

# 大規模計算による非平衡研究の可能性

渡辺 宙志

東京大学物性研究所

KEYWORDS : 分子動力学法、非平衡、大規模計算

数値計算が実験、理論に次いであらわれた「第三の科学」として扱われるようになってから久しい。計算機の能力は年々向上し続け、「京」をはじめとするペタフロップス級の計算機も増えている。2014年11月時点で、1ペタフロップス以上の計算能力を持つスパコンは世界に50サイトあり、今後も増えていくであろう。一方で計算機を利用した科学がどうあるべきかは難しい。筆者のまわりだけかもしれないが、一般に数値計算屋の評判は芳しくない。実験家には「実験の後追いしかしてくれない」と言われ、理論家には「本当の科学の面白さはわからない」と言われ、そもそも数値計算屋からして「手で解けるに越したことはないが、無理なのでやらざるを得ない」などと、まるで必要悪のような扱いである。大規模な計算資源についても、かつて事業仕分けで議論されたように、真に必要なか、必要であるならどのような形であるべきか、といった問いへの答えは自明ではなく、今後も数値計算屋は悩み続けるであろう。本稿では、気が付くと研究人生の大半をスパコンとともに過ごしてきた筆者が、「数値計算は真に科学を発展させ得るか」「大規模計算は真に人類を賢くするか」などについて考えてきたことを紹介してみたい。

そもそも数値計算とは「物理法則を支配するルールが全て既知とせよ。そのルールの上でどのような結果が起きるかを数値的に求める」という方法論である。物理とは、身のまわりの現象を少数のルールで理解しようという試みであった。多くの場合ルールは微分方程式の形を取り、支配方程式と呼ばれている。そして既知である観測事実から、世界のルール(支配方程式)を推定するというプロセスを経る。しかし、数値計算では既知なのは支配方程式であり、非自明な観測事実を導くという、これまでの物理とは逆のプロセスを経る(無論、どちらも何度もフィードバックを回すことになるが)。「自分がいま何を仮定し、何を非自明だと思っているのか」を常に自覚しないと、意味のある数値計算はできない。その意味において変数(Variables)と観測量(Observables)の区別は本質的である。変数とは、我々が a priori に認める物理量で、支配方程式の自由変数である。観測量とは、変数から a posteriori に導かれる物理量で、変数の(汎)関数として定義される。変数と観測量は、採用する支配方程式により異なる。例えば応力テンソルはナビエ・ストークスでは変数だが、分子動力学法(MD)では観測量である。また、温度も熱伝導方程式では変数だが、MDではやはり観測量である。

MDで非平衡研究を行うことを考えよう。MDでは変数は粒子座標と運動量の組  $\{q_i, p_i\}$  であり、全ての観測量はその関数として表現される。平衡とは、時間的、空間的にマクロな物理量が一樣な状態のことであった。従って非平衡ではそれらが非一樣になっている状態のことである。これは、「非平衡研究においては物理量を時空局所的に定義しなければならない」ということを意味する。局所的な圧力とはどう定義されるべきか? 温度は? エントロピーは? また、温度などは複数の定義の仕方があり、平衡系ではそれらの値が一致するが、非平衡系では一致しない、ということがよくある。その時、我々は何を温度だと思ふことにするのか? 非平衡研究に限らないが、数値計算では「自分はこれを支配方程式として採用し、これを観測量の定義として用いる」と宣言するところからが研究の始まりである。さて、非平衡研究には大きく分けて二つの方向性がある。一つは非平衡定常系、

もう一つは非平衡非定常系である。非平衡定常系とは、外場により系に定常的な「流れ」を生じさせている系のことで、熱伝導などが典型例である。非平衡非定常系は原則「なんでもあり」だが、ここでは初期状態と終状態が平衡状態で、その間の緩和過程に限定する。典型例は断熱膨張である。渡辺は(趣味の問題もあるが)主に数値的な理由で後者、つまり緩和過程を研究している。意味のある非平衡定常系では、かならずエントロピー生成により熱が発生する。系を定常状態にするためには、熱浴をつけて熱を取り去らなければならない。僕は熱浴の数値表現をあまり信用していないので、なるべくなら熱浴を使いたくない。また、平衡/非平衡に限らず定常系は、系のサイズが大きくなるほど定常状態になるのに時間がかかる。緩和過程では、系の時間スケールを決めるもの(例えば音速)が系のサイズによらないことが多く、大規模計算に向いている、という事情もある。

最近、我々は「京」の4096ノード(0.5PF)を用いて数億粒子を超える大規模急減圧シミュレーションを行い、その泡の挙動を解析した[1]。炭酸飲料の栓をあけると多数の泡が出るが、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。これを全て分子スケールから「京」で再現し、気泡成長則の解析を行った。Ostwald成長は発泡に限らず合金や結露など一次転移を起こす系一般に見られる現象であり、1960年代に古典的な理論であるLifshitz-Slyozov-Wagner(LSW)理論が完成している[2]。LSW理論は発生した気泡がどのように成長するかを記述する理論であるが、減圧直後に気泡がどのように発生するかを記述するのが古典核生成論(Classical Nucleation Theory, CNT)であり、成立は1920年代から40年代にかけてである。CNTは液滴生成率の予言には成功するが、気泡生成率は桁で間違えるという問題があり、その理由は未解決である。CNTとLSW理論は、形式的には同じ支配方程式を異なる境界条件で解いているだけであり、多くの物理的な仮定を共有する。そこで、我々はLSW理論も気泡系において失敗するであろう、その失敗が、CNTの失敗についてなんらかの知見を与えるであろう、と予想した。しかし計算してみると、結果は見事にLSW理論で記述されてしまった。我々が「成り立たないであろう」と思っていた仮定(詳細は述べないが、系の一様性の仮定)が、気泡生成においても妥当であることが示された形となった。結果を見てから考えてみれば、当初我々が思っていたのとは違う形であるが、確かにその仮定は成立しても良いことがわかった。

さて、冒頭の間「数値計算は真に科学を発展させ得るか」「大規模計算は真に人類を賢くするか」についてだが、答えはもちろんわからない。しかし、少なくとも僕はこの計算でひとつ賢くなったし、何より楽しかった。そもそも数値計算は楽しい。死ぬほどたくさん四則演算をやった結果、出てきた数字の羅列を適切に処理すると泡が見えたりする。そしてなにより、ルールを全て設定したこの世界の創造主たる自分にも予測不可能な結果が出てくる。得られた知見がこれだけの大規模計算を必要とするだけの「価値」があったか、と聞かれるとあまり自信は無いが、それでも僕はなるべく単純なモデルから複雑な現象を得るために、これからも大規模計算を続けると思う。

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

[2] I. Lifshitz and V. Slyozov, J. Phys. Chem. Solids **19**, 35 (1961); C. Wagner, Z. Elektrochem. **65**, 581 (1961).