

# 「京」を用いた大規模分子動力学法による気泡間相互作用の解明

渡辺 宙志

この度、私がスーパーコンピュータ「京」を用いて得た「気泡生成過程におけるオストワルド成長の大規模分子動力学計算」という成果が、米国物理学協会 (American Institute of Physics, AIP) からプレスリリースされました。本稿ではこの研究と、プレスリリースの経緯について簡単に紹介させていただきたいと思います。

水を加熱すると沸騰して水蒸気になり、蒸気力でタービンを回すと発電することができます。熱源は様々ですが、現在私達が利用する電力の大部分はこの形で生み出されています。しかし、加熱された水のどこからどのように気泡が発生し、気泡がどのように相互作用し、流れにどのような影響を与えているのか、その詳細はほとんどわかっていません。このように、気相と液相がお互いに相転移しながら加熱されつつ流れていく系を気液混相流と呼び、工学応用上極めて重要な研究対象ですが、強い非平衡状態であること、ミクロな相転移からマクロな流動まで共存するマルチスケールな問題であることなどが解析を難しくしています。数値計算課題としては、相転移により相界面が生成消滅すること、熱伝導や摩擦など、界面を通じた物理量の輸送がほとんどわかっていないことなどの困難があります。

私はこの問題を、分子動力学法を用いた全粒子計算で解決すべく、日々研究に取り組んでいます。全粒子計算とは、系を構成する分子を全て陽に扱い、分子間相互作用のみを仮定し、あとは分子動力学法 (Molecular Dynamics Method, MD) で力任せに解く、という方法論です。全粒子計算を行えば、相界面は自発的に生成、消滅し、さらにこれまで経験的に与えるほかなかった界面における輸送についても考慮せずに済みます。ただし、支配方程式が単純になる代償として、そのマルチスケールな問題を分子レベルから解像するために大規模計算が必須となります。そこで我々は、超並列計算機向けの大規模 MD コードの開発を進めてきました。目標は「京」上での計算ですが、いきなり数万並列の計算を実行するのは難しいため、まず当時の物性研システム B (SGI Altix ICE 8400EX) にて並列化アルゴリズムのテストを、「京」互換のアーキテクチャであるシステム C (FUJITSU PRIMEHPC FX10) にてチューニングを行い、実行効率を向上させました。さらに東大情報基盤センターの FX10 全系、1PFlops の計算を行い、高い並列化効率と実行効率が出ることを確認し、「京」を使う準備は整いました。その後、「京」の一般利用枠に課題が採択され、いよいよ「京」でシミュレーションを行うことになりました。

気泡が生成しつつ流動する気液混相流の全粒子計算には一兆個以上の粒子が必要と見込まれており、これは「京」全系を使っても到達不可能です。そこで我々はその前段階として、多重気泡生成過程のシミュレーションを行うことにしました。炭酸飲料の栓を抜くと、まず多数の泡があらわれた後、大きな気泡がより大きく、小さな気泡がより小さくなる、オストワルド成長と呼ばれる現象が起きます。オストワルド成長は一次転移を引き起こす系で普遍的に見られる現象で、その理論は 1960 年代にほぼ完成されています。しかし、理論の検証は合金系や液滴生成では行われていましたが、気泡生成系で本当に成立しているかは確認されていませんでした。また、気泡生成と液滴生成は同じ相転移の裏表ですが、準安定領域からの核生成率を予言する古典核生成論が、液滴生成はよく説明できるのに対し、気泡生成率は理論値と実測値が桁でずれてしまうという問題があり、気泡系にオストワルド成長理論が適用可能かどうかは非自明なことでした。

そこで我々は液体を急減圧し、気泡を多数生成させる多重気泡

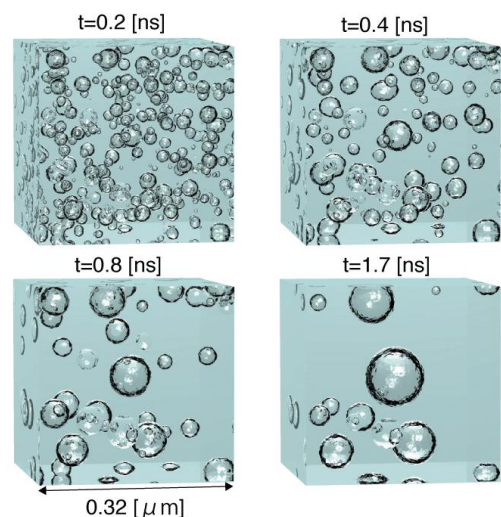


図 1: 急減圧直後の多重気泡生成からオストワルド成長。解析に用いた系は気泡が多すぎるため、小さい系を可視化している。可視化は理研の稲岡創氏に依る。

生成シミュレーションを行いました。計算には「京」の 4096 ノード(32768 プロセス)を 24 時間、それを条件を変えながら 10 本、合計で 100 万ノード時間が費やされました。用いた粒子は最大で 7 億 3 千万粒子であり、このような大規模計算を行うことで、初めて気泡分布関数を古典論と直接比較できるほど精密に測定することができました。この計算により、気泡分布関数が古典論の予想通りスケーリングできること、スケーリング指数が温度により二つの値をとること、その温度依存性はダイナミクスのボトルネックに依存していること、そして二つの指数の値もそれぞれ理論で予想された通りであること等がわかりました。古典核生成論が気泡生成で破綻することから、同様な仮定を多数共有するオストワルド成長の古典論も同様に破綻しているだろう、と予想していましたが、得られた観測結果がきれいに理論通りの振る舞いを見せたのは大きな驚きでした。後に、圧力の緩和スケールが気泡成長の時間スケールが分離しており、泡がほぼ一樣な圧力を感じることで平均場的な記述が正当化され得ることなどがわかって来ました。

さて、我々は得られた結果を論文にまとめ、AIP が出版する論文誌のひとつ、Journal of Chemical Physics に投稿し、掲載されることになりました。論文の掲載直前、AIP から雇われたというサイエンスライターから「あなたたちの研究が AIP プレスリリースに取り上げられることになったので、論文の解説をして欲しい」という依頼が届きました。何度かサイエンスライターとやりとりをして、「気泡成長におけるオストワルド成長の役割を探る(Exploring the Role of Ostwald Ripening in Bubble Formation)」というタイトルでプレスリリース文が確定したと思った頃、直前になって AIP メディアサービスのディレクターから「少し地味だったから、ちょっと盛ったよ(意識)」という連絡が来て、タイトルが変更されました。こうして我々の成果は「シャンパンの泡は世界のエネルギー危機を救う? (How the Physics of Champagne and Soda Bubbles May Help Address the World's Future Energy Needs)」というタイトルでプレスリリースされました。

公開が 12 月で、欧米では新年をシャンパンで祝う風習があったことも影響したのでしょう。このプレスリリースは海外で大きな反響がありました。すぐに、スミソニアン博物館のウェブニュースを始め、いくつかのニュースサイトからメールによる取材申し込みが来ました。この話題は Discovery Channel や、HPC Wire といった有名なサイトでも取り上げられ、それを参照したと思われるニュースサイトがさらにニュースを掲載し…と、多くのサイトに取り上げられました。アメリカだけでなく、スペインのニュースサイトからも取材があったり、インドの Yahoo にも掲載されたりしました。「エネルギー危機を救う?」というタイトルも「シャンパンの泡が世界のエネルギー危機を解決する」「シャンパンの泡が世界のエネルギー工学を改革する」「シャンパンの泡があなたの家を照らす：科学者が語る」と、さながら伝言ゲームのように、徐々に大げさになって伝わって行きました。なお、言うまでも無いことですが、我々の原著論文には「シャンパン」という単語は全く入っていません。一方、AIP のプレスリリースと同時に、物性研ニュースなどで我々も広報をしたのですが、「渡辺宙志助教らが「京」による大規模気泡生成シミュレーションに成功」などとカタイタイトルだったのがいけなかったのか、日本では全くといって良いほど話題になりませんでした。

この一連の騒動(?)は、研究のアウトリーチについて再考する良い機会になりました。同じ論文に関する広報でも、キャッチーなタイトルをつけるか否かによって注目度が全く異なります。あまり実態とかけ離れたキャッチコピーをつけたり、誤解を招く広報をしたりしてはいけません、やはり税金を使って研究をしている以上、その成果をわかりやすく納税者の皆さんに伝える義務はあるのだ、と痛感しました。AIP がメディアサービスの専任の人を置き、プロのサイエンスライターを雇って広報に大変力を入れていることがわかったことも有意義でした。同様に、研究成果だけでなく、研究遂行に必要な道具についても、その必要性をきちんと説明していかなければならない、と思うようになりました。

私の研究以外の主な仕事は、物性研スパコンの運用、そして調達です。物性研のスパコンは、原則として 5 年毎に更新されています。長い調達期間が終わり、今年 7 月より新しいスパコンが稼働を開始しました。総理論演算性能



図 2:スミソニアン博物館のオフィシャルマガジン「Smithsonian」のオンライン版「Smithsonian.com」。トップページに掲載された我々の成果のニュースが掲載されている。

2.65 PFlops は、研究所が保有するスパコンとしてはかなり大規模なものです。日本にいとあまり意識しませんが、海外に出張した時などには、この物性研スパコンの規模の大きさが実感されます。まだ学生だった頃、海外の共同研究者に新しい計算を提案した時「それはできたら面白いが、ちょっと規模が大きすぎて計算するのは無理だ」と言われたのですが、「いや、物性研に投げたら 1 日仕事だ」と答えたら大変驚かれたことがありました。計算物理学者は、大雑把に言って普段使っている計算資源で一ヶ月を超えるような計算は、無意識に「無理」と判断してしまう傾向にあるようです。つまり、スパコンは単に「より大きな計算ができる、より早く結果を出せる」というだけでなく、それを使う研究者の想像力の限界を押し広げるツールでもあります。物性物理を研究するものにとって、物性研のスパコンが無料で気軽に使える、ということが、極めて大きなアドバンテージになっていることを実感しました。我々が日常的に使っているスパコンも、決してあって当たり前の存在ではなく、スパコンを使って日々どのような研究が行われているか、なぜスパコンが今後も必要であるかを、様々な機会に説明していかなければなりません。現在、なぜ気泡生成が液滴生成と異なるように見えるのかを解明するため、「京」フルノードを使ったさらに大規模な計算を進めています。また、「京」では流れの無い多重気泡生成まででしたが、ポスト「京」では、流れも含んだ本格的な気液混相流の全粒子計算を実施すべく、準備を進めているところです。今後も、大規模計算で初めて見える面白い物理を追究するとともに、その面白さを広く伝えることにも力を入れようと思っています。

本研究は、九州大学(当時)の鈴木将氏、理研の稲岡創氏、東大の伊藤伸泰氏との共同研究です。また論文をまとめるにあたり、川島先生、野口先生、杉野先生、常次先生、山室先生といった多くの方に助言を頂きました。「京」の全系計算の実施においては、藤堂先生を始め、CMSI 事務局の皆様、RIST の皆様に大変お世話になりました。理研 AICS の皆様には、研究成果の紹介などでお世話になりました。この場をお借りして感謝の意を述べさせていただきますと思います。

#### 参考文献

[1] H. Watanabe, M. Suzuki, H. Inaoka, and N. Ito, *J. Chem. Phys.* **141** 234703 (2014).

[2] AIP によるプレスリリース

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

[3] Smithsonian.com の記事

<http://www.smithsonianmag.com/science-nature/new-years-physics-champagne-bubbles-could-help-power-future-180953778/>

