度依存性から相関長の臨界指数を調べたところ、三次元イジング普遍性の値と誤差の範囲で一致した。これは、相関長の臨界指数を調べる為には、界面張力波の影響を正しく考慮する必要があることを示している。

(2) 超並列分子動力学法コードを開発、公開した。最終的に京コンピュータのフルノード、(82944 ノード、663552 コア)を用いてベンチ

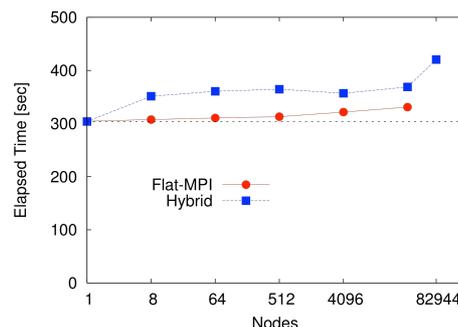


図 1: ノード数と並列化効率。ノードあたり 40 万粒子。1000 ステップ計算するのに要した時間。

マークで 3000 億粒子を超えた計算でも実用的な速度がでるコードの開発に成功した(図 1)。また、高並列化時に問題となるシステムノイズの影響について調べ、1000 プロセスを超えるような並列計算においては、Hyperthreading Technology の有無により並

列化効率が大きく変わるなどを見出した。さらに、flat-MPI の場合と MPI/OpenMP のハイブリッド計算の効率を比較し、短距離古典分子動力学法の場合では flat-MPI の方が高速であるが、メモリ消費が激しいため、数万ノードを超える計算ではハイブリッド方式を採用せざるを得ないことなどがわかった。得られた知見は大阪大学の講義「計算科学技術特論 A」で紹介するなど、高速化、並列化の技術普及に努めた。

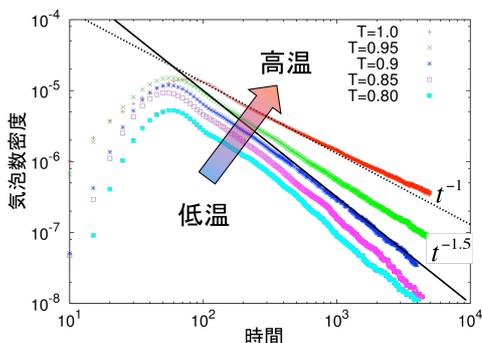


図 2: 気泡数の時間発展の温度依存性。低温では時間の $-3/2$ 乗、高温では -1 乗で減衰し、それぞれ界面律速、拡散律速に対応する。

(3) 急減圧液体における気泡分布関数の Ostwald 成長について調べた。これは「平成 25 年度 HPCI システム利用研究課題追加募集『京』一般利用枠」に採択されたもので、急減圧直後に多数気泡が生成した後、気泡間相互作用により大きな気泡はより大きく、小さな気泡はより小さくなる Ostwald 的成长を観測した。計算には京の 4096 ノードを用いて、最大で 7 億 3 千万粒子程度の計算を行う事で、気泡数密度分布関数を精度よく測定することに成功した。得られた分布関数の時間発展を Ostwald 成長の古典論により解析し、分布関数がスケールリングされるスケールリング領域が存在すること、そのスケールリング指数が、ダイナミクスのボトルネックが界面成長にあるか拡散過程にあるかによって変化することを確認した(図 2)。この、気泡生成の時間発展の後期過程が Ostwald 成長の古典論によりよく記述されるという事実は、古典論において仮定されている平均場的な描像や、力学平衡の仮定などが妥当であるということを示唆する。物理的な解析と合わせ、計算結果の出力フォーマットについても検討を行った。計算規模が大きくなるにつれ、出力データも莫大なものとなるが、莫大なデータの保存は難しく、さらに解析も困難となる。そこで、解析結果を重要な情報を失わずに、効率的に圧縮して出力するフォーマットを考案し、実装することで、計算後の解析を容易にした。得られたデータの効果的な可視化手法の検討も行った。

なお、本研究の内容は米国物理学協会 (American Institute of Physics, AIP) よりプレスリリースされ、理化学研究所の「『京』の成果 ピックアップ」に取り上げられるなどの反響があった。

(4) 京コンピュータを用いて得られた計算データを解析することで、気泡生成における気泡体積変化率の計算に成功した。Ostwald 成長において、どのくらいの体積を持つ気泡がどれだけ変化するかを記述する気泡体積変化率 (Kinetic Term) は中心的な役割を果たすが、1 次までの近似の範囲内では気泡分布関数から直接求めることができない。そこで、気泡体積変化率の定義に立ち返り、系内に存在する気泡の体積変化を全て追跡することで、気泡体積変化率関数を直接推定することに成功した。これにより、Kinetic Term が古典論による予測と良い一致を示すこと、ダイナミクスのボトルネックの違いも反映していることを確認し、さらに古典論から予測される関数形をフィッティングすることで、それぞれの時刻における臨界核サイズを極めて高精度に求めることに成功した。気泡生成系における Kinetic Term の直接推定は初めてであり、より精密な議論が可能となった。さらに「京」フルノードを用いた 137 億粒子計算により、多重気泡生成の初期ステージにおける系の圧力が非一様であることの直接的な証拠を捉えることにも成功した。古典核生成論が、液滴生成率に比べて気泡生成率の予言に大きく失敗する原因は長らく未解決であったが、急減圧直後から気泡生成の初期過程における圧力の非一様が原因の一つであることが強く示唆された。急減圧直後においては圧力が非一様であるが、その後気泡が成長し、Ostwald 成長をはじめると、系内の圧力がほぼ一様とみなせる領域になり、平均場の取り扱いが正当化される。これが古典核生成理論による気泡成長率の予言は失敗するが、同様な仮定を置く Ostwald 成長の古典論が気泡の Ostwald 成長を正しく記述できる理由であるとわかった。

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 9 件)

① Hiroshi Watanabe, Masaru Suzuki, Hajime Inaoka, and Nobuyasu Ito, Ostwald ripening in multiple-bubble nuclei, 査読有, J. Chem. Phys. **141** 234703 (2014)
DOI: 10.1063/1.4903811

② Hiroshi Watanabe, Masaru Suzuki, and Nobuyasu Ito, Huge-scale Molecular Dynamics Simulation of Multibubble Nuclei, 査読有, Comput. Phys. Commun. **184** 2775-2784 (2013)

DOI: 10.1016/j.cpc.2013.07.023

③ Tomoaki Nogawa, Nobuyasu Ito, and Hiroshi Watanabe, Usefulness of an equal-probability assumption for out-of-equilibrium states: a master equation approach, 査読有, Phys. Rev. E **86** 41133 (2012)

DOI: 10.1103/PhysRevE.86.041133

④ Hiroshi Watanabe, Nobuyasu Ito, and Chin-Kun Hu, Phase diagram and universality of the Lennard-Jones gas-liquid system, 査読有, J. Chem. Phys. **136** 204102 (2012)

DOI: 10.1063/1.4720089

⑤ T. Nogawa, N. Ito, and H. Watanabe, Evaporation-condensation transition of the two-dimensional Potts model in the microcanonical ensemble, 査読有, Phys. Rev. B **84** 061107 (2011)

DOI: 10.1103/PhysRevE.84.061107

⑥ H. Watanabe, M. Suzuki, and N. Ito, Efficient Implementations of Molecular Dynamics Simulations for Lennard-Jones Systems, 査読有, Prog. Theor. Phys. **126** 203-235 (2011)

DOI: 10.1143/PTP.126.203

[学会発表] (計 31 件)

① 渡辺宙志, 2014 年 11 月 14 日, 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, 物性研スパコン共同利用成果報告会, 東京大学物性研究所 (千葉県柏市)

② Hiroshi Watanabe, 2014 年 11 月 10 日, Huge-Scale Molecular Dynamics Simulation of Multi-bubble Nuclei, Nose Dynamics 30 Years (NOSE30), 慶応大学 (東京都港区)

③ 渡辺宙志, 2014 年 10 月 31 日, 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, 第 1 回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会, コクヨホール (東京都港区)

④ 渡辺宙志, 2014 年 9 月 7 日, 多重気泡生成過程における非平衡仕事, 日本物理学会 2014 年秋季大会, 中部大学春日井キャンパス (愛知県春日井市)

⑤ H. Watanabe, M. Suzuki, H. Inaoka, and N. Ito, 2014 年 5 月 15 日, Huge-Scale Molecular Dynamics Simulation of Multi-bubble Nuclei, NCSA Blue Waters Symposium for Petascale Science and Beyond, (Champaign-Urbana, アメリカ)

⑥ 渡辺宙志, 鈴木将, 稲岡創, 伊藤伸泰, 2014 年 3 月 27 日, 多重気泡生成過程における Ostwald スケーリング, 日本物理学会第 69 回年次大会, 東海大学 湘南キャンパス (神奈川県平塚市)

⑦ 渡辺宙志, 鈴木将, 伊藤伸泰, 2013 年 11 月 2 日, 多重気泡生成過程の大規模分子動力学計算, 日本機械学会 第 26 回計算力学講演会 (CMD2013), 佐賀大学 (佐賀県佐賀市)

⑧ 渡辺宙志, 鈴木将, 伊藤伸泰, 2013 年 3 月 29 日, ペタスケールコンピュータにおける分子動力学法の可能性, 日本物理学会第 68 回年次大会, 広島大学 (広島県広島市)

⑨ H. Watanabe, M. Suzuki, and N. Ito, 2012 年 10 月 20 日, Huge-Scale Molecular Dynamics Simulation of Cavitation Process, The 3rd Workshop on Computational and Statistical Physics (CSP3), 京都リサーチパーク (京都府京都市)

[その他]

ホームページ等

AIP によるプレスリリース

<http://www.aip.org/publishing/journal-highlights/how-physics-champagne-and-soda-bubbles-may-help-address-worlds-future>

CMSI ニュース

<http://www.cms-initiative.jp/ja/news/in-cwr>

理研によるニュース

http://www.riken.jp/en/pr/topics/2015/20150108_1/

物性研ニュース

http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/n1004_detail.cgi?c=information_table::385

開発した分子動力学法コード

<http://mdacp.sourceforge.net/>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

渡辺 宙志 (WATANABE, Hiroshi)

東京大学・物性研究所・助教

研究者番号: 50377777