

平成 22年 5月 31日現在

研究種目： 若手研究 (B)
 研究期間： 2007 ~ 2009
 課題番号： 19740236
 研究課題名 (和文) 粉体気体系の非平衡定常状態における振動応答と統計則

研究課題名 (英文) A New Theoretical Approach for the Response and Statistical Law in the Non-Equilibrium Steady State of Granular Gas

研究代表者

磯部 雅晴 (ISOBE MASAHARU)
 名古屋工業大学・工学研究科・助教
 研究者番号：80359760

研究成果の概要 (和文)：(200 字程度)

粉体気体系は、線形応答理論を越えた局所非平衡系の統計力学を推進する典型的な理想系として理論的発展が大きく期待されている。また、微小重力環境下における粉体気体系の研究は、月面や微惑星上における粉体の輸送や制御の技術確立につながる工学的にも重要な研究課題である。振動することにより生じる流動化やパターン形成など粉体の特性を利用した新産業の創成など、次世代の宇宙産業にも大きな貢献が期待されている。本研究では、粉体気体系の非平衡定常状態の巨視的物理量を記述する新しい振動応答理論を基礎に微小重力環境をも視野に入れた統計則の探求により、理論と分子動力学シミュレーションの双方から、振動応答や輸送現象に関する新しい基礎的方法論を開発 (確立) し、それを拡張 (発展) させた。

研究成果の概要 (英文)：

We propose a novel approach based on a Langevin equation for fluctuating motion of the center of mass of granular media fluidized by energy injection from a bottom plate. In this framework, the analytical solution of the Langevin equation is used to derive analytic expressions for several macroscopic quantities and the power spectrum for the center of mass. In order to test our theory, we performed event-driven molecular dynamics simulations for one- and two-dimensional systems. Energy is injected from a vibrating bottom plate in the one-dimensional case and from a thermal wall at the bottom in the two-dimensional case. We found that the theoretical predictions are in good agreement with the results of those simulations under the assumption that the fluctuation-dissipation relation holds in the case of nearly elastic collisions between particles. However, as the inelasticity of the interparticle collisions increases, the power spectrum for the center of mass obtained by the simulations gradually deviates from the prediction of theoretical curve. Connection between this deviation and violation of the fluctuation-dissipation relation is discussed.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007年度	1,400,000	0	1,400,000
2008年度	500,000	150,000	650,000
2009年度	500,000	150,000	650,000
総計	2,400,000	300,000	2,700,000

研究分野： 計算統計物理学

科研費の分科・細目： 物理学、数理物理・物性基礎

キーワード：粉体振動層、非平衡定常状態、輸送現象、統計則、分子動力学法、ランジュバン方程式、熱浴壁、微小重力

1. 研究開始当初の背景

粉体気体系は局所非平衡系の統計力学を推進する理想系（プロトタイプ）として理論的発展が大きく期待されている。また、微小重力環境下における粉体気体系の研究は、月面や微惑星上における粉体の輸送や制御の技術確立につながる工学的にも重要な研究課題である。振動することにより生じる流動化やパターン形成など粉体の特性を利用した新産業の創生など、次世代の宇宙産業にも大きな貢献が期待されている。

一般に、砂や米のような粉体は、外部から十分に強く揺すられることにより流動化する。継続的に外部から揺すられている（定常的な）流動状態では、粒同士の非弾性衝突や摩擦によるエネルギー散逸と外部からの駆動によるエネルギー流入がバランスしており、一種の非平衡定常状態とみなせる。近年、このような粉体の非平衡定常状態は、非平衡統計物理学の視点から幅広く研究されている。外部からの加振による粉体の流動状態は、対流や表面波、偏析などの様々な現象が生じることが知られており、多くの実験的、理論的研究がなされている。一方で、このような流動化した粉体の重心や内部エネルギーなどの巨視的物質量と、粒子数、粒子間衝突における反発係数、重力加速度、加振の振幅や振動数などのパラメータとの関係を明らかにすることができれば、粉体系の基礎的性質に関する理解が広がり、普遍的な統計則として広範な応用が期待できるため、極めて重要な問題である。

2. 研究の目的

既に実験等では、重心高さのパラメータに

関するスケーリング則が明らかにされているが、この流動状態の性質を説明するための主な理論的なアプローチとしては、最も微視的なスケールでは全粒子の運動を計算機を利用して追いつける分子動力学法、ボルツマン方程式（あるいはエンスコグ方程式）に基づく運動論的方法、それをさらに粗視化した流体力学的方法などが主に用いられてきた。これらの方法は流動状態における様々な現象を説明することに成功しているが、一方で重心高さのスケーリング則の説明においては、異なるアプローチが異なる結果を与えており、実験結果を十分に説明できていない。

最近、研究代表者は、都城高専の若生潤一氏と共同で、流動状態を上記の方法よりさらに巨視的なレベルで記述する新しい現象論的アプローチを提案した。この方法は重心高さについてのランジュバン方程式に基づいているため、その解を用いていくつかの巨視的物質量や重心高さのパワースペクトルを容易に計算することができる。

本研究では、重力場中での粉体気体系における非平衡定常状態を記述する「新しい振動応答理論」を確立し、微小重力環境をも視野に入れた統計則（拡張されたスケーリング則）に関するこれまで得られた成果に着目し、これらを理論とシミュレーションの双方から精密化させることを主目的とした。さらに、微小重力環境や高粘性状態における粉体気体系の振動応答や輸送現象に関する新しい基礎的方法論を開発し、特に高次元系や高密度系に拡張（発展）をさせることを目的として研究を遂行した。

3. 研究の方法

計算物理学におけるアルダー転移の発見以来、剛体球系分子動力学法（イベントドリブン型分子動力学法）は状態方程式や輸送係数を計算するひとつの方法論を与え、近年の高速アルゴリズムや高速計算機の開発により、従来の理論研究の手法であった気体運動論や巨視的な流体力学方程式との直接的な比較が可能となっている。剛体球系で粒子間衝突の際に散逸が伴うと、最も単純な粉体気体モデル（理想粉体系）となる。粉体気体系は、非弾性剛体球に拡張した気体運動論や散逸項を含む流体方程式による理論解析も進んでいる。一方、大規模シミュレーションから特異なクラスター化を起こすことが知られている。微視レベルでのシミュレーション解析は厳密であるが、非平衡特有の巨視的なパターン形成や輸送係数（ロングタイムテール）に関する研究は、空間的なパターンが成長できるほどの大規模長時間計算がこれまで不可能であったため未開拓であった。効率的に研究を遂行するため、非平衡系に適用できる単純な剛体球系の高速アルゴリズム (Isobe,1999)を用い、研究を遂行した。

4. 研究成果

研究成果として、まず初年度に「1次元粉体振動層における基礎的方法論の確立」を行った。また、2年目の「2次元粉体系（系の下方に熱壁を設置したモデル系）への振動応答理論の拡張」の成果を踏まえ3年目に研究を進展させ成果をまとめた。特に顕著な成果として、擬1次元系のイベントドリブン型分子動力学シミュレーションとの比較に基づいて重力と熱浴の相対的強さを系統的に変え、ランジュバン方程式におけるランダム力の強度と摩擦係数の関係を与える（第二種）揺動散逸関係の破れについての詳細な議論を行い、理論の適用範囲を調べた結果、系の密度反転（下方

の密度が、上方のそれよりも低くなる現象）とエネルギー等分配則や揺動散逸定理の破れに強い因果関係があることがわかった。そのため、揺動散逸関係の拘束条件を外し、ランダム力の強度をシミュレーションから見積もるように理論に修正を加えた結果、よい一致を示すことができた。

また、高密度粉体系の輸送現象の統一的理解をめざし、「剛体球系のモラセステール問題」の研究を進展させた。シアストレス自己相関関数の長時間緩和（モラセステール）は、非平衡統計物理学やガラス（ジャミング）転移における重要問題として認識されている。LaddとAlderらは、固相-流動相転移点近傍のモラセステールを研究し、ロングタイムテールの流体力学的起源とは異なる機構（応力場の構造緩和に起因）で生じるという仮説を20年前に立てた。Laddらの研究は、コンピュータの制限により未解決問題となっており、系統的な大規模計算を実行し解明を試みた。その結果、緩和は3つの段階を経ること、緩和の第2段階では様々な緩和時間を持つ結晶核の存在により大きな相関が残ることなどが判明した。また、最大結晶核の崩壊時間や拡散領域の緩和関数などに関して定量的かつ精密なデータを得た。

本研究で得られた成果は、雑誌論文13本（内、招待論文2本、査読付7本）、国内外の講演34件（内、特別・招待・依頼講演10件）等で公表した。

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13件）

1. J. Wakou and M. Isobe, “A New Approach based on Langevin type Equation for Driven Granular Gas under Gravity”, *AIP Conf. Proc. (USA)*, **1227**, pp.135-147 (2010).

【Invited Article】【査読有】

2. M. Isobe and B. J. Alder, “Molasses Tail in Two Dimensions”, *Molecular Physics*, **107**, pp.609-613 (2009). **【Invited Article】【査読有】**
3. J. Wakou and M. Isobe, “A New Approach based on Langevin type Equation for Granular Media Fluidized Vibrations”, *AIP CP (USA)*, **1145**, pp.717-720 (2009). **【査読有】**
4. M. Isobe, “Vortex Flows in Two Dimensions --- The Origin of Hydrodynamic Tail ---”, *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, **178**, pp.72-78 (2009). **【査読有】**
5. M. Isobe, “The Long Time Tail of the Velocity Autocorrelation Function in a Two Dimensional Moderately Dense Hard Disk Fluid”, *Phys. Rev. E*, **77**, 021201 (4pages) (2008). **【査読有】**
6. J. Wakou, A. Ochiai, and M. Isobe, “A Langevin Approach to One-Dimensional Granular Media Fluidized by Vibrations”, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **77**, 034402 (5pages) (2008). **【査読有】**
7. 礪部雅晴, 「分子シミュレーションの夜明け:アルダー転移ーモンテカルロ法と分子動力学法の歴史的発展と応用ー」、統計数理研究所共同研究リポート **210** 「乱数の応用指向特性評価とその周辺 (応用)」 pp.50-56 (2008). **【査読無】**
8. 礪部雅晴, 「非平衡統計物理学と分子シミュレーション」、第4回分子・物質シミュレーション中核拠点形成事業人材育成講座「第2回分子シミュレーションスクールー基礎から応用までー」テキスト, pp.379-396 (2008). **【査読無】**
9. M. Isobe and A. Ochiai, “Statistical Properties of Granular Gas under

Microgravity ---One Dimensional Inelastic Hard Rod System---” *Molecular Simulation*, **33**, pp.147-151 (2007). **【査読有】**

10. 礪部雅晴, 「剛体球系分子動力学シミュレーションー方法論の歴史的発展と大規模シミュレーションへの応用ー」、日本物理学会会誌 (BUTSURI), **62**, pp.748-753 (2007). **【総説】【査読有】**
11. 礪部雅晴, 「Alder 転移前夜:1956年ブリュッセル統計力学国際会議」、分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」, **9**, pp.12-21 (2007). **【総説】【査読有】**
12. 若生潤一、落合昭紀、礪部雅晴, 「1次元粉体振動層の重心運動についての現象論」,物性研究 2007年5月号 Vol.88-2, pp.301-304 (2007). **【査読無】**
13. 礪部雅晴, 「2次元剛体球系の速度自己相関関数とロングタイムテールーAlder-Wainright(1970)の大規模シミュレーションー」, 第17回統計物理学研究会研究報告書 pp.118-135 (2007). **【査読無】**

[学会発表] (計 34 件)

1. 礪部雅晴, Berni J. Alder, 「シアストレス自己相関関数の長時間緩和とモラセステール II」日本物理学会第 65 回年次大会 (岡山大学:岡山) (2010.3.20)
2. 若生潤一, 礪部雅晴, 「重力下粉体気体系の重心運動についての新しい現象論とエネルギー等分配則の破れ」日本物理学会第 65 回年次大会 (岡山大学:岡山) (2010.3.20)
3. M. Isobe and B. J. Alder, “Molasses Tail in Dense Hard Core Fluids”, APS March Meeting (Portland, OR) (2010.3.16)
4. 礪部雅晴, 「非平衡統計物理学と分子シミュレーションー新しい粉体応答理論とその応用ー」地盤工学×粉体工学セミナー 土木学会応用力学委員会「離散体の力学」

- 小委員会 地盤工学会 TC35 国内委員会、
京都テルサ（京都府民総合交流プラザ）
(2010.1.18) 【招待講演】
5. M. Isobe and B. J. Alder, “Molasses Tail in Dense Hard Sphere Fluids”, Conference on Computational Physics 2009 (Kaohsiung, Taiwan) (2009.12.18)
 6. 礒部雅晴, 「非平衡統計物理学と分子シミュレーション—2次元粉体気体の乱流化と統計則—」, 研究集会「乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性」(九大応用力学研究所) (2009.11.13) 【特別講演】
 7. J. Wakou and M. Isobe (Speaker), “A New Approach based on Langevin type Equation for Driven Granular Gases”, IUTAM-ISIMM SYMPOSIUM on Mathematical Modeling and Physical Instances of Granular Flows (Reggio Calabria, Italy) (2009.9.15) 【招待講演】
 8. M. Isobe and B. J. Alder, “Molasses tail in dense hard sphere fluids”, YKIS2009 "Frontiers in Nonequilibrium Physics: Fundamental Theory, Glassy & Granular Materials, and Computational Physics" (Kyoto, Japan) (2009.8.14) 【招待講演】
 9. J. Wakou and M. Isobe, “A New Approach based on Langevin type Equation for Granular Media Fluidized by Vibrations”, Powders and Grains 2009 (Golden, CO, USA) (2009.7.16)
 10. M. Isobe and B. J. Alder, “Molasses Tail in Two Dimensions”, FOMMS2009 (Semiahmoo Resort Blaine, WA) (2009.7.13)
 11. M. Isobe and B. J. Alder, “Molasses Tail in Two Dimensions”, 3rd Mini-Symposium on Liquids (Okayama) (2009.6.20)
 12. 礒部雅晴, 「非平衡統計物理学と分子シミュレーション」 豊田中央研究所 新計算科学セミナー（豊田中央研究所）(2009.5.22) 【依頼講演】
 13. 礒部雅晴, 「非平衡統計物理学と分子シミュレーション」第9回 ACP ワークショップ「非平衡分子シミュレーションとその発展」(東京大学：東京) (2009.4.17) 【招待講演】
 14. 松田博嗣, 礒部雅晴, 「地球対流圏における大気の鉛直温度分布—自由粒子理論と分子シミュレーション—」日本物理学会第64回年次大会（立教大学：東京）(2009.3.30)
 15. 礒部雅晴, Berni J. Alder, 「シアストレス自己相関関数の長時間緩和とモラセステール」日本物理学会第64回年次大会（立教大学）(2009.3.28)
 16. 礒部雅晴, 「2次元剛体球分子動力学における高速アルゴリズムの開発とその応用」日本物理学会第64回年次大会（立教大学：東京）(2009.3.27) 【受賞記念・招待講演】
 17. 若生潤一, 礒部雅晴, 「重力下の2次元粉体気体系への新しい現象論の適用」日本物理学会第64回年次大会（立教大学：東京）(2009.3.27)
 18. 礒部雅晴, 「2次元剛体球系の長時間緩和のこれまでの研究と最近の発展」物性理論シンポジウム（九州大学）(2009.3.14)
 19. 礒部雅晴, 「非平衡統計物理学と分子シミュレーション」三重大学統計物理学コロキウム（三重大学）(2009.3.6)
 20. 礒部雅晴, 「非平衡統計物理学と分子シミュレーション」分子シミュレーションスクール（分子科学研究所）(2008.12.25) 【招待講演】
 21. M. Isobe and B. J. Alder, “Molasses Tail of the Shear Stress Autocorrelation Function”, Computational Science Workshop 2008

- (Tsukuba) (2008.12.9)
22. M. Isobe and B. J. Alder, "Molasses Tail of the Shear Stress Autocorrelation Function", *Unifying Concepts in Glass Physics IV* (Kyoto) (2008.11.26)
 23. 礪部雅晴, 松田博嗣, 「大気の Thermal Wall モデルー分子気象学に向けてー」第 21 回分子シミュレーション研究会 (岡山大学) (2008.11.18)
 24. M. Isobe and B. J. Alder, "Molasses Tail of the Shear Stress Autocorrelation Function", *US-Japan Bilateral Workshop Large-scale Molecular Dynamics Simulation and Related Topics* (UC Berkeley: San Fransisco) (2008.9.25)
 25. 礪部雅晴, 「分子シミュレーションの夜明け: アルダー転移ーモンテカルロ法と分子動力学法の歴史的発展と応用ー」山大セミナー (山口大学) (2008.6.18) 【依頼講演】
 26. 礪部雅晴, 「2次元剛体球系の速度自己相関関数とロングタイムテール II」日本物理学会第 63 回年次大会 (近畿大学: 大阪) (2008. 3.24)
 27. M. Isobe, "Long Time Tail of the Velocity Autocorrelation Function in a Two-Dimensional Moderately Dense Hard Disk Fluid", *APS March Meeting* (New Orleans, Louisiana) (2008.3.12)
 28. 礪部雅晴, 「分子シミュレーションの夜明け: アルダー転移ーモンテカルロ法と分子動力学法の歴史的発展と応用ー」九大凝縮系基礎論講座 II 統計物理学セミナー (九州大学: 福岡) (2008.2.6)
 29. 礪部雅晴, 「2次元剛体球系の速度自己相関関数とロングタイムテール」 [CREST JST] 第二回 MSS セミナー@米沢 (山形大学: 米沢) (2008.2.1) 【依頼講演】
 30. 礪部雅晴, 「分子シミュレーションの夜明け: アルダー転移ーモンテカルロ法と分子動力学法の歴史的発展と応用ー」, 平成 19 年度統計数理研究所 乱数重点型共同研究第 2 回研究会 乱数の応用指向特性評価とその周辺 (応用) (統計数理研究所: 東京) (2008.1.5) 【特別講演】
 31. M. Isobe, "The Event-Driven Molecular Dynamics Method", *Special Session "The 50th anniversary of the Alder transition"*, 第 21 回分子シミュレーション討論会 (金沢: 石川) (2007.11.28) 【特別講演】
 32. M. Isobe and T. Y. Petrosky, "Long time tail of the velocity auto-correlation function in two-dimensional hard disk fluid", *Conference on Computational Physics 2007* (Brussels, Belgium) (2007.9.6)
 33. M. Isobe and T. Y. Petrosky, "Long time tail of the velocity auto-correlation function in two-dimensional hard disk fluid", *STATPHYS 23* (Genova, Italy) (2007.7.10)
 34. J.Wakou, A.Ochiai, and M.Isobe(Speaker), "A Phenomenological Theory for Vibration Response in One-dimensional Granular Gas", *SATELLITE MEETING of STATPHYS 23 on "Statics and dynamics of granular media and colloidal suspensions"* (Napoli, Italy) (2007.7.5)
- [その他]
ホームページ等
<http://stat.fm.nitech.ac.jp/~isobe>
6. 研究組織
(1) 研究代表者
礪部 雅晴 (ISOBE MASAHARU)
名古屋工業大学・工学研究科・助教
研究者番号: 80359760