

令和 4 年 6 月 23 日現在

機関番号：34304

研究種目：若手研究

研究期間：2018～2021

課題番号：18K13464

研究課題名（和文）高密度粒子系の非局所性に基づく新しい連続体理論の展開

研究課題名（英文）Non-local continuum modeling of dense particulate systems

研究代表者

齊藤 国靖（Saitoh, Kuniyasu）

京都産業大学・理学部・准教授

研究者番号：10775753

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：粒子系の力学的な応答は粒子のランダムな構造や配置替えにより予測困難なものが多い。特に、粒子系の応力を記述するには、従来の局所的な構成則ではなく非局所的な枠組みが必要になる場合がある。この様な粒子系の非局所性は粒子間の長距離相関に起因しており、マクロな力学応答だけでなく、個々の粒子のミクロな運動まで調べるのが不可欠である。本研究では、分子動力学法を用いて、粒子のミクロな運動から系全体の力学応答を理解するという目標を掲げ、ジャミング転移点近傍での非局所的レオロジーと応力緩和、高密度粒子系の音波特性及び塑性変形の確率論的モデル、さらに自己拡散現象とジャミング転移の関係やアバランチに関する成果を上げた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

粉体、泡、エマルジョンなど、私達の身の周りには巨視的な大きさの粒子が数多く存在します。これらの粒子が集団として運動するときの振る舞いは、水や空気のような流体とは全く異なり、予測困難なものです。その要因として、ランダムな粒子構造や粒子の複雑な配置替え、長距離におよぶ空間相関などが挙げられます。この様な粒子系の集団運動を精密に調べるには、分子動力学法による数値シミュレーションが有効で、本研究でも高密度粒子系の様々な物性を数値的に調べてきました。その結果、粒子系の様々な物性に対して非局所性を軸とした新しい見解を得ることができました。今後、これらの成果を工学的な応用に拡張していくことが重要です。

研究成果の概要（英文）：Understanding of mechanical responses of particulate systems is crucial to engineering technology. Applying deformations to particulate systems, one observes that constituents are rearranged. Such rearrangements are spatially correlated and thus the mechanical response cannot be determined by the deformation at the same place. In this research project, we proposed a non-local description of the mechanical response of particulate systems. Employing molecular dynamics simulations, we have numerically analyzed spatial correlations between the particles as well as their dynamics at a microscopic scale. We have measured the viscosity and implemented it to the non-local description. Our method succeeded in reproducing velocity profiles of the Kolmogorov flows. We also studied the stress relaxation, sound properties, plastic deformations, diffusion, and avalanche of particulate systems and concluded that microscopic dynamics of the particles play a significant role.

研究分野：統計力学

キーワード：レオロジー 粘弾性 弾性 塑性 音波 拡散 輸送現象

1. 研究開始当初の背景

紛体やサスペンションなど粒子系は理工学における幅広い分野の対象で、レオロジーを始めとするそのマクロな挙動をミクロな視点で理解することは重要である。申請者はこれまで、分子動力学法（全粒子の運動方程式を数値的に解く方法）と連続体理論を通じ、粒子系のマクロな挙動の解明に努めてきた。最近の動向として、高密度粒子系のレオロジー特性（粘弾性や弾塑性）に関する研究が国内外で盛んに行われている。しかし、高密度状態では粒子同士が常に接触するため、複雑な応力ネットワークが系全体に張り巡らされ、変形すれば多数の粒子が協同的に運動する。この強い空間相関により、シアバンドや雪崩（応力の急激な変化）など、連続体理論では説明出来ないマクロな挙動が多く観測されるようになる。

その要因として、従来の連続体理論はいわゆる局所的なモデルだからと言える。図1(a)の様に、局所モデルの応力は同じ点における変形と粘性率だけで決まり、物理量の空間変化が緩やかな場合にのみ有効である。従って、シアバンドなど、場の急激な変化が大域的なスケールで起こる現象は適用の範囲外である。一方、従来の局所モデルを図1(b)の様に非局所的な表式に一般化することは自然である。この時、応力は異なる点における変形の影響も受け、粘性率は異なる点を繋ぐ伝搬関数としての役割を果たす。

関連する先行研究として、非局所性の概念を基にした応力の構成則を導く試みが多くあるが（Goyon et al. 2008）、いずれも現象論的なモデル方程式であり、伝搬関数の厳密な形を数値計算から求めた例はない。また、弾性応答の非局所性を表す伝搬関数を求める研究もある（Baumgarten et al. 2017）。国内においては、過冷却液体における粘性率の波数依存性が調べられている（Furukawa & Tanaka, 2009）。

2. 研究の目的

本研究では、粒子系の応力を図1(b)の非局所的な枠組みで捉え直し、空間相関が重要となるシアバンドや雪崩などの難題を解決するのが目的である。非局所性の本質は伝搬関数であり、次の「3. 研究の方法」に挙げた手順で研究を進める。

3. 研究の方法

(1) コルモゴロフ流によるシアバンド形成

粒子系の非局所的な粘弾性を明らかにするために、分子動力学法により粒子のコルモゴロフ流を調べる。ここでは、サスペンションの様に溶媒の流れに伴って動く粒子系を想定し、周期境界条件を満たすような逆方向の流れ場を考える（図2(a)）。この時、粒子は流れ場に沿って動くが、粒子同士の接触により個々の運動は流れ場からずれ始め、粒子速度を空間的に粗視化して得た「速度場」は、元の流れ場とは異なる様相を示す（これがシアバンドに発展する）。流れ場の大きさは正弦波に従って連続的に変化させるので、粒子の速度場も滑らかであり、その空間勾配から局所的なせん断率を計算することが出来る。同時に、局所的な応力も計算することが出来、非局所的な表式（図1(b)）を用いて、伝搬関数としての粘性率が求められる。実際にはフーリエ変換した粘性率（あるいはその逆数であるフルイディティ）を求める方が容易で、その波数依存性から非局所性が露わとなる空間スケールを特定する（図2(b)）。さらに、伝搬関数の密度依存性やシアバンドとの関係を明らかにし、シアバンド形成のメカニズムを非局所的な枠組みで説明する。

(2) 準静的せん断変形による雪崩の発生

粒子系の非局所的な弾塑性を明らかにするために、分子動力学法により粒子の準静的せん断変形を調べる。ここでは、粉体の様に密に詰まった粒子系を想定し、Lees-Edwards 境界条件に

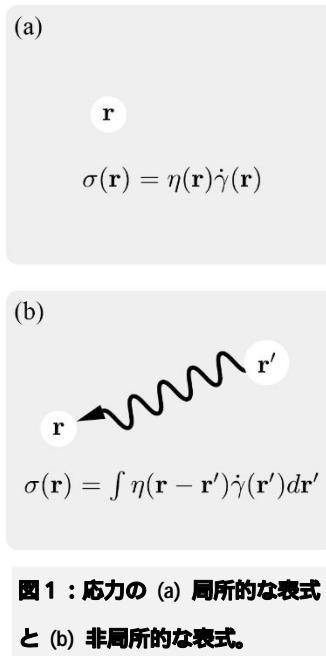


図1：応力の (a) 局所的な表式と (b) 非局所的な表式。

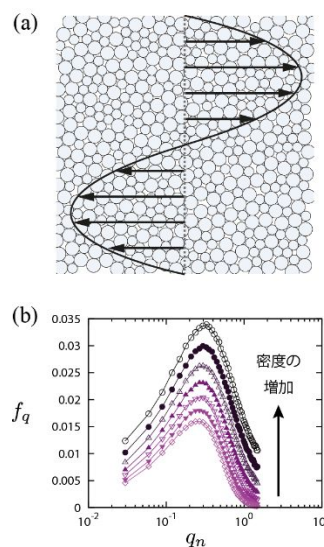


図2：(a)コルモゴロフ流と(b)フルイディティの波数依存性。申請者の分子動力学法より。

よる単純せん断変形を考える(図3(a))。特に、応力のせん断率依存性(つまり粘性)を排除するため、粒子速度を完全に緩和させながら変形させる方法(ファイア・アルゴリズム)を用い、純粋に弾塑性的な応答だけを調べる。この時、粒子系の応力は直線的に増加した後、突然、不連続に減少する「雪崩」を繰り返す。この雪崩が発生する瞬間、粒子系内部では応力ネットワークの大域的な組み換えが起こり(図3(b))、非局所性が顕著に現れる。そこで、粒子同士の相互作用による非アフィンのな変位も考慮した局所的な歪みと局所的な応力を計算し、非局所性の表式に従って歪みの伝搬関数を求める。また、伝搬関数と応力ネットワークの関係を解明し、雪崩発生メカニズムを非局所的な枠組みで説明する。

(3) 粒径分布が非局所性に与える影響

これまで数値計算による粒子系の先行研究では、同じ粒径あるいは二種類の粒径(粒径比1.4倍程度)を用いることが多く、自然界に見られる多様な粒径分布の影響はあまり検証されてこなかった。しかし、断層中の土砂の粒径は冪分布に従うなど、実際は粒径比が大きく異なる場合の方が多い。従って、課題1と2で求めた伝搬関数をより実際的な問題に適用するため、分子動力学法により多分散粒子系のせん断変形を調べる。ここでは、冪分布など様々な粒径分布に従う粒子に対し、振動せん断や単純せん断を与え、粒径分布の種類が粘弾性や弾塑性の非局所的な振る舞いに対して与える影響を明らかにする。

4. 研究成果

粒子系の力学的な応答は粒子のランダムな構造や配置替えにより予測困難なものが多い。特に、粒子系の応力を記述するには、従来の局所的な構成則ではなく非局所的な枠組みが必要になる場合がある。この様な粒子系の非局所性は粒子間の長距離相関に起因しており、マクロな力学応答だけでなく、個々の粒子のミクロな運動まで調べるのが不可欠である。本研究では、分子動力学法を用いて、粒子のミクロな運動から系全体の力学応答を理解するという目標を掲げ、ジャミング転移点近傍での非局所的レオロジーと応力緩和、高密度粒子系の音波特性や塑性変形の確率論的モデル、さらに自己拡散現象とジャミング転移の関係やアバランチに関する成果を上げた。

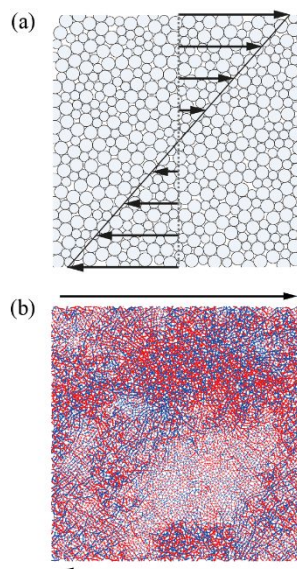


図3 : (a)準静的せん断と(b)応力ネットワークの大域的变化。申請者の分子動力学法より。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計12件（うち査読付論文 12件 / うち国際共著 7件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Saitoh Kuniyasu, Kawasaki Takeshi	4. 巻 8
2. 論文標題 Critical Scaling of Diffusion Coefficients and Size of Rigid Clusters of Soft Athermal Particles Under Shear	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Frontiers in Physics	6. 最初と最後の頁 1~8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fphy.2020.00099	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Mizuno Hideyuki, Saitoh Kuniyasu, Silbert Leonardo E.	4. 巻 4
2. 論文標題 Structural and mechanical characteristics of sphere packings near the jamming transition: From fully amorphous to quasiordered structures	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 1~8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.4.115602	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する
1. 著者名 Saitoh Kuniyasu, Mizuno Hideyuki	4. 巻 17
2. 論文標題 Sound damping in soft particle packings: the interplay between configurational disorder and inelasticity	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 4204~4212
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D0SM02018D	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Saitoh Kuniyasu, Tighe Brian P.	4. 巻 122
2. 論文標題 Nonlocal Effects in Inhomogeneous Flows of Soft Athermal Disks	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.122.188001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Oyama Norihiro, Mizuno Hideyuki, Saitoh Kuniyasu	4. 巻 122
2. 論文標題 Avalanche Interpretation of the Power-Law Energy Spectrum in Three-Dimensional Dense Granular Flow	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.122.188004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Cheng Hongyang, Luding Stefan, Saitoh Kuniyasu, Magnanimo Vanessa	4. 巻 187
2. 論文標題 Elastic wave propagation in dry granular media: Effects of probing characteristics and stress history	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Solids and Structures	6. 最初と最後の頁 85~99
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijsolstr.2019.03.030	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Ikeda Atsushi, Kawasaki Takeshi, Berthier Ludovic, Saitoh Kuniyasu, Hatano Takahiro	4. 巻 124
2. 論文標題 Universal Relaxation Dynamics of Sphere Packings below Jamming	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 1~6
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.124.058001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Saitoh Kuniyasu, Hatano Takahiro, Ikeda Atsushi, Tighe Brian P.	4. 巻 124
2. 論文標題 Stress Relaxation above and below the Jamming Transition	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Letters	6. 最初と最後の頁 1~5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevLett.124.118001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Saitoh Kuniyasu, Shrivastava Rohit K., Luding Stefan	4. 巻 99
2. 論文標題 Rotational sound in disordered granular materials	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Physical Review E	6. 最初と最後の頁 1~12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevE.99.012906	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Saitoh Kuniyasu, Oyama Norihiro, Ogushi Fumiko, Luding Stefan	4. 巻 15
2. 論文標題 Transition rates for slip-avalanches in soft athermal disks under quasi-static simple shear deformations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Soft Matter	6. 最初と最後の頁 3487~3492
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C8SM01966E	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Oyama Norihiro, Kawasaki Takeshi, Saitoh Kuniyasu	4. 巻 9
2. 論文標題 Dynamic Susceptibilities in Dense Soft Athermal Spheres Under a Finite-Rate Shear	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Frontiers in Physics	6. 最初と最後の頁 1~9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3389/fphy.2021.667103	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Saitoh Kuniyasu	4. 巻 44
2. 論文標題 The role of friction in statistics and scaling laws of avalanches	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The European Physical Journal E	6. 最初と最後の頁 1~11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1140/epje/s10189-021-00089-8	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計4件（うち招待講演 2件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 Kuniyasu Saitoh
2. 発表標題 Viscoelastic sound damping in granular materials
3. 学会等名 Granular Matter Across Scales, Lorentz Center, Leiden University, Leiden, The Netherlands, March 18-22, 2019. (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Kuniyasu Saitoh
2. 発表標題 Stress relaxation above and below the jamming transition
3. 学会等名 Shechtman-Suresh Convocation & Honorary Symposium, Aristotle University of Thessaloniki, Thessaloniki, Greece, November 30-December 3, 2018. (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kuniyasu Saitoh
2. 発表標題 Non-local effects in inhomogeneous flows of soft athermal disks
3. 学会等名 Physics of Jammed Matter, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, October 26-27, 2018. (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Kuniyasu Saitoh
2. 発表標題 Non-local flow behavior of soft athermal particles
3. 学会等名 Rheology of disordered particles - suspensions, glassy and granular materials, Yukawa Institute for Theoretical Physics, Kyoto University, Kyoto, Japan, June 18-29, 2018. (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------