

平成22年5月14日現在

研究種目：若手研究（B）  
 研究期間：2007～2009  
 課題番号：19740238  
 研究課題名（和文）非平衡条件下での構造形成におけるミクロダイナミクス・マクロ記述  
 研究課題名（英文）Microscopic Dynamics and Macroscopic Description in Structural Formation under Nonequilibrium Conditions

研究代表者  
 湯川 諭（YUKAWA SATOSHI）  
 大阪大学・大学院理学研究科・准教授  
 研究者番号：20292899

研究成果の概要（和文）：熱が温度の高いところから低いところへ流れているような状態を非平衡状態と言います。非平衡状態は、日常的に目にしますがその物理学的な理解はまだ不十分です。この研究では、そのような非平衡状態における運動の様子と構造の形成、また微視的に見たときの分布の法則の一端を、火山噴火に見られるような急減圧下での気泡生成の物理、熱伝導状態の熱流分布から明らかにしました。この成果は非平衡現象の制御の問題に応用の可能性があります。

研究成果の概要（英文）：Phenomena such as heat transfer are called "nonequilibrium". Physical understanding of nonequilibrium phenomena is still poor, even though the phenomena are ubiquitous in nature. In this study, we investigate dynamics and structural formation under nonequilibrium conditions through computational simulations of bubble nucleation under rapid decompression like volcanic eruptions. In addition, nonequilibrium distribution in a thermal conducting state is also investigated. The results may be applicable to control nonequilibrium phenomena.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,100,000	0	1,100,000
2008年度	700,000	210,000	910,000
2009年度	700,000	210,000	910,000
年度			
年度			
総計	2,500,000	420,000	2,920,000

研究分野：統計物理学・計算物理学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：分子動力学シミュレーション、構造形成、噴霧流転移、非平衡輸送、熱伝導、熱流分布

## 1. 研究開始当初の背景

非平衡条件下での構造形成といえば、ブリュッセルに代表されるブリュッセル学派によ

る「散逸構造」の理論であろう。そこでは、非平衡熱力学を基礎に構造形成を論ずる。また、これとともに発展した反応拡散系に対する研究も、非平衡条件下での構造形成の記述

に数理的な知見を数多く与えてきた。これらの理論的枠組みをもちいて、非平衡条件下での構造形成は非常にうまく説明されており、非平衡条件下での構造形成の物理の理解はかなり進んでいるといってもよいであろう。ただこれらの理論は、いわばマクロな記述であり系のミクロな状態は理論のパラメーターに繰り込まれた形で表現されている。こういった観点から見ると、ミクロな状態が構造形成にあたる影響を理論の枠内で評価するには、少し不向きである。実際、近年の実験および観察において、ミクロな状態が、マクロな構造形成に大きく影響を与えているような現象が発見されており、構造形成の観点からのマクロな理論では現象を説明できないようなものがある。

また研究代表者は、これまでに主として、コンピューターシミュレーションによる非平衡系のダイナミクスと構造形成に関連した研究を行ってきた。そこではミクロな粒子の分子動力学シミュレーションから、マクロな流体现象の再現や、気液共存状態での界面構造の形成、ミクロな化学反応ダイナミクスなどを調べてきた。これらの研究成果によると、マクロな現象や構造を再現するためには、理想的に必要なと思われるアボガドロ数個の粒子が必要なのではなく、現象の状況に応じて、高々数百から数百万、数千万の粒子で十分であることがわかってきた。この程度の規模だと、最近のハイエンドのパーソナルコンピューター上で、少しアルゴリズム上の工夫を行えば、非平衡条件下でのミクロな立場からの構造形成を丸ごと計算機上に載せることが可能となる。

## 2. 研究の目的

本研究ではミクロなダイナミクスが非平衡条件下でのマクロな構造形成にどのように影響を及ぼすのかを明らかにすることを目的とする。特に、申請者の経験を生かし、非平衡条件下での構造形成をミクロな立場からコンピューター上で再現し、その再現からマクロな構造形成への影響を見る。その際、ミクロな構造形成と連続体によるマクロ記述との整合性、および既存のマクロ記述理論へのミクロからの補正を明らかにすることを一つの柱とし研究を行う。さらにそれが明らかになったならば、ミクロな補正を取り込んだ新たなマクロ記述理論の確立を試みる。もちろん、その際に、ミクロ補正があるはずであるといっただけ闇雲に調べても意味がないので、現状でもっとも影響を受けている可能性がある、火山噴火の素過程に見られる極限状況下での構造形成や、岩石中の構造形成などを対象にしたい。対象がこのような地球科学的なものであるといっても、興味の中

心は物理であり、極限的な非平衡条件下における構造形成にかかわる一般的な理解につなげることを念頭に研究を行う。

## 3. 研究の方法

研究方法は、主としてコンピューターシミュレーションの技法を用いた。非平衡条件下での構造形成の問題に対し、噴火現象を模擬するマイクロモデルを構成し、その大規模シミュレーションを行った。

具体的には、以下の通りである。まず噴火現象の本質のみを取り込んだ簡略化した計算機モデルを構築した。この点のミクロな計算機モデルの構築に関しては、予備的な研究により、幾分知見があったのでそれを基本に構築した。そこでは二種類のパラメーターの組で記述される Lennard-Jones 粒子系を、噴火ダイナミクスで主たる役割を果たすマグマ成分及びガス成分に見立てモデル化を行った。このモデルの大規模シミュレーションを様々なパラメーターに対し行った。

また、研究の途中で非平衡系の分布が構造形成などの問題に重要な役割を果たしていることに気づき、熱伝導系をコンピューターシミュレーションで詳細に調べた。ここでも、主としてコンピューターシミュレーションの技法を用いて研究を行った。弾性球相互作用や Lennard-Jones 粒子相互作用を行う粒子を用い、実際に熱が伝導している状態をコンピューター内に微視的観点から再現し、その大規模且つ詳細なシミュレーションを行い分布の測定を行った。

## 4. 研究成果

研究で得られた主たる成果は以下のとおりである。

### (1) 非平衡構造形成について

二成分 Lennard-Jones 粒子モデルを用い、衝撃波管の設定を模擬したシミュレーションを行った。その結果、図 1 にしめすような構造形成のパターンの時間発展を得た。これは、気泡核生成から気泡流の発生、および噴霧流への転移を同時にとらえている世界で初めての成果である。この状態に対し、物理量の計算を行い、それらの振る舞いが一次元一成分の圧縮性流体の記述と矛盾がないことを確認した。さらに非平衡特有の構造があることも見いだした。(図 2) また混合比に対する相図を得た。(図 3)

この成果はこれまでに知られておらず、またコンピューターシミュレーションの手法としても、どこまでできるのかを明らかにしたことで非常に有用である。今後は、類似の手法で様々な非平衡現象の理解に役立つことであろう。

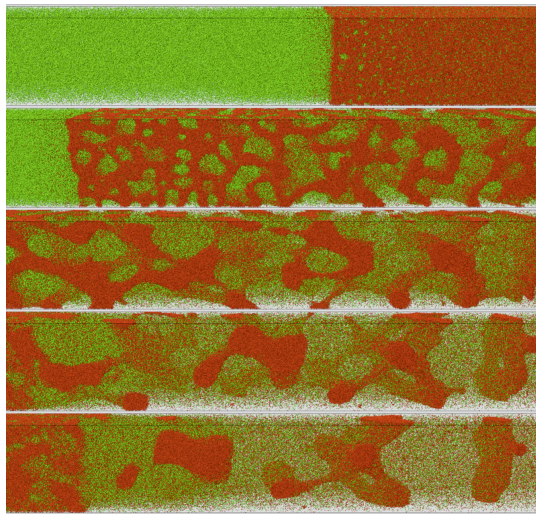


図 1：シミュレーションで得られた、気泡核生成から気泡流、噴霧流への転移のダイナミクスのスナップショット。赤と緑の点が Lennard-Jones 粒子の各成分を表す。

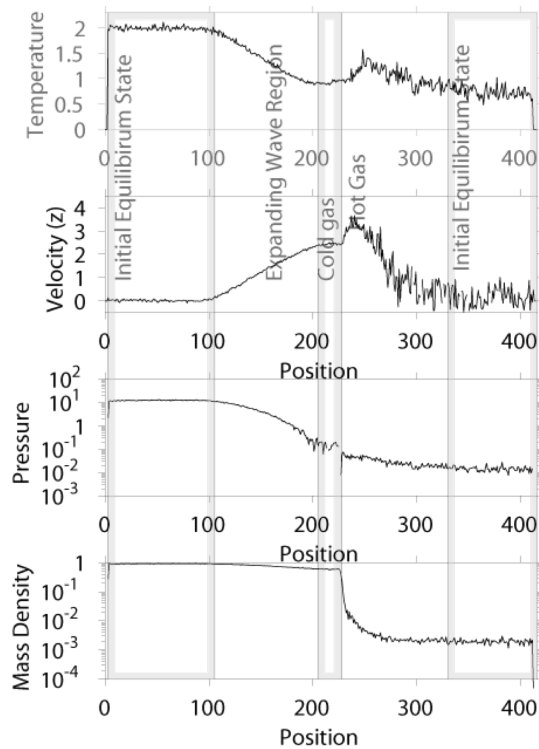


図 2：あるスナップショットに対して計算した物理量の分布。

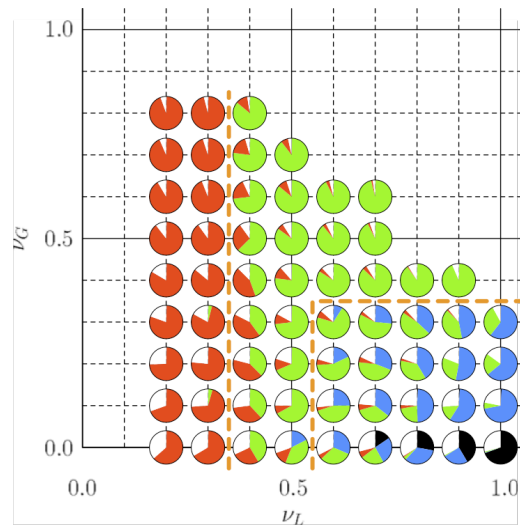


図 3：二つの成分の混合比率に対する流れの様子。横軸は流体成分密度、縦軸は気体成分密度である。黒は一様な流体、青は気泡流、緑はネットワーク流、赤は噴霧流、白はそれ以外である。面積比が相の混合比を表す。

## (2) 非平衡分布について

ヘルツ型弾性相互作用をする三次元粒子系において熱伝導のシミュレーションを行った。この系が正常熱伝導を示すことは古くから知られており、ここでは熱流分布に注目して調べた。その結果、非平衡熱流分布は 3 次のキュムラントが零ではない歪んだ分布をしている事が明らかになり、さらに非平衡熱流分布の正と負のテイルは平衡分布の重ね合わせで漸近的に表現できることがわかった。これは今までに知られていない結果であり、非平衡定常状態の物理学的な理解をより深くする。また新しいとは言え、これまでに知られている分布の法則とも矛盾ない結果なので、真に理解が進んだといえる。実際この成果は注目され、投稿した雑誌の Editors' choice に選出され、科学新聞の 1 面で紹介された。図 3 と 4 に、非平衡熱流分布とそれが平衡分布に等しいことを示すデータを示しておく。また、熱流分布の歪みから運動量分布も平均値は零だが 3 次のキュムラントが零でないことが明らかであり、これが熱泳動のマイクロな起源となることが明らかになった。この分布の新たな描像は、今後様々な発展性が期待できる。

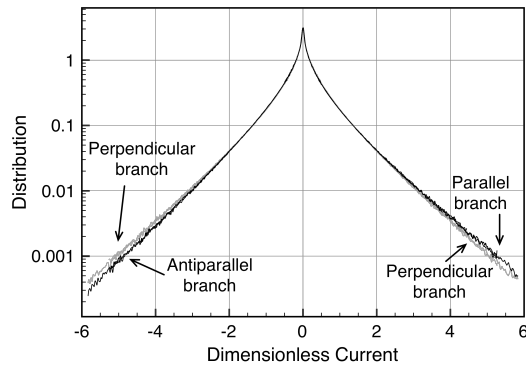


図 3 : 非平衡熱流分布

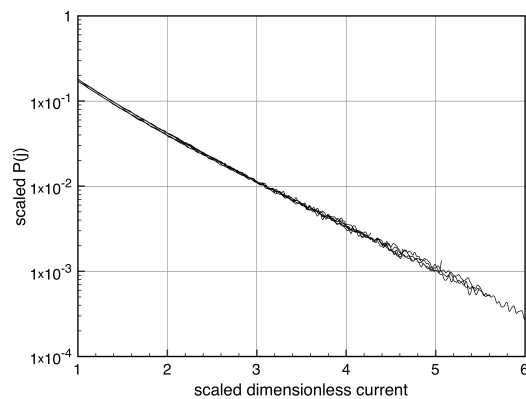


図 4 : 正と負のテイルを平衡分布に従うとしてスケーリングした結果

## 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 6 件)

(1) Hajime Inaoka, Satoshi Yukawa, and Nobuyasu Ito, “Spray flow-Network flow transition of binary Lennard-Jones particle system”, *Physica A*, (2010)、2010 年 2 月掲載決定印刷中。査読あり

(2) Satoshi Yukawa, Takashi Shimada, Fumiko Ogushi, Nobuyasu Ito, “Nonequilibrium Microscopic Distribution of Thermal Current in Particle Systems”, *Journal of the Physical Society of Japan*, 78 (2009) 023002. 査読あり

(3) 小串典子、伊藤伸泰、島田尚、湯川諭、Li Baowen 「3 次元 Lennard-Jones 粒子系における界面構造」物性研究、京都大学基礎物理学研究所、vol. 88, pp. 227-230、2007 年。査読なし

(4) 上田光生、湯川諭 「分子動力学法を用いた多分散系の摩擦シミュレーション」物性研究、京都大学基礎物理学研究所、vol. 88、

pp. 265-268、2007 年。査読なし

[学会発表] (計 19 件)

(1) 稲岡創、湯川諭、伊藤伸泰 「2 成分レナードジョーンズ粒子系の噴霧流-ネットワーク流転移」日本物理学会第 65 回年次大会、2010 年 3 月 21 日、岡山大学津島キャンパス

(2) 岡村諭、山本敦志、湯川諭 「延性破壊シミュレーションにおける熱力学挙動」日本物理学会秋季大会、2009 年 9 月 28 日、熊本大学黒髪キャンパス

(3) 湯川諭、島田尚、伊藤伸泰、小串典子 「熱伝導状態におけるマイクロブラウン運動とソーレ効果」日本物理学会秋季大会、2009 年 9 月 25 日、熊本大学黒髪キャンパス

(4) 山本敦志、湯川諭 「斜め衝突による破壊シミュレーション」日本物理学会秋季大会、2009 年 9 月 25 日、熊本大学黒髪キャンパス

(5) Satoshi Yukawa, “Nonequilibrium Distribution of Microscopic Thermal Current in Steady Thermal Transport Systems” YKIS 2009 “Frontiers in Nonequilibrium Physics: Fundamental Theory, Glassy & Granular Materials, and Computational Physics”, Kyoto, Aug. 12, 2009, invited talk.

(6) 稲岡創、湯川諭、島田尚、伊藤伸泰 「二成分レナードジョーンズ粒子系による噴霧流シミュレーション」日本物理学会第 64 回年次大会、2009 年 3 月 30 日、立教大学

(7) 原野和也、湯川諭 「二次元 Ising モデルを用いた臨界点近傍の熱輸送」日本物理学会第 64 回年次大会、2009 年 3 月 29 日、立教大学

(8) 原野和也、湯川諭 「定常な熱伝導系における Ising 界面運動の現象論的解析」日本物理学会秋季大会、2008 年 9 月 23 日、岩手大学上田キャンパス

(9) 湯川諭、島田尚、小串典子、伊藤伸泰 「熱伝導系における非平衡熱流分布」日本物理学会秋季大会、2008 年 9 月 23 日、岩手大学上田キャンパス

(10) 小松輝久、中川尚子、佐々真一、湯川諭、伊藤伸泰 「非平衡定常系におけるエントロピー測定の数値的検証」日本物理学会秋季大会、2008 年 9 月 23 日、岩手大学上田キャンパス

(11) 稲岡創、湯川諭、島田尚、伊藤伸泰 「Lennard-Jones 粒子系による衝撃波破碎と相分離ダイナミクス」日本物理学会秋季大会、2008 年 9 月 22 日、岩手大学上田キャンパス

(12) 坂本登史文、湯川諭 「DEM-MPS による固液混相流の再現と解析」日本地球惑星科学連合 2008 年大会、2008 年 5 月 25 日、幕張メッセ

(13) 原野和也、湯川諭 「Ising モデルを用いた界面系の熱伝導 II」日本物理学会第 63 回

年次大会、2008年3月24日、近畿大学本部  
キャンパス

(14) 上田光生、湯川諭「多分散系の摩擦シ  
ミュレーション2」日本物理学会第63回年次  
大会、2008年3月24日、近畿大学本部キャン  
パス

(15) Nobuyasu Ito, Fumiko Ogushi,  
Takashi Shimada, and Satoshi Yukawa,  
“Energy Flux Distribution”, 21st  
Workshop “Recent Developments in  
Computer Simulation Studies in Condensed  
Matter Physics” (The University of  
Georgia, Athens, USA, February 20th  
2008)

(16) 湯川諭、島田尚「熱伝導系における熱  
流分布」日本物理学会第62回年次大会、2007  
年9月24日、北海道大学札幌キャンパス

(17) 上田光生、湯川諭「多分散系の摩擦シ  
ミュレーション」日本物理学会第62回年次  
大会、2007年9月24日、北海道大学札幌キ  
ャンパス

(18) 原野和也、湯川諭「Isingモデルを用い  
た界面系の熱伝導」日本物理学会第62回年  
次大会、2007年9月21日、北海道大学札幌  
キャンパス

(19) 湯川諭、伊藤伸泰、「二成分レナード  
ジョーンズ粒子を用いた分子動力学法によ  
る衝撃波管シミュレーション」日本地球惑星  
科学連合2007年大会、2007年5月22日、幕  
張メッセ

〔その他〕(計1件)

(1)新聞掲載

科学新聞2009年2月20日、1面

「定常的な熱伝導状態 新たな分布法則発見  
大阪大学の湯川准教授ら」

6. 研究組織

(1)研究代表者

湯川 諭 (YUKAWA SATOSHI)

大阪大学・大学院理学研究科・准教授

研究者番号：20292899