

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 6 月 11 日現在

機関番号：15101

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24540404

研究課題名(和文) 統計力学と流体力学のコラボレーションによる塑性流動と乱流の新理論の展開

研究課題名(英文) Collaboration of statistical mechanics and fluid mechanics for development of new theories of plastic flows and turbulence

研究代表者

大信田 丈志(OOSHIDA, Takeshi)

鳥取大学・工学研究科・助教

研究者番号：50294343

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,900,000円

研究成果の概要(和文)：塑性流動の微視的理論に将来的な基礎付けを与えるべく、Lagrange相関すなわちラベル変数の方法を流体乱流から濃密コロイド系の統計理論に持ち込むというアイデアを検証し発展させた。このアイデアが有用である証拠として1次元コロイド系の一列縦隊拡散における時空4点相関を解析的に計算し、さらにラベル変数の方法は2次元系にも拡張可能であることを示した。

研究成果の概要(英文)：In order to lay a future foundation for a microscopic theory of plastic flows, an idea of importing the Lagrangian correlation, also known as the label variable method, into the statistical theory of dense colloidal liquids from the theory of fluid turbulence was tested and developed. The usefulness of this idea was demonstrated by analytical calculation of four-point space-time correlations in single-file diffusion in one-dimensional colloidal systems; besides, the label variable method is shown to be extensible to the two-dimensional cases.

研究分野：物理学(特に流体物理学およびレオロジー)

キーワード：Lagrange記述 コロイド 乱流 相関関数 応答関数 モード結合理論 協同運動 非平衡統計力学

1. 研究開始当初の背景

(1)我々人間が目で見たり肌で感じたりできる様々な物の性質や仕組みを、ミクロな物理法則にさかのぼって理解しようとする試みが、過去数百年、営々と続けられてきた。ミクロな粒子一個の性質が分かればよい場合も稀にはあるが、多くの場合はそうではなく、多数の粒子の集合体について統計的な挙動を解明する必要がある。

①この方面での最も古い成功例は気体分子運動論であり、やがて統計物理の方法は、特に結晶固体の物性において華々しく発展した。金属や半導体の硬さや電気的性質が計算できるようになり、また、たとえば鉄が室温では磁石になるが熱すると磁性を失うことに関し、境目ぎりぎりの温度で起きる現象（臨界現象）が解明された。

②しかしこれに比べると、液体や非結晶固体などでの統計物理の研究は大幅に出遅れざるを得なかった。気体と違って多数の粒子同士が常にとりあって互いの動きを妨げている上に、結晶と違って粒子の配置が不規則なので、明らかに難しい問題なのである。それでも、近年の実験技術および数値計算の進展とそれに支えられた理論的研究により、非結晶固体などの性質や仕組みをも統計物理の方法で解明しようとする機運が高まっていた。

(2)非結晶固体やそれに近い物質は我々の身のまわりに多数存在するが、それが液体とどう違うのか、どうやって液体から非結晶固体に変わるのかという「ガラス転移」の問題は、古くからの難問である。たとえばコップを作るには熔融ガラスを冷やして固めることになるが、融けたガラスはもちろんのこと、固まったガラスにおいても粒子配置は乱れている。粒子配置はほとんど液体と同じなのに、固体的な性質が生じるのはなぜか？この問題を統計物理の観点でとらえる機運が高まるとともに、過冷却液体だけでなく濃密コロイド系や粉体などのソフトマターをも含めた、広い意味でのガラス系についての研究が関心を集めるようになった。その特徴は、一方では地震から化粧品に至るまで幅広い分野への応用を視野に入れつつ、他方では、ちょうど統計物理の先人たちが磁性が残るか消えるかの境目に迫ったのと同じ視点で、ガラスが固まるか流れるかの境目に迫ろうとする点にある。

①磁性体のモデル（原子サイズの小さな磁石の集合体に対する統計理論）で臨界現象を考える際には「相関」という概念が重要な役割を果たした。相関とは、たとえば「位置Aの小磁石が上向きであるなら、位置Bの小磁石の向きはどうなっている可能性が高いか？」を示すものである。相関がゼロならBの小磁石の向きはAの小磁石の向きとは無関係、相関がプラスなら同じ向きを向いている可能性が高いことになる。磁性体が全体として磁石になるか否かの境目では、多数の小磁石が徒党を組むかのような振る舞いが見られ、これを相関関数によってとらえるのが決定的に重要なステップであった。

②ガラス系では、粒子の運動に立脚した理論として「モード結合理論 (mode coupling theory = MCT)」が注目を集めた。ガラス系のMCTは、密度のFourier表示に対する時間的な相関関数の非線形方程式という形を取り、パラメータの変化に応じて相関関数の緩和が劇的に遅くなるという形で、流動性の減少する様子を示すことに成功している。しかしMCTの示す転移点は本物のガラス転移点ではなく、それよりも常に高温側（液体側）に現れるような、言わば偽の転移であることなど、MCTの欠点も指摘され、その改良の方法をめぐって活発な議論が続いていた。

③そもそもガラス系では粒子が互いの運動を邪魔しあうので、勝手な運動は許されず、粒子が動くには協力し徒党を組んで動くしかない。徒党を組んだ動きをとらえるには磁性体の場合にならって空間的な相関を考えれば良さそうだが、それだけではうまくいかず、時間相関と空間相関の両方を同時に考慮する必要があることが明らかになった。つまり

★ 時刻 t_1 に位置Aには粒子がいたか？

★ 時刻 t_1 に位置Bには粒子がいたか？

★ 時刻 t_2 に位置Aには粒子がいるか？

★ 時刻 t_2 に位置Bには粒子がいるか？

という時空の4点の情報に基づく相関を計算しなければならない。大規模な数値計算により、時空4点相関によって「徒党を組む動き」が検出できることが確かめられたが、数値計算によらずMCTなどの理論的な方法で4点相関を計算することは困難であった。

(4)身近なガラス系の代表例のひとつに、粉を水でといて泥状にしたもの（ペースト）があ

る。練り歯磨き粉などの実例を見れば分かる
とおり、ペーストは、水分が多い状態（スラ
リー状態）では通常の液体のように流れるが、
水分を減らすにつれて流動性を失って固体化
する。この過程は結晶化を伴わないので、ガ
ラス転移の仲間である。さらに、固化した状
態のペーストに外力を加えると、外力が小さ
いうちはペーストは固体状態のままだが、外
力がある閾値を超えると流動し非回復変形を
生じる。これが塑性流動であり、現象論的な
モデルは20世紀前半にまでさかのぼる一方、
その微視的機構の理解はガラス転移そのもの
の理解に直結する難問である。しかし近年に
なつてガラス系の統計物理に関する関心が高
まるとともに、塑性流動の研究にも新たな光
が投げかけられるようになった。

(5)ペーストを浅い皿に入れて乾燥させる実験
において、塑性流動による記憶効果が発見さ
れ、その機構の解明が課題となっていた。実
験で見つかったのは次のような現象である：
ペーストを皿に入れたあと短時間のあいだ（た
とえば60秒程度）適度な外力を加えて皿を水
平方向に揺すり、そのあと静置乾燥によって
数十時間後に生じる亀裂パターンを観察する
と、揺すった方向に従って顕著な異方性が生
じる。この現象は塑性がないと起きないこと
が実験的に確かめられ、また中原らによる科
研費プロジェクト〔基盤 (B) 22340112〕
において知見が蓄積されつつあった。

(6)上記のペーストの記憶効果の実験に触発さ
れ、その理論的な解明を考えるなかで、本研
究代表者（大信田）は、流体力学の乱流理論
で用いられている手法をガラス系に持ち込む
可能性に着目した。これは「Lagrange記述」
あるいは「ラベル変数の方法」と呼ばれる手
法である。乱流の研究の分野では、MCTに
似た、速度の時間相関関数に対する直接相互
作用近似という理論が作られているのだが、
ここで通常の変数（Euler記述）による相関
関数を用いると実験と合わない結果が出るの
に対して、Lagrange記述で相関関数を求める
と実験と合うのである。Lagrange記述とは
流体要素に仮想的なラベルを貼ってそのラベ
ルを追跡する方法であり、これにより乱流中
の渦構造自体の変化に焦点を当てることが可
能になる。

(7)上記のアイデアに基づく科研費プロジェ
クト「塑性流動の新理論に向けての統計力学
と流体力学のコラボレーション」〔基盤 (C)
21540388〕が採択され、2009年から2011
年まで、本研究代表者を含む5名の共同研究
が進められた。この共同研究は、同じくラン
ダム系を扱う乱流の理論とガラス系の理論の
コラボレーションにより、MCTの改良、ひ
いては塑性流動の微視的解明につながるよう
な、その土台となる新理論の構築を目指すも
のであった。その結果、流体力学における
Lagrange記述に相当するものをコロイド系
の記述に持ち込んだ理論を構築し、その有効
性を示すことに成功した。具体的には、コロ
イドのモデルとして、斥力相互作用する1次
元Brown粒子系の挙動（SFD = Single-File
Diffusion）を扱い、この系における遅い拡
散、すなわち平均二乗変位が経過時間 t に比
例するのではなく t の平方根に比例するとい
うSFDの特徴を、係数まで含めて正しく導出
できることを示した。さらに、遅い拡散の背
後にある協同運動の様子を解析的に求めるこ
とも成功した。したがって、この方法を発
展させ、MCTなどの既存の方法と融合させる
ことができれば、非常に有用なものとなる可
能性が見いだされた。

2. 研究の目的

(1)既に述べたとおり、2011年までの科研費
プロジェクト「塑性流動の新理論に向けての
統計力学と流体力学のコラボレーション」〔基
盤 (C) 21540388〕により、SFDという1
次元の例題の枠内ではあるが、流体力学の手
法であるラベル変数の方法をガラス系の統計
理論に持ち込む発想の有効性が示された。こ
の成果を発展させ、2次元以上の場合への適
用や、MCTとの融合について検討する。

(2)他方では、将来的にペーストの構成関係式
を微視的に導出できるようにするための土台
として、乱流理論をも含む非平衡統計力学の
進展を目指す。特に、相関関数と並んで重要
な役割を果たすと考えられる「応答関数」に
ついての知見を得る。

(3)そもそもの研究の発端となったペーストの
実験において、記憶されているはずの異方性



図1: 第28回セミナー。左上が講師の池田氏。

を、乾燥破壊以外の方法で検出することを試みる。これにより、加振後にペーストに残る記憶の正体を解明し、またはそれにつながる手がかりを得る。

3. 研究の方法

(1)旧プロジェクト〔基盤 (C) 21540388〕での経験を踏まえ、実際に5名または6名のメンバーが一堂に会して議論することを重視し、3年間に14回(旧プロジェクトも含めると6年で31回)のセミナーを実施した。

①セミナーでは、研究の進捗状況や数値計算の報告、理論的な計算ノートの内容確認、論文原稿の推敲、新たな着想などについて徹底的な議論を行った。また必要に応じて外部から講師を招き、ガラス系や他の関連分野についての最新の知識を得るとともに、我々の研究成果に関する簡単な研究発表を行った。たとえば通算第21回のセミナーには川崎猛史氏、第28回には池田昌司氏(図1)を講師に招き、いずれも貴重な示唆を得た。

②夏には2泊3日の研究合宿を開催した。講師を招いて密度の高いセミナーを行うとともに、論文の内容や研究方針について相談し、さらに数値計算プログラムの開発を行った。

③毎年秋または冬には「鳥取非線形研究会」を開催し、ガラス系や流体・粉体は言うに及ばず、微生物やプラズマ、さらにはメモリ素子の研究者をも含む多彩な講演者を迎えて議論を行った。特に2012年10月にはインドおよびハンガリーからの参加者があり、英語で研究会を運営した。一連の研究会において、一見すると無関係に見える話が実は密接に関連していたり互いにヒントになったりすることが多く、長い目で見て統計物理の発展に大いに資するところがあったと思われる。

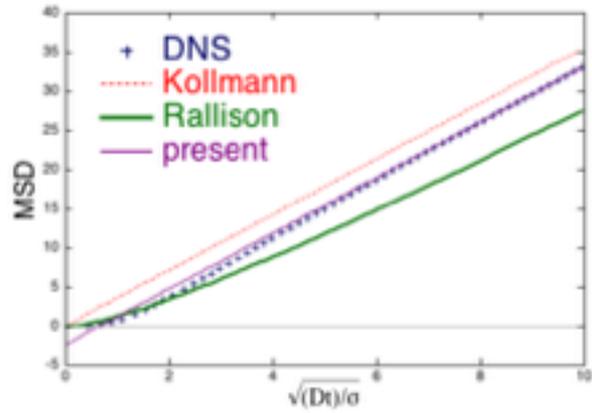


図2: SFDの平均二乗変位(MSD)についての理論式の検証。横軸は t の平方根を無次元化したもので、本研究による理論("present"で示す)は切片のある直線になる。これと粒子系の直接数値計算(DNS)を比較すると、原点近傍(短時間領域)に限ってはRallisonの理論のほうがよく一致しているが、それ以外の領域では本研究のほうがよく一致している。

(2)コロイド粒子系の数値計算および乱流モデルの数値計算を実行し、理論と比較した。数値計算においては、可能な限り複数名による独立なプログラムの結果を比較することで、ミスが紛れ込むのを防ぐようにした。

①既に導出したSFDの理論を検証すべく、平均二乗変位や変位相関などの統計量を計算した。プログラムは大信田によるプロトタイプと後藤による大規模数値計算用のものを別々に開発し、結果に矛盾が出なくなるまで問題点の洗い出しを続けた。

②SFDでの統計量の計算を2次元のコロイド粒子系に拡張する方法についてセミナーで議論し、その結果に基づいて、大槻と後藤が別々にプログラムの開発を行った。

③乱流における応答関数について、Harada-Sasa理論の適用の可否を問う数値計算を進めた。結果の信頼性に関しては松本のプログラムと大信田による検証プログラムを比較した。

(3)ペーストの記憶効果を破壊前に検出する可能性について、中原と狐崎が実験を行った。基本的アイデアは、ペーストを入れた容器の一部に板バネを仕込むことで、応力や歪みに現れる異方性を検出するというものである。

4. 研究成果

(1)ラベル変数を用いたSFDの理論を拡張し、MCTと組み合わせることに成功した。これによる計算結果を図2に示す。旧来の理論

と比較すると、この場合のMCTの非線形項はKollmannの理論に対する有限時間補正を与えるものであることが分かった。ごく短時間の領域に限ればRallisonによる先行研究のほうが良い結果を与えるが、それ以外の領域ではRallisonの理論は過剰補正となり本研究の結果のほうが良いことが図2から分かる。

(2)ラベル変数の方法を2次元に拡張することに成功した。もともと我々の手法に対しては、それは1次元限定の理論ではないか、という批判があった。1次元系では粒子の並んだ順に番号を振ることができるので理論が簡単になるが、2次元の非結晶でその手が使えないのは致命的なのでは？という批判である。我々は、番号づけに頼らずにLagrange相関を定義できる枠組みをまず構築し、その枠組みを用いて、コロイド粒子の相互作用に対する方程式を導出した。さらに従属変数の取り方を工夫し、変形勾配テンソルの相関関数と応答関数に対する方程式系を導出した。

(3)粒子が協同的に動く様子を表す統計量として、我々は時空4点相関を解析的に計算することに成功した。

①SFDにおいて我々がまず計算したのは変位相関という量である。ラベル変数の方法により「粒子があるかないか」ではなく「粒子がどれだけ動いたか」に着目することが可能になり、4点相関を2体相関に直して解析的に扱うことが可能になった。

②さらに、変位の分布関数に関してある仮定を置くことにより、今まで代表的な時空4点相関として数値的に求められてきた χ_4 という量を解析的に計算した。

③変位相関を2次元に拡張し、ある近似の範囲内で解析的な計算をおこなった。これにより、コロイド系の数値計算で見られる渦状の協同運動を、少なくとも定性的に再現できることが分かった。

(4)塑性流動の解明のためには、濃密コロイド系に剪断をかけた場合の非平衡定常状態を知る必要があるが、非平衡定常状態では相関と応答の関係式が平衡系と異なるという事情がMCTの適用を困難にしている。他方、流体乱流においては低波数での外力と高波数領域での散逸がつりあった非平衡定常状態が実

現されるので、乱流において応答関数を計算し、相関関数との関係がどうなるのかを問う問題が重要な試金石となる。

そこで我々は、乱流の力学モデルであるシェルモデルに微小な揺動力を加えた系について、非平衡系の応答関数と相関関数を関係づけるHarada-Sasa関係式を流体乱流に対して適用できる可能性を問う研究を進め、一定の制約の範囲内ではあるが数値的に良好な一致が得られることを確認した。

(5)水平加振を受けたあと乾燥によって固化しつつあるペーストにおいて、レオロジー的な測定実験による異方性の検出を行った。当初デザインした実験装置では、板バネやサンプルのバラつきなどの誤差に埋もれて歪みや応力の異方性の測定は困難であることが分かり、その知見をふまえて実験装置を改良した結果、ついに亀裂発生前に異方性を検出することに成功した。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 (計8件)

- ① Ooshida T., S. Goto, T. Matsumoto, & M. Otsuki: “Displacement correlation as an indicator of collective motion in one-dimensional and quasi-one-dimensional systems of repulsive Brownian particles”, *Modern Physics Letters B* (掲載号未定・2015年6月4日掲載決定) [査読あり]
- ② 中原明生・松尾洋介・大信田丈志: 「ペーストの記憶効果と破壊の制御への応用」*日本物理学会誌* 第70巻 pp. 179-187 (2015) [査読あり]
<http://www.jps.or.jp/books/gakkaishi/2015/03/703.html>
- ③ T. Matsumoto, M. Otsuki, Ooshida T., S. Goto, & A. Nakahara: “Response function of turbulence computed via fluctuation-response relation of a Langevin system with vanishing noise”, *Physical Review E* **89** (2014) 061002(R) [査読あり]
DOI: 10.1103/PhysRevE.89.061002
- ④ Ooshida T., S. Goto, T. Matsumoto, A. Nakahara, & M. Otsuki: “Analytical calculation of four-point correlations for a simple model of cages involving numerous particles”, *Physical Review E* **88** (2013) 062108 [査読あり]
DOI: 10.1103/PhysRevE.88.062108
- ⑤ 大信田丈志・大槻道夫・後藤晋・中原明生・松本剛: 「ガラス系の統計理論に対する流体屋のアプローチ」*数理解析研究*

所講究録 第1822巻 pp. 109-139 (2013)
〔査読なし〕

〔学会発表〕 (計22件)

- ① 大信田丈志・大槻道夫・後藤晋・松本剛：“Analysis of generalized Leutheusser equation involving a zero-frequency mode”, 日本物理学会 第70回年次大会, 2015年3月23日 早稲田大学 (東京都)
- ② 狐崎創・中原明生・松尾洋介：「記憶効果による応力異方性の検出 (II)」日本物理学会 第70回年次大会, 2015年3月21日 早稲田大学 (東京都)
- ③ 狐崎創・中原明生・松尾洋介：「記憶効果による応力異方性の検出」日本物理学会2014年秋季大会, 2014年9月9日 中部大学春日井キャンパス (愛知県)
- ④ 大信田丈志・大槻道夫・後藤晋・中原明生・松本剛：「コロイド系におけるテンソル的な相関」日本物理学会2014年秋季大会, 2014年9月7日 中部大学春日井キャンパス (愛知県)
- ⑤ T. Ooshida *et al.*: “Analytical calculation of four-point correlations as indicators of collective motion in one-dimensional and two-dimensional systems of repulsive Brownian particles”, *SigmaPhi2014: International Conference on Statistical Physics 2014*, 2014年7月10日 Rhodos (ギリシア)
- ⑥ Ooshida T. *et al.*: “Collective motion in dense colloidal suspensions calculated with a two-dimensional version of the Alexander-Pincus formula in a convected coordinate system”, *Majorana Centre Conference: Single file dynamics in biophysics, physics and related fields and extensions in higher dimensions*, 2014年7月5日 Erice (イタリア)
- ⑦ 大信田丈志ほか：「ラベル変数による2次元粒子系の変位相関と平均二乗変位の計算」日本物理学会第69回年次大会, 2014年3月28日 東海大学湘南キャンパス (神奈川県)
- ⑧ 大信田丈志ほか：「2次元コロイド粒子系における変位相関テンソルの計算」日本物理学会2013年秋季大会, 2013年9月25日 徳島大学 (徳島県)
- ⑨ 松本剛ほか：「統計的定常乱流におけるランダム外力を經由した揺動応答関係」流体力学学会年会2013, 2013年9月12日 東京農工大学 (東京都小金井市)
- ⑩ Ooshida Takeshi *et al.*: “Mode-coupling theory of single-file diffusion”, *Physics of glassy and granular materials*, 2013年7月17日 基礎物理学研究所 (京都府)
- ⑪ 大信田丈志ほか：「濃密コロイド粒子系での拡散に対する密度相関の完結近似理論とRallisonの現象論の比較」第11回日本流体力学学会中四国九州支部総会・講演会,

2013年6月16日 広島工業大学 沼田校舎 (広島県)

- ⑫ Ooshida Takeshi: “Kraichnan-like derivation of mode-coupling theory for transient and asymptotic behavior of single-file diffusion”, *Discussion Meeting: Current Topics in Statistical Mechanics*, 2013年1月4日 New Delhi (インド)
- ⑬ 大信田丈志ほか：「一列縦隊拡散における動的空間相関」日本物理学会 第68回年次大会, 2013年3月26日 広島大学 (広島県東広島市)
- ⑭ 大信田丈志・大槻道夫・後藤晋・中原明生・松本剛：「斥力的1次元Brown粒子系の異常拡散と動的秩序構造」日本流体力学学会年会2012, 2012年9月16日 高知大学 (高知県)

〔その他〕

「塑性コラボ」WWWサイト

<http://www.damp.tottori-u.ac.jp/~ooshida/collab/>

6. 研究組織

(1)研究代表者

大信田 丈志 (OOSHIDA Takeshi)
鳥取大学・工学研究科・助教
研究者番号：50294343

(2)研究分担者

中原 明生 (NAKAHARA, Akio)
日本大学・理工学部・准教授
研究者番号：60297778

後藤 晋 (GOTO, Susumu)
大阪大学・基礎工学研究科・准教授
研究者番号：40321616

松本 剛 (MATSUMOTO, Takeshi)
京都大学・理学研究科・助教
研究者番号：20346076

大槻 道夫 (OTSUKI, Michio)
島根大学・総合理工学研究科・講師
研究者番号：30456751

(3)連携研究者

狐崎 創 (KITSUNEZAKI, So)
奈良女子大学・自然科学系・准教授
研究者番号：00301284