

気泡生成のシミュレーション解析

渡辺宙志 東大情報基盤センター
伊藤伸泰 東大工

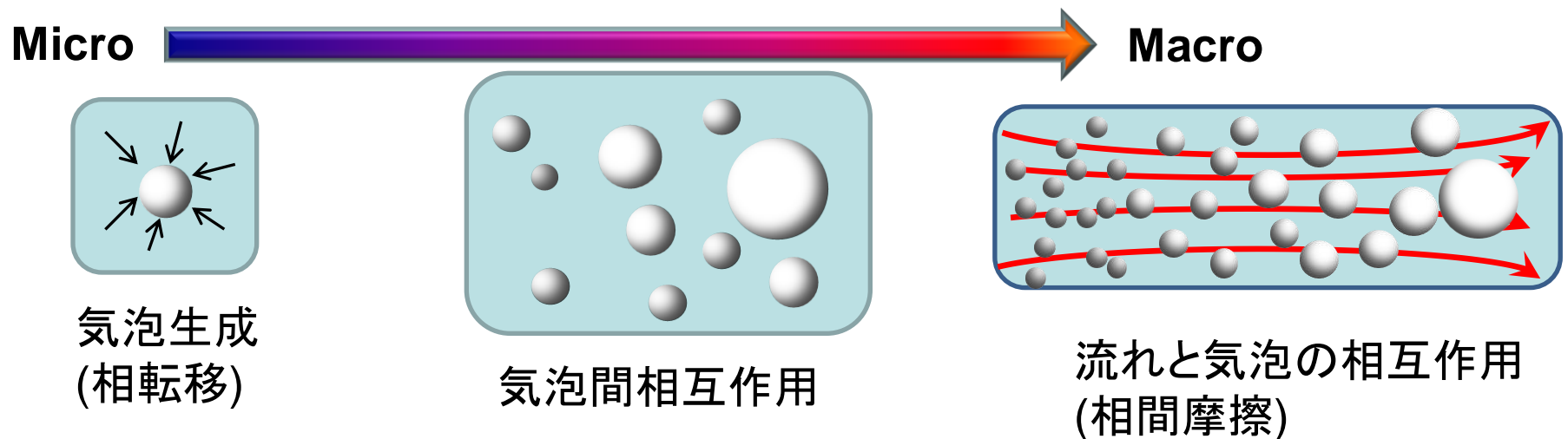
Outline

1. はじめに
2. 大規模並列計算
3. 沸騰と古典核生成論
4. 気泡核生成時間
5. まとめと今後の展望

はじめに

沸騰流

流れと相転移のカップルしたマルチスケール、マルチフィジックス問題
強い非平衡現象



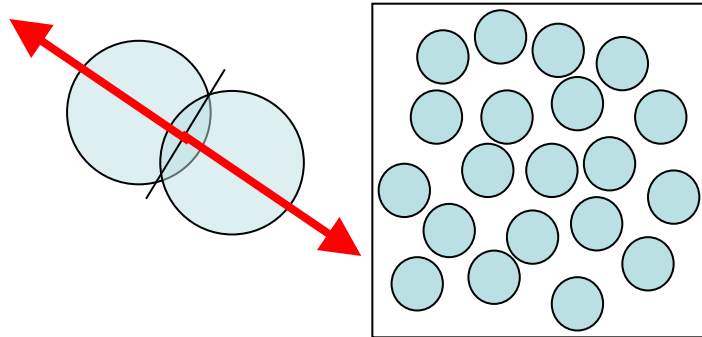
マルチスケールシミュレーション

微視的な相互作用、巨視的な現象
スケールの分離と粗視化
人為的なスケールの導入

➡ マルチスケールな問題の直接計算

分子動力学法と格子計算

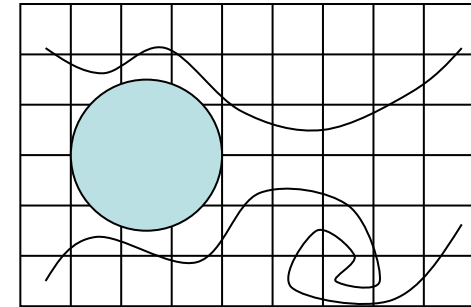
分子シミュレーション



Equations of Motions

$$m \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} = \vec{F}_i$$

格子シミュレーション



Navier-Stokes Equations

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{f}$$

Complementary

全粒子計算

ミクロな相互作用からマクロな現象を直接再現

- 粒子数が勝負
- 物理量の微視的な定義(応力やエントロピー)



大規模並列計算 (1/3)

並列化MD

単純領域分割

通信方法

MPIによる実装

- ・局所通信 (粒子の情報のやりとり)
- ・大域通信 (ペアリストの同期)

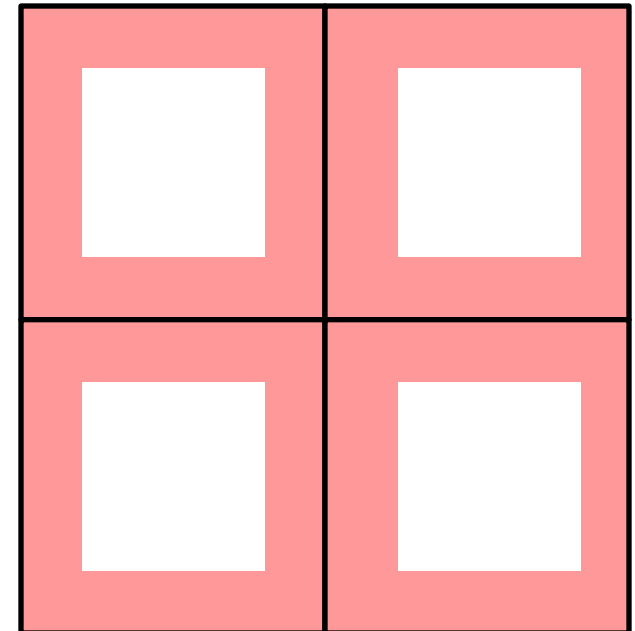
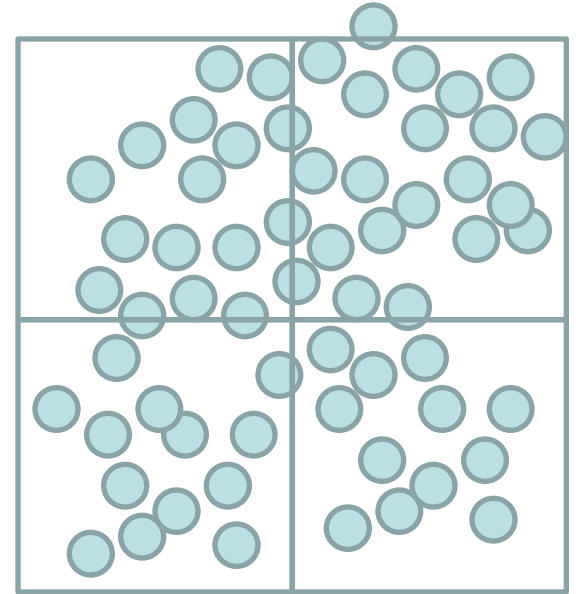
通信のサイズ

通信コストはカットオフ長さが決める

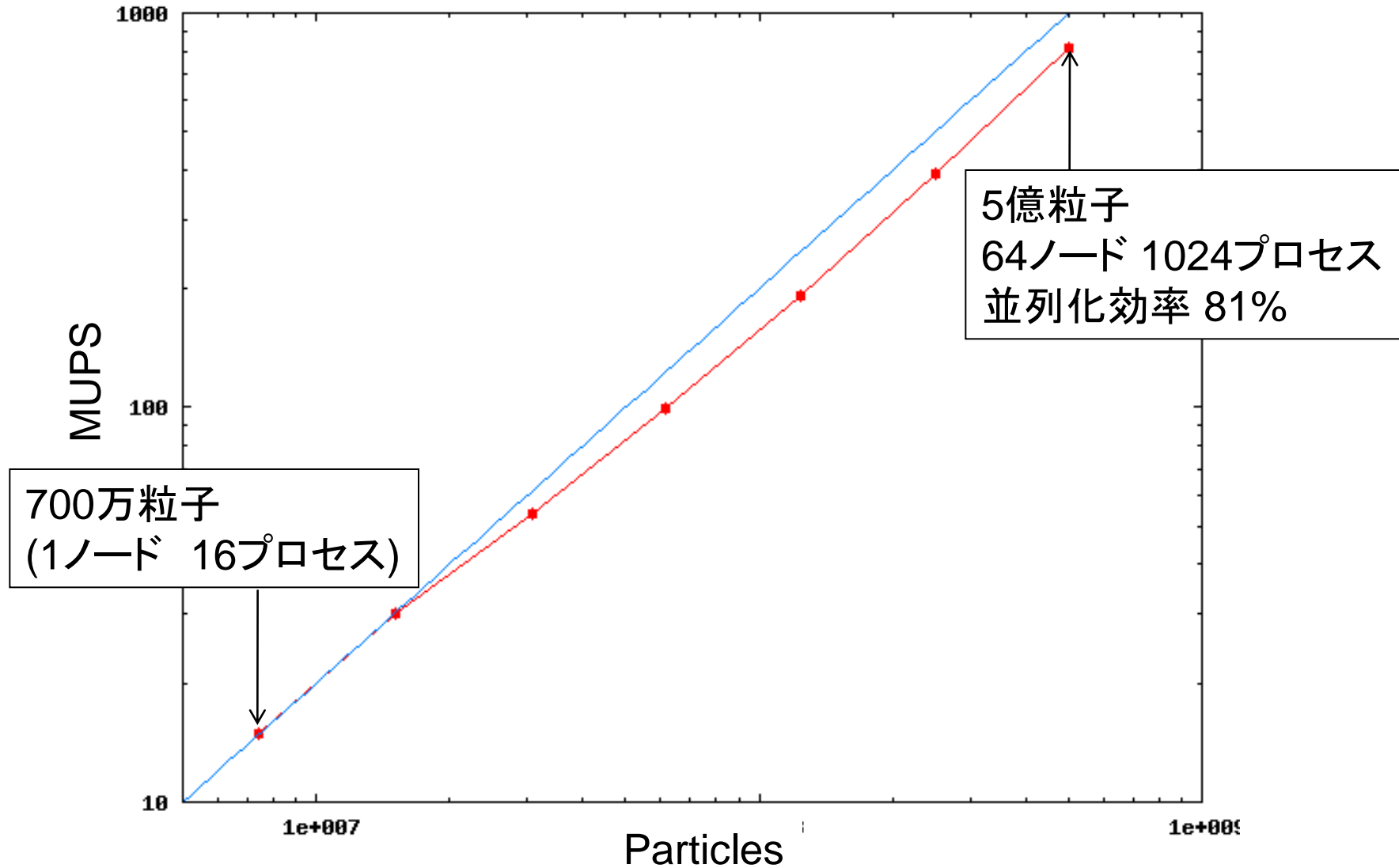
システムサイズ100, 相互作用長さ3.0で

$$1 - \left(\frac{100 - 6}{100} \right)^3 \approx 0.115$$

➡ 11.5% が通信に関わる粒子



大規模並列計算 (2/3)



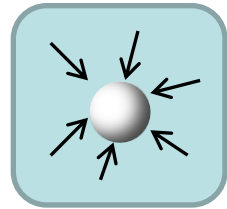
T2k HA8000 University of Tokyo
 AMD Quad Core Opteron 2.3GHz 147.2GFlops/Node

大規模並列計算 (3/3)

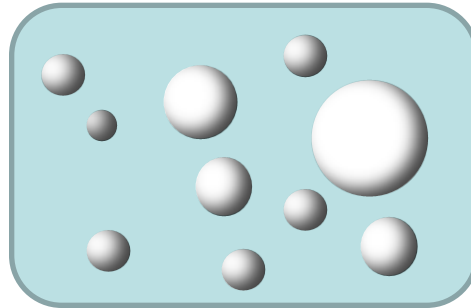
現象のスケール

We are here

Micro

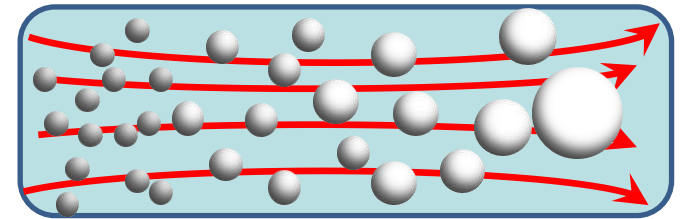


Bubble Nucleation



Bubble Interaction

Macro



Coupling of flow and phase transition

粒子数

$\sim 10^6$

$10^7 - 10^8$

$10^9 - 10^{12}$

Linear Scale

10 nm

100 nm

1 μm

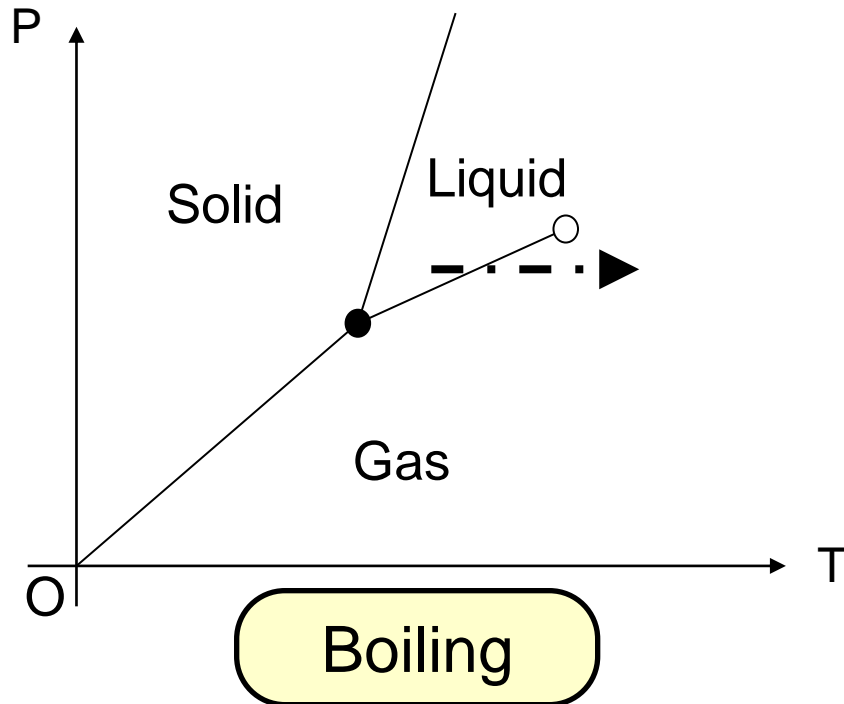


沸騰とは (1/2)

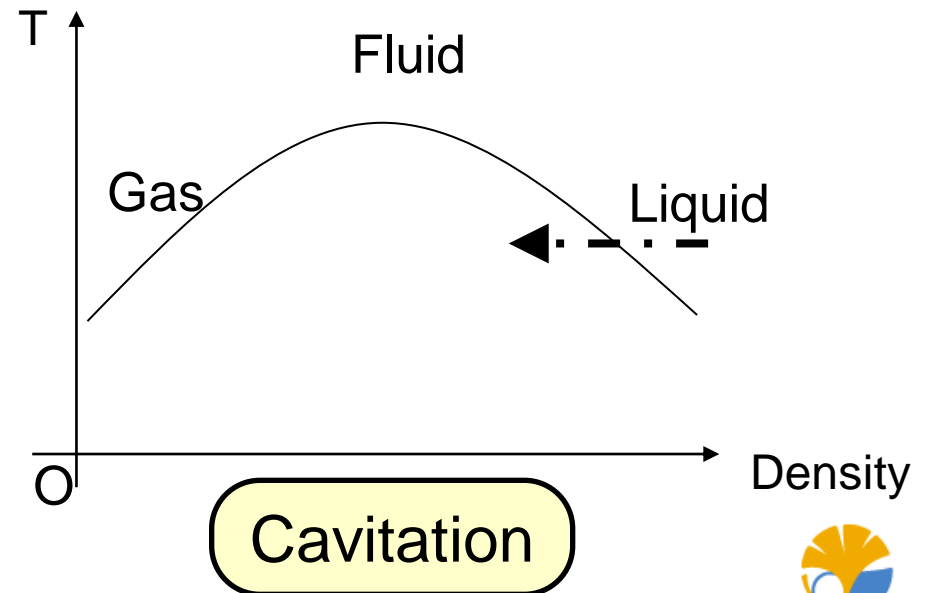
沸騰のさせかた

熱力学変数を操作することで、気液共存線を越えると沸騰する

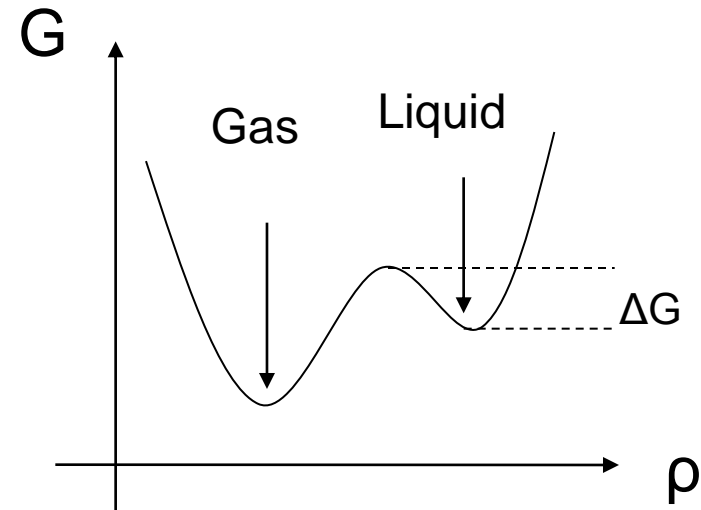
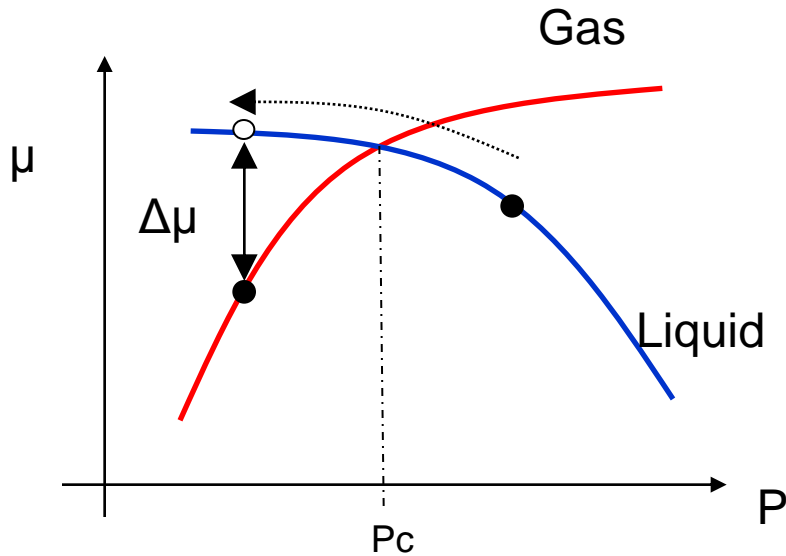
定圧条件下で温度を上げる



定温条件下で圧力を下げる



沸騰とは (2/2)



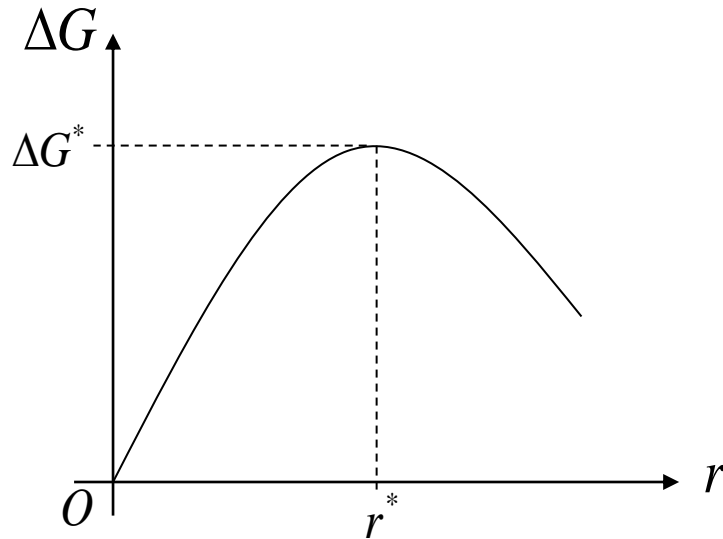
急減圧により液相は準安定状態となるが、エネルギーバリアのために気相が生まれるのに時間がかかる

このエネルギーバリアを見積もり、さらにそこから核生成速度を見積もるのが古典核生成論 (Classical Nucleation Theory, CNT)



古典核生成論 (1/2)

半径 r の気泡/液滴を作るためのGibbs自由エネルギー



Gibbs近似

$$\Delta G(r) = 4\pi r^2 \gamma - \frac{4}{3} \pi r^3 \Delta \mu$$

$\Delta \mu$: 液相と気相の化学ポテンシャル差

r : 気泡の半径

γ : 界面張力

鞍点近似により、核生成率 J は以下のように見積もられる

$$J = C \exp(-\beta \Delta G(r^*))$$

エネルギーバリアを温度揺らぎにより乗り越えるという描像



古典核生成論 (2/2)

問題点

- ・エネルギーバリアの見積もり

$$\Delta G(r) = 4\pi r^2 \gamma - \frac{4}{3}\pi r^3 \Delta\mu$$

この描像は正しいか？

準安定状態の相間で界面張力は定義できるか？その値は？

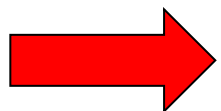
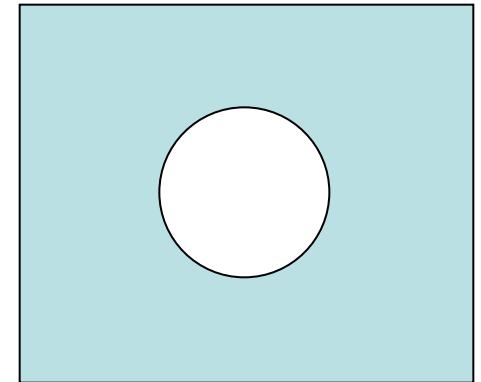
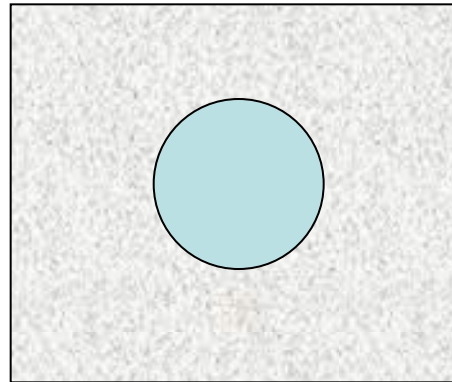
気泡の場合にはさらに項が増える

- ・核生成率の見積もり

核生成率の計算は本質的に液滴生成であることを使っている

液滴生成と気泡生成の違い

気泡同士の相互作用



エネルギーバリアの直接推定



シミュレーション

分子動力学法

- 自発的な相転移
- 相境界の自発的な生成消滅
- 相間摩擦

$$\phi(r) = 4\epsilon \left(\underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}}_{\text{Repulsive}} - \underbrace{\left(\frac{\sigma}{r}\right)^6}_{\text{Attractive}} \right)$$

粒子間相互作用

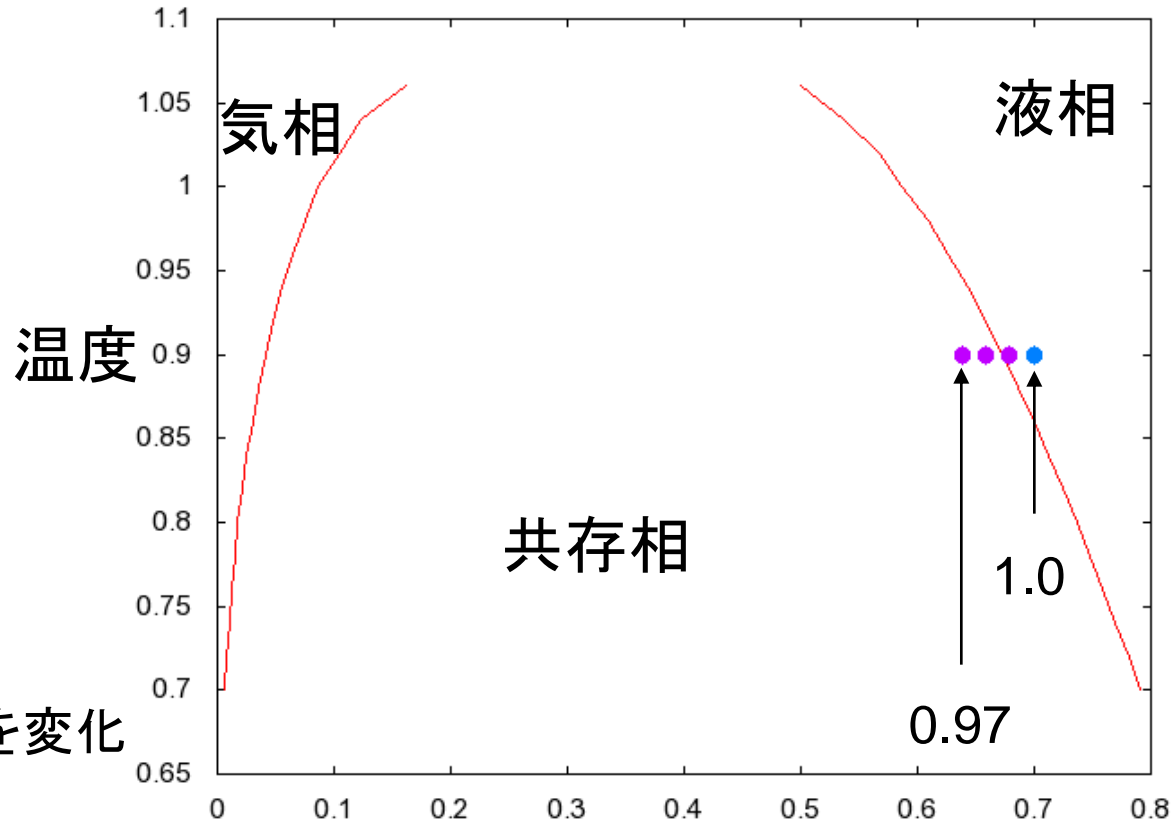
12-6型の LJ ポテンシャル
 カットオフ 3.0σ
 粒子数 5万~50万
 時間刻み 0.005
 50万ステップ

急減圧プロセス

T=0.9に制御後、粒子の半径を変化

半径 $1 \rightarrow 0.97 \sim 0.99$

密度 $0.7 \rightarrow 0.65 \sim 0.68$



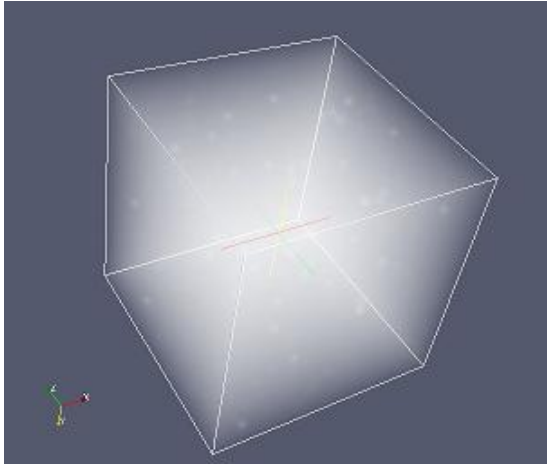
Depressure

Condensation

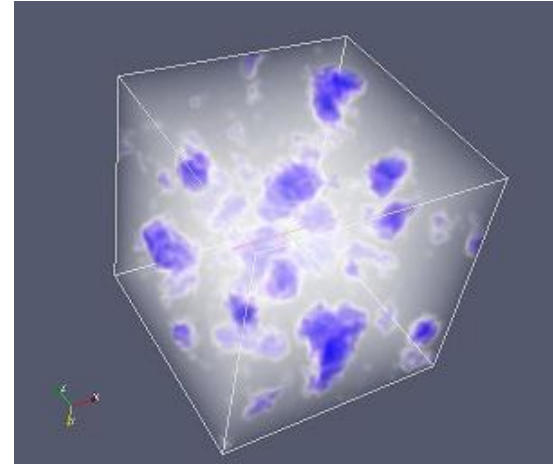
密度

結果

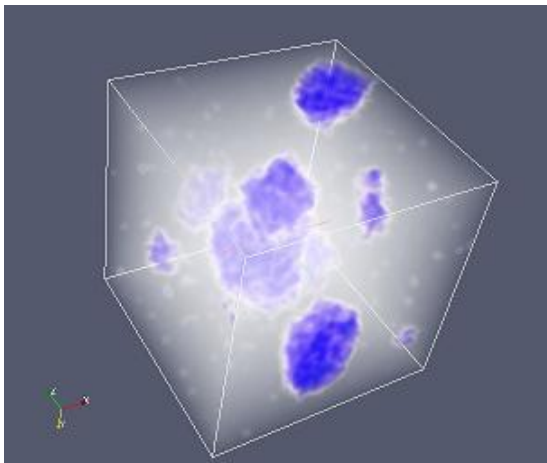
減圧直後



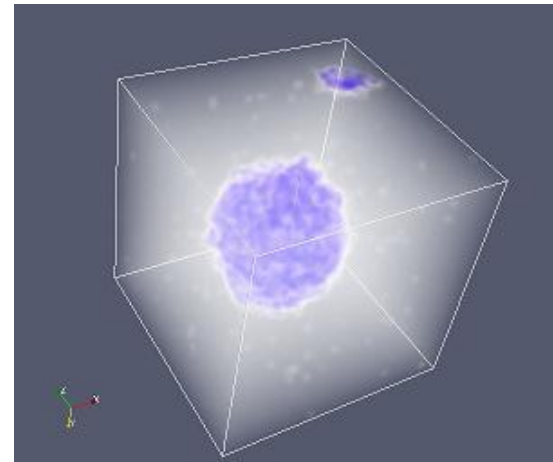
多重核生成



気泡相互作用



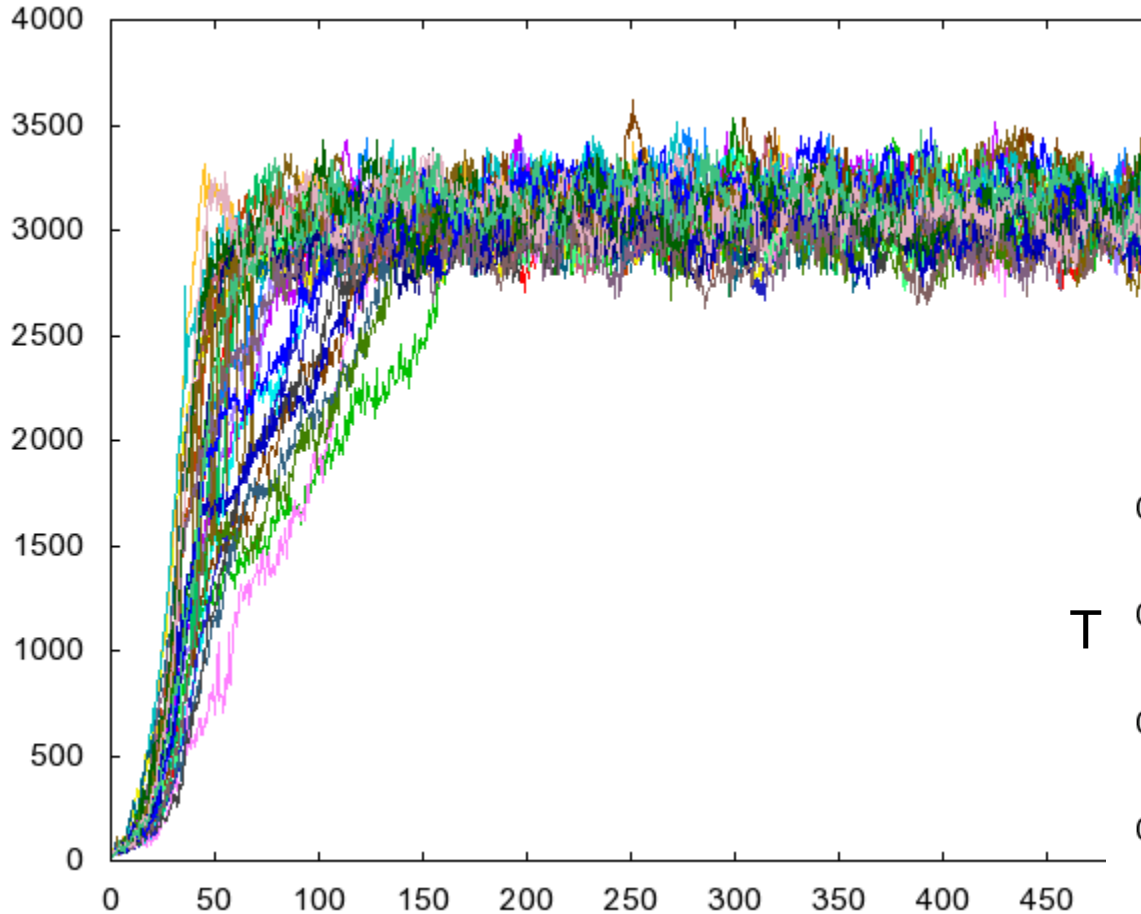
単一の気泡へ



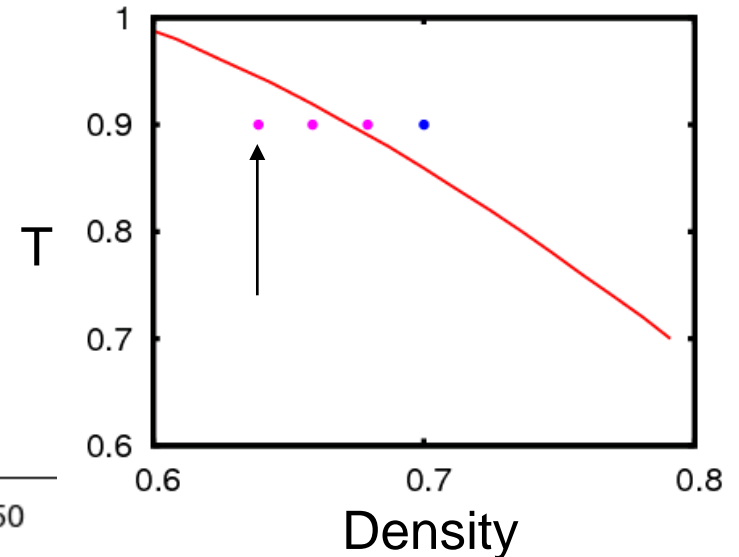
半径1 \rightarrow 0.97の結果

気泡生成時間—スピノーダル領域

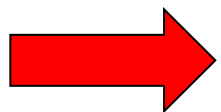
最大気泡の時間発展



半径1 → 0.97の結果
32回の独立な試行
最大クラスターのみ表示



全ての試行で気泡がほぼ同時に(待ち時間無しで)生成

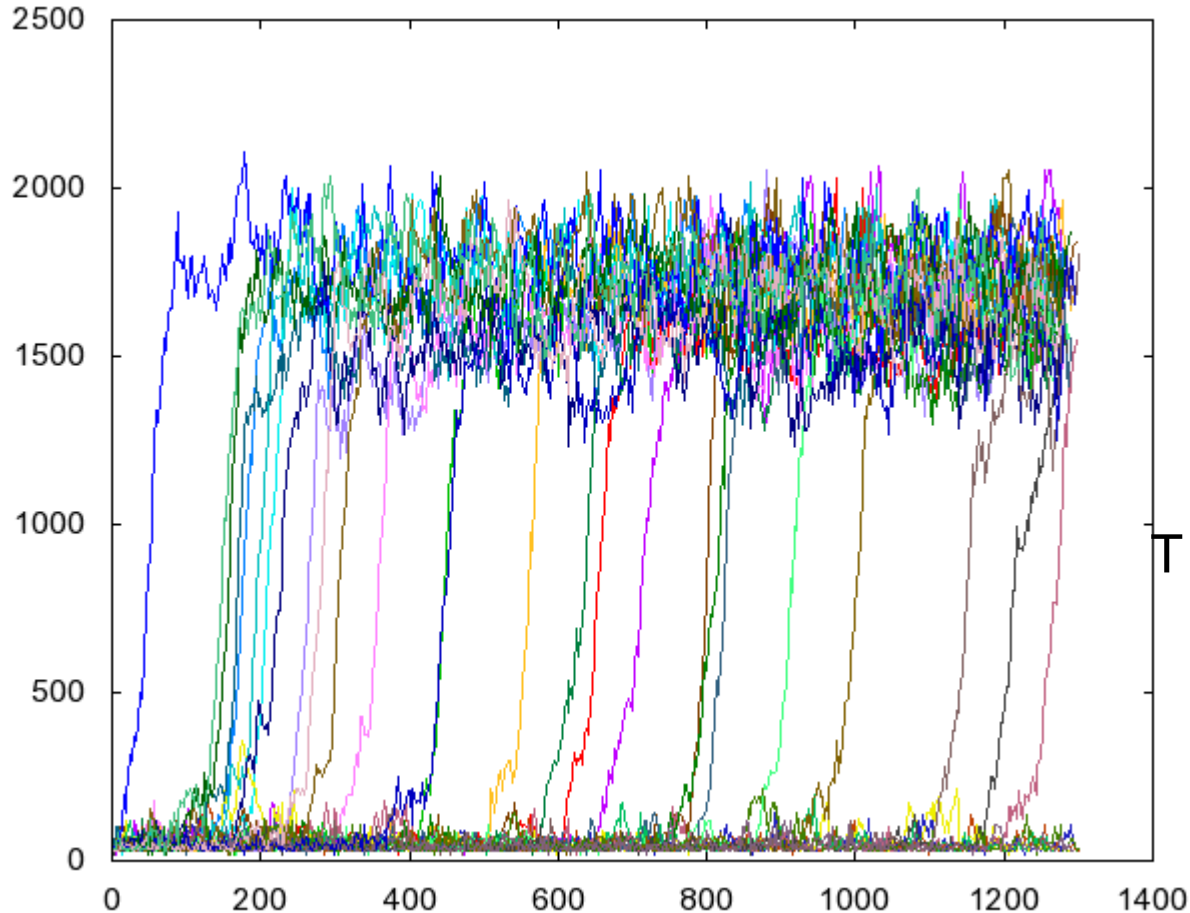


スピノーダル領域を超え、液相が絶対不安定となっている

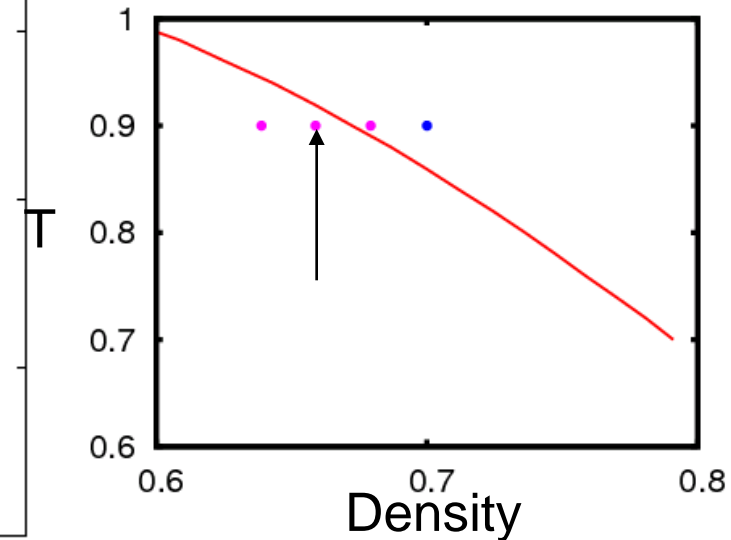


気泡生成時間－核生成領域

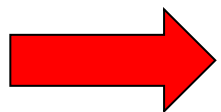
最大気泡の時間発展



半径1 → 0.98の結果
32回の独立な試行
最大クラスターのみ表示



試行ごとに異なる待ち時間で気泡生成

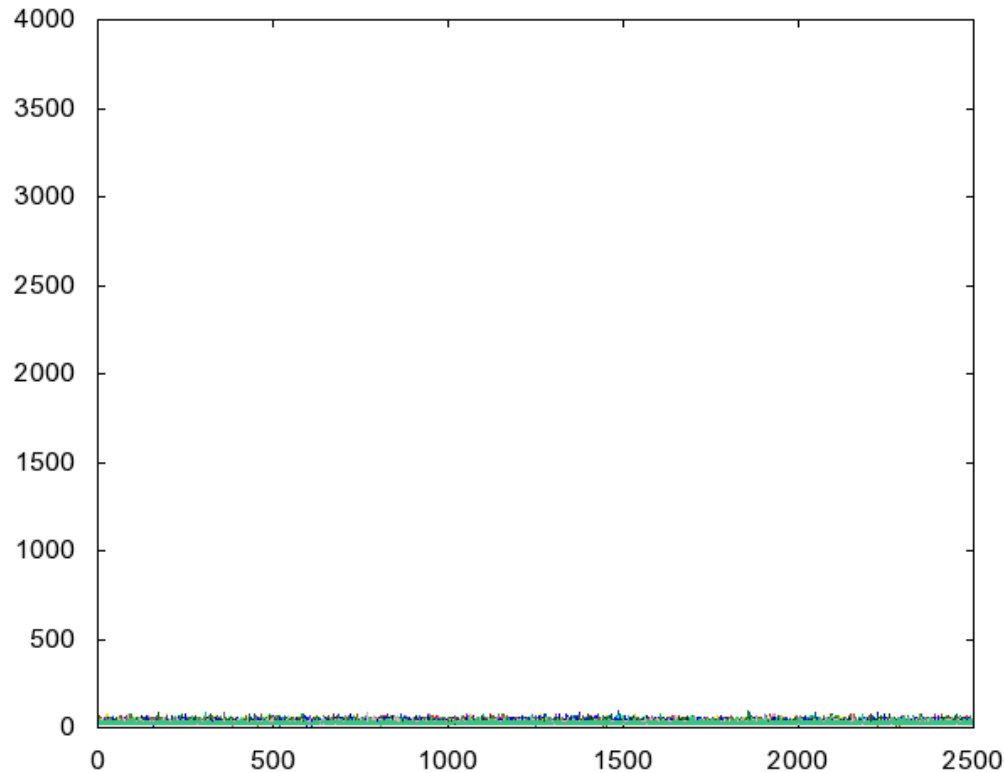


核生成にあるエネルギーバリアがある



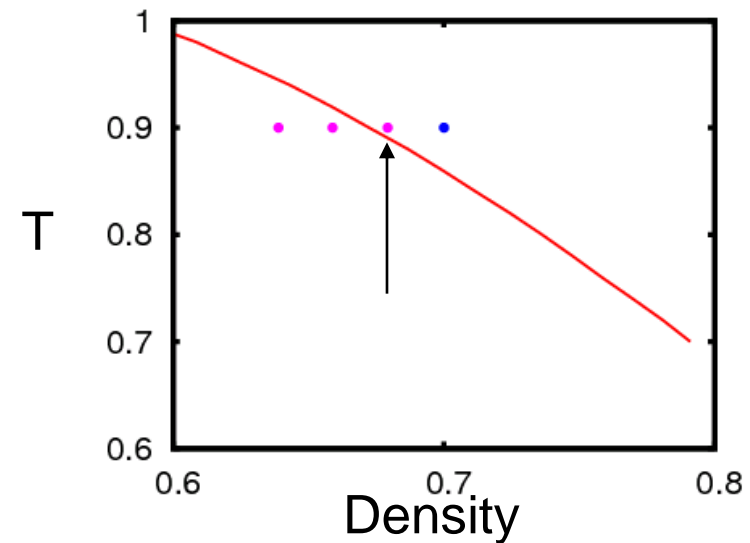
気泡生成時間－液相安定領域

最大気泡の時間発展



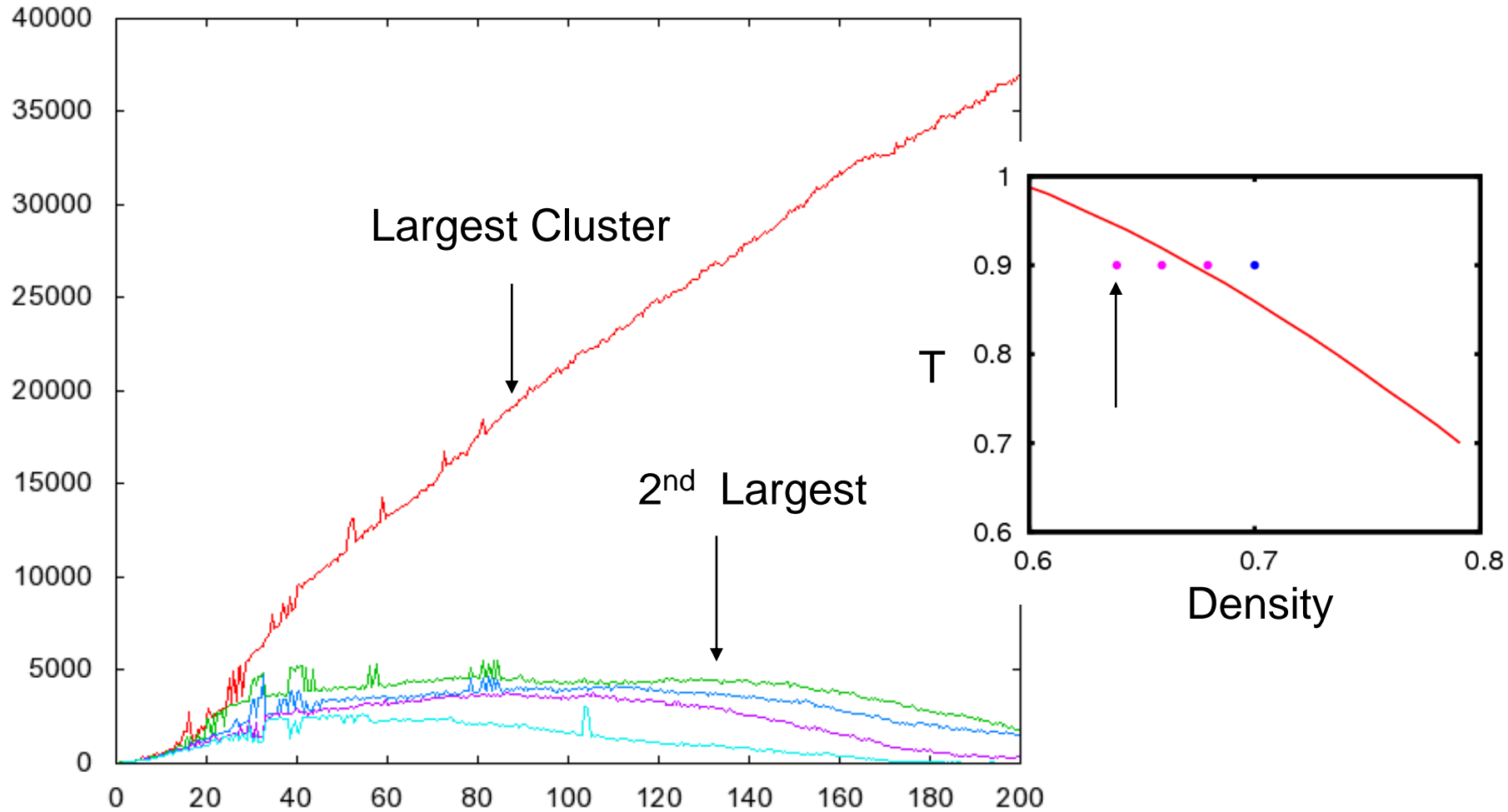
気泡は生成しない

半径1 → 0.99の結果
32回の独立な試行
最大クラスターのみ表示



気泡間相互作用(スピノーダル領域)

気泡サイズの時間発展

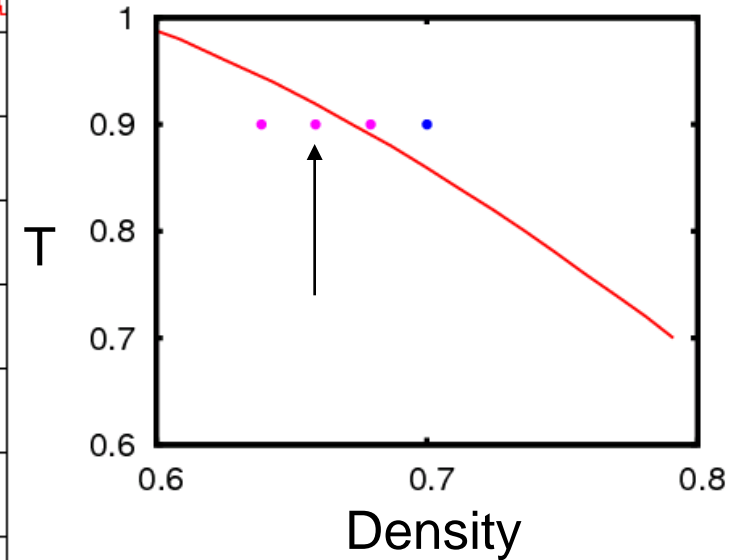
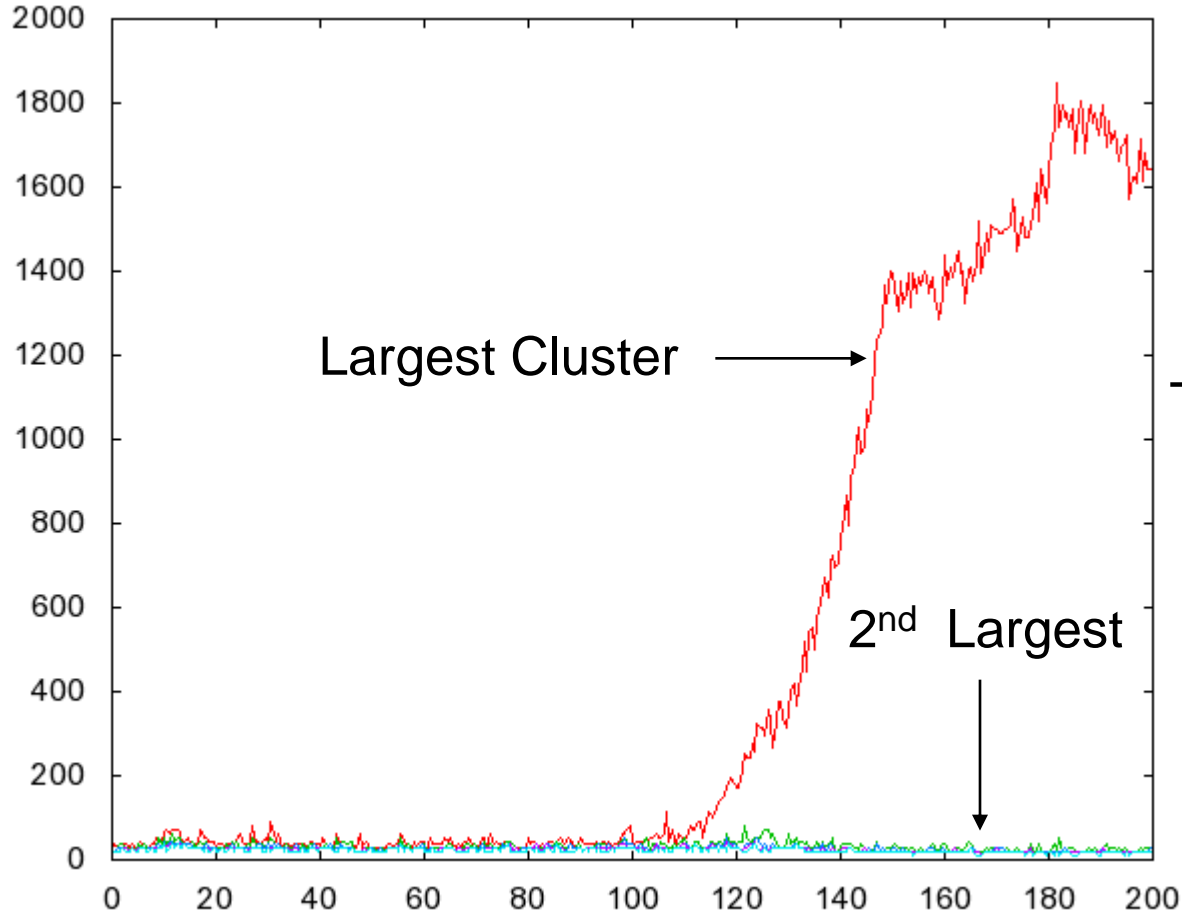


- ・減圧直後から相互作用
- ・二番目以降の気泡はゆっくり消滅

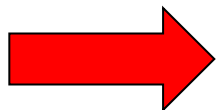


気泡間相互作用(核生成領域)

気泡サイズの時間発展



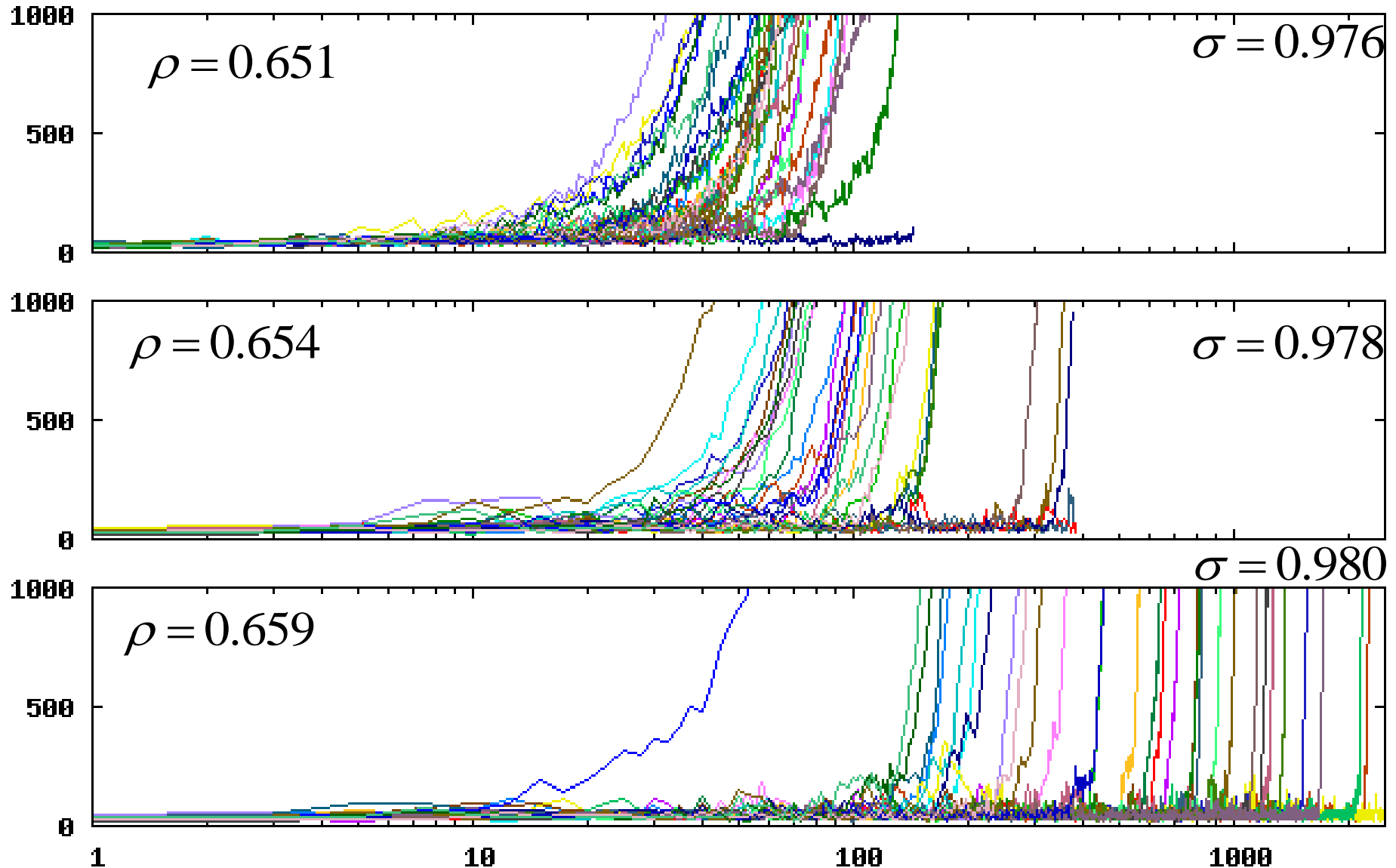
多重核生成は起きない



液滴生成とは状況が大きく異なる



気泡生成時間－核生成領域



気泡生成時間の密度への指数関数的な依存性



気泡の揺らぎ (1/2)

エネルギーバリアの直接推定

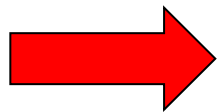
体積 v の気泡の発生確率は $f(v)$ は

$$f(v) = \rho_{\text{liquid}} \exp(-\beta\Delta G)$$

とかけるであろう

存在確率の対数を取れば

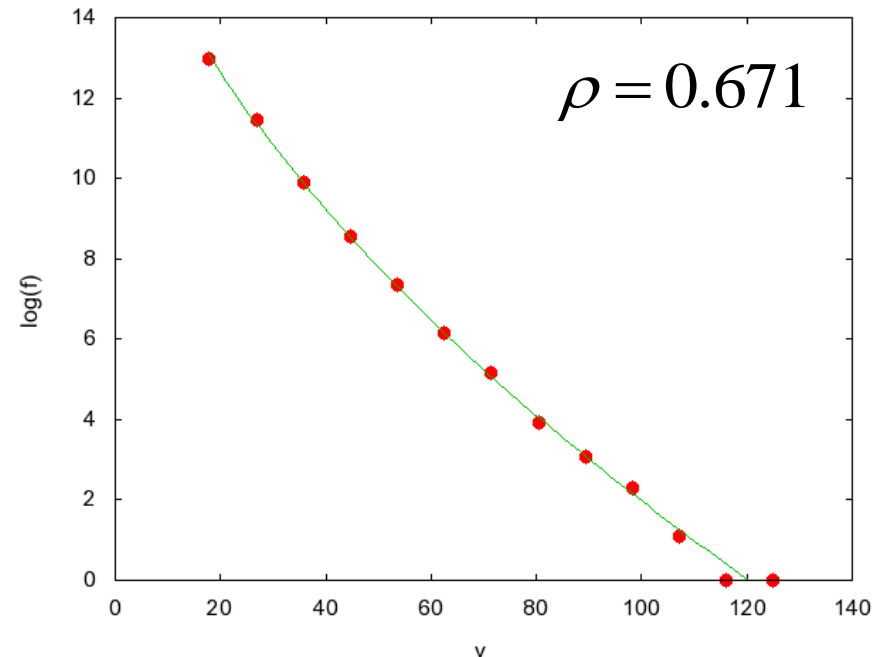
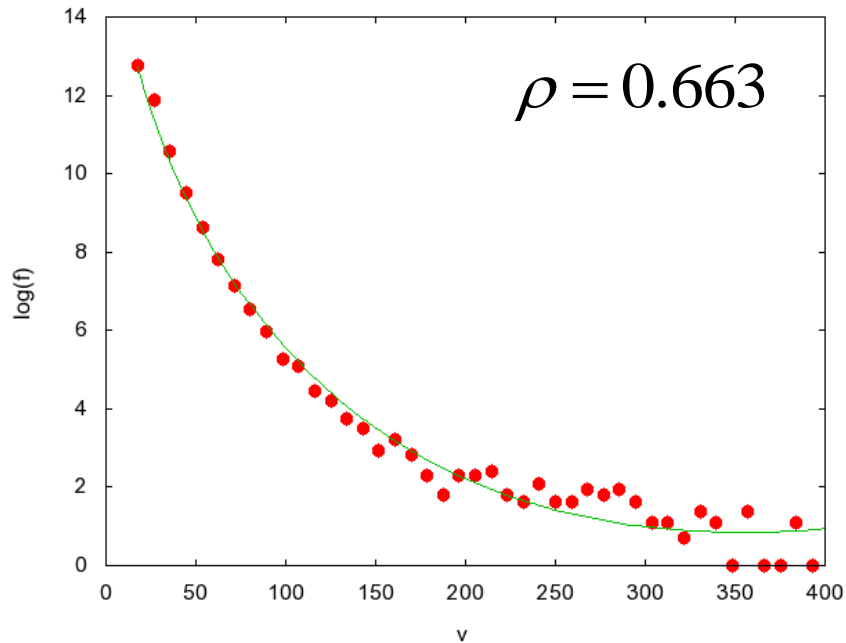
$$\log f = -\beta\Delta G + \log \rho_{\text{liquid}}$$



気泡の成長前の気泡発生確率のヒストグラムから
エネルギーバリア ΔG の関数形を直接推定する



気泡の揺らぎ (2/2)



$d\Delta G / dV = 0$ より臨界核サイズ V^* が分かる

$\log f(V) = aV^{2/3} - bV + c$ の形をしていると仮定すれば
 $\beta\Delta G = -aV^{2/3} + bV$

$$\rho = 0.663 \quad V^* \approx 350$$

$$\rho = 0.671 \quad V^* \approx 5000$$



まとめと考察

結果

- ・MDによる急減圧シミュレーションにより、気泡生成プロセスを調べた
- ・気泡生成の待ち時間の密度依存性を調べた
- ・気泡の揺らぎからエネルギーバリアの直接推定を行った

考察

気泡生成率は良い情報ではない
気泡同士の相互作用は無視できない
→ 古典核生成論の適用には注意が必要

今後の課題

気泡生成に必要な仕事の測定
エントロピー生成
微視的な力学平衡の仮定の検証



より大規模な計算

