

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2007～2010

課題番号：19340110

研究課題名（和文） 非平衡現象の計算統計物理学的研究

研究課題名（英文） Computing statistical physics study on nonequilibrium phenomena

研究代表者

伊藤 伸泰 (NOBUYASU ITO)

東京大学・大学院工学系研究科・准教授

研究者番号：70211745

研究成果の概要（和文）：

本研究では、分子運動に基づく線形非平衡状態の解明および非線形非平衡現象の実現を目標とし、さらに現実の世界の複雑多様さを数理的および物理的に取り扱う可能性を精査した。その結果、線形非平衡状態とは熱力学量が分子運動の方向に依存した分布関数により記述されることが明らかとなった。また非線形非平衡現象が数百万で再現されることも明らかとなった。さらに分子とは異なる要素を現象論的に構成した研究により、材料の経年劣化による破壊では寿命が系の大きさにべき的に依存することを発見し、また生態系や自由経済社会の多様性が引き延ばされた指数分布で記述されることが発見された。

研究成果の概要（英文）：

In this research project, linear and nonlinear nonequilibrium phenomena are studied based on molecular motion. It was shown that local distribution function depends on direction of molecular motion, and that nonlinear nonequilibrium phenomena could be reproduced using millions of particles. Thermally activated breakdown of some material under subcritical stress was studied using phenomenological model elements, and power-law dependence of its life time on material size was shown. Studies on variety and diversity of ecosystem and econosystem discovered that they are characterized by a stretched exponential distribution with exponent 1/2.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2007 年度	9,100,000	2,730,000	11,830,000
2008 年度	1,800,000	540,000	2,340,000
2009 年度	1,900,000	570,000	2,470,000
2010 年度	1,900,000	570,000	2,470,000
年度			
総計	14,700,000	4,410,000	19,110,000

研究分野：数物系化学

科研費の分科・細目：物理学・数物物理・物性基礎

キーワード：非平衡現象、熱伝導、異常輸送、動的臨界現象、普遍性、非平衡緩和法、双極子相互作用、非平衡シミュレーション、輸送現象、相転移、生態系、進化、電気伝導、

## 1. 研究開始当初の背景

物質の挙動をその構成要素である原子・分子の運動に基づいて記述することが統計力学

の目標である。これまでに巨視系の熱力学的挙動については大きな成功を納めており、現代の物性科学・材料工学の発展がもたらされ

たことは周知の通りである。統計力学が黎明期から今日に至るまで目標としているのは、熱平衡状態から離れた非平衡状態での挙動である。こうした試みは、熱平衡統計力学が確立する以前、例えばマクスウェルの気体分子運動論やボルツマン方程式から続けられている。その後、線形非平衡状態はアインシュタイン関係・オンサーガー相反関係に始まる現象論的研究が大きな成果を挙げ、線形応答の久保理論として体系化された。にもかかわらず線形輸送現象を、現象論的にではなく、ミクロな運動から導くことは困難で、輸送特性が重要となるような物質工学の隘路となっていた。

今世紀に入りナノテクノロジー・バイオテクノロジー研究が急成長をはじめるとメソスケールでの輸送や機能が大きな問題となり、その解決が重要と考えられはじめて久しい。にもかかわらずそれに答えるべき統計力学理論は巨視系の線形輸送の前で1世紀以上足踏みを余儀なくされていた。

線形輸送現象の典型は熱伝導現象である。巨視的現象論であるフーリエの法則は1810年頃に確立した。これを分子運動に基づいて再現する試みが続けられてきたが、外部ポテンシャルを仮定するなどした半現象論的なモデルで再現するに留まっていた。これに対して本研究代表者らは近年、計算機と分子動力学シミュレーションを使った研究の進展を背景として、この問題の再検討を行い、線形輸送現象のミクロダイナミクスからの再現に成功した(熱伝導[1,3], 粘性率[2], 電気伝導[4])。これらの成果はミクロダイナミクスに基づいた非平衡現象の究明に道を開いた。

本研究の開始に当たっては、こうした成功により突破口が拓かれた非線形非平衡現象の統計物理学的研究に注目が集まっていた。

[1] T. Shimada, M. Murakami, S. Yukawa and N. Ito,

J. Phys. Soc. Jpn. 69 (2000) 3150

[2] T. Ishiwata, T. Murakami, S. Yukawa and N. Ito, Intern. J. Modern. Phys. C15 (2004) 1413

[3] F. Ogushi, S. Yukawa and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005) 827

[4] T. Yuge, A. Shimizu and N. Ito, J. Phys. Soc. Jpn. 74 (2005) 1895

## 2. 研究の目的

上述のようにして本研究代表者らにより拓かれた、ミクロダイナミクスに基づく非平衡現象の究明の可能性を発展させることにより、これまで経験的な現象論に頼っていた工学・科学の諸問題に対しこれまでの限界を超える新技術による新展開が期待される。と同時に、いわゆる「マルチスケール・マルチフィジックスシミュレーション」に確たる基礎を与えるものと期待される。

本研究の目標は、こうした応用研究の基礎となる非平衡現象の計算機シミュレーションをさらに発展させ「計算機エミュレーション」にまで高めることである。

## 3. 研究の方法

本研究を支える方法論の柱は、計算機シミュレーションである。何粒子を何ステップ計算できるか、その規模が研究の競争力の主な源泉となる。数万から百万粒子程度で線形非平衡状態の解析が可能となることを解明した本研究発足までの研究成果を踏まえ、本研究では、数百万粒子から数千万粒子規模のシミュレーションにより非平衡状態の再現・精査を試みることにした。これまでに培った世界最高速級の分子動力学シミュレーション技術をこの規模のシミュレーションに活用するために、まず初年度に理論性能が627 GFLOPSの並列計算機を導入した。この計算機は、それぞれAMD Opteron 2220 プロセッサ

を各2個・記憶回路2GB(主ノードのみ4GB)を搭載したラックマウント型1Uサイズの計算機ノード14台をギガビットのイーサネット2系統で結んだものである。

この並列計算機および合わせて整備したグラフィックワークステーションを使って、非平衡分子動力学シミュレーションほかにより非平衡現象を理論的に解析し、非平衡状態を究明した。

#### 4. 研究成果

本研究の結果、まず線形非平衡状態がどのような状態であるのかを明らかとした。線形非平衡状態を統計物理学的に扱う方法として確立していたのは久保の線形応答理論であったが、これは局所の熱平衡分布の線形摂動を仮定していた。本研究の研究により、この描像の限界と実際の非平衡分布関数とが明らかとなった。フーリエ則に従って熱を伝えている状態を非平衡分子動力学シミュレーションにより再現し、局所分布関数を解析した。その結果、線形応答理論の仮定しているような温度勾配・熱流による線形摂動は概形としてはよい近似ではあるが、実際には温度他の熱力学量が分子運動の向きに依存した分布となっていることが明らかとなったのである。この成果論文③は日本物理学会の注目論文賞を受賞した。この成果は、非平衡状態を理論的に扱う時の精密な出発点を与えると同時に、非平衡下での材料・素子の設計・製造に新しい洞察を与えるものと期待される。

線形非平衡状態の分子動力学シミュレーションを非線形非平衡状態へと進めることにも成功した。本研究で導入した並列計算機により、気体と液体とを高温高压で混合した状態を急減圧することにより爆発させるシ

ミュレーションを解析した。この現象は衝撃波管現象として知られている現象で、爆発現象として、工学・地球物理学はじめ数多の応用を持つものである。本研究で扱ったのは、最も少ない計算量で実現される非線形非平衡現象の1つと考えられたからである。数百万粒子を使って成功した爆発現象の解析から、各種類衝撃波の挙動や非平衡下での気泡生成ダイナミクスほか興味深い現象を再現した。この成果は、熱機関の効率向上や火山噴火の防災の基礎となろう。またこの成果から、本研究で想定していた規模をさらに超えるシミュレーションを実現すればさらに豊かな非平衡統計物理学が成長することが確信された。次のスケールとして、数億から数百億粒子を解析し、1兆粒子級の系の統計物理学を模索する研究が期待されることも明らかとなった。こうした研究は成果論文⑧に、「アボガドロ数への挑戦」(“The Avogadro Challenge Project”)としてまとめ公表した。この成果は、サウジアラビア・アブドラ王立科学技術大学(KAUST)よりGlobal Research Partnership Investigators賞を受賞した。

上述の衝撃波管と対極の破壊現象に、物質の経年劣化による破壊がある。破壊応力よりも小さい応力でも、長い間には劣化が進み破壊に至った事故は多い。これは分子スケールから研究することが最も難しい現象と思われる。分子が固体をなし、その固体の中の欠陥が拡散・成長する時間スケールでの現象だからである。この問題を現象論的に扱い、材料や構造物中で破壊の衝撃波が伝達するに要する時間が、応力の再分配に要する時間よりも遅い場合には、破壊に至るまでの寿命が大きさにべき的に依存するようにみえることおよび、破壊に臨界亀裂がある相(いわゆるグリフィス相)とそうでない相との2相があることが明らかとなった(成果論文⑥)。

さらに分子運動に基づきながら、分子運動とは隔絶した巨視的な現象をどのように扱うかは統計物理学の黎明期からの課題である。その典型例として、本研究では生物生態系がどのようにして多様性を生みだし、維持しているのかという問題に挑戦した。その結果、生態系の多様性は引き延ばされた指数分布（べき 1/2）で記述されているのではないかとの仮説に到達した。この分布関数はいわゆる「赤の女王仮説」に基づいて導出され、種々の人口動態モデルの進化論的な時間スケールでのふるまいにも確認された。さらに古生物学分野において化石から推定されている生物種の寿命の分布関数をよく説明する（成果論文⑨、⑩）。この成果は今後、生物生態系の維持と制御とを実現する技術への第一歩となる可能性があり、「生態系工学」に実質が宿るさきがけとして期待される。また生態系のみならず、自由競争経済社会でも同様の分布関数が観察されており、経済・社会・政治システムへの展開も期待されよう。

以上各論的に成果を概説した。さらに詳細は成果論文を参照願いたい。分子運動から複雑な物質のふるまいを解明する道筋を拓きまた複雑多様な現実世界の数理的・物理的研究の可能性を明らかとしたことが、最も大局的な見地からみた本研究の成果である。

## 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 16 件)

- ① Y. Murase and N. Ito, Dynamic critical exponents of three-dimensional Ising models and two-dimensional, tree-states Potts models, Journal of Physics Society Japan, 査読有、77 巻、2008、014002-1~5
- ② Marta Guerra, Mark Novotny, 渡辺 宙志, 伊藤 伸泰, Efficiency of Rejection-

Free Methods for Dynamic Monte Carlo Studies of Off-lattice Interacting Particles, Physical Review E, 査読有、79 巻、2009、026706

- ③ 湯川 諭、島田 尚、小串 典子、伊藤 伸泰, Nonequilibrium, Microscopic Distribution of Thermal Current in Particle Systems, Journal of Physics Society Japan, 査読有、78 巻、2009、023002
- ④ 上村 淳、伊藤 伸泰, Nonequilibrium Molecular Dynamics Simulations on Thermal Diffusion in Binary Mixtures of Hard Spheres, Journal of Physics Society Japan, 査読有、77 巻、2008、125001
- ⑤ 鈴木 将、Ferenc Kun、伊藤 伸泰, Thermodynamics of a binary monolayer of Ising dipolar particles. II. Effect of relative moment, Physical Review E、査読有、78 巻、2008、041118
- ⑥ 吉岡 直樹、Ferenc Kun、伊藤 伸泰, Size scaling and bursting activity in thermally activated breakdown of fiber bundles, Physical Review Letter, 査読有、101 巻、2008、145502
- ⑦ 上村 淳、Hans J. Herrmann、伊藤 伸泰, Distribution in flowing reaction-diffusion systems, Physical Review E、査読有、80 巻、2009、061132-1~5
- ⑧ 湯川 諭、伊藤 伸泰, The Avogadro Challenge - Nanodynamics Study on Nonequilibrium Problems, Progress of Theoretical Physics Supplement, 査読有、178 巻、2009、24-32
- ⑨ Y. Murase, T. Shimada, N. Ito, P. A. Rikvold, Random walk in genome space: A key ingredient of intermittent dynamics of community assembly on evolutionary time scales, Journal of Theoretical Biology, 査読有、264 巻、2010、663-672
- ⑩ Y. Murase, T. Shimada, N. Ito, P. A. Rikvold, Effects of demographic stochasticity on biological community assembly on evolutionary time scales, Physical Review E, 査読有、81 巻、2010、041908-1~14

[学会発表] (計 103 件)

- ① N. Ito, Hard particle, an everlasting model of computing statistical mechanics (招待講演), Symposium on the 50<sup>th</sup> Anniversary of the Alder Transition-Recent Progress on Computational Statistical Physics, 2007 年 11 月 29 日、金沢
- ② N. Ito, Nanoengine simulation (招待講

- 演), The 4<sup>th</sup> International Workshop Hangzhou 2007 on Simulational Physics, 2007年11月10日、Hangzhou, China
- ③ N. Ito, Stasistical mechanical simulation of nonequilibrium phenomena and its application(招待講演), 10<sup>th</sup> Asia-Pacific Physics Conference, 2007年8月23日、Pohang, Korea
- ④ 伊藤 伸泰, Toward Exaflops Applications: Molecular Dynamics Simulation of Liquid-Gas Transition, The 11<sup>th</sup> International Specialist Meeting on The Next generation Models on Climate Change and Sustainability for Advanced High-performance Computing Facilities, 2009年3月17日、オークリッジ、米国
- ⑤ 伊藤 伸泰, The Avogadro Challenge-Nanodynamics Study on Nonequilibrium Problems, Japan-US Bilateral Workshop “Large-scale Molecular Dynamics Simulation and Related Topics”, 2008年9月25日、バークレー、米国
- ⑥ 伊藤 伸泰, Nanodynamics Study on Nonequilibrium Problems, Conference on Computational Physics 2008, 2008年8月8日、オウロプレット、ブラジル
- ⑦ 伊藤 伸泰, The Avogadro Challenge: Nanodynamics Study on Nonequilibrium Problems, The 9<sup>th</sup> Taiwan International Symposium on Statistical Physics, 2008年7月9日、台北、台湾
- ⑧ 伊藤 伸泰, Simulation Study on Nano-scale Engine, International workshop on transmission of information and energy in nonlinear and complex systems 2008, 2008年6月5日、シンガポール
- ⑨ 伊藤 伸泰, The Avogadro Challenge: Nanodynamics Study on Nonequilibrium, King Abdullah University of Science and Technoligy Global Research Partnership Awards Presentation and Technical Symposium, 2008年5月28日、ジェッダ、サウジアラビア
- ⑩ 伊藤 伸泰, Simulation Study of Nonequilibrium State(招待講演), 2009年計算物理国際会議, 2009年12月16日、高雄、台湾
- ⑪ 伊藤 伸泰, From Molecules to Ecosystems(招待講演), Taiwan International Workshop on Biophysics and Complex Systems, 2009年12月10日、台北、台湾
- ⑫ 伊藤 伸泰, Simulation study on nonequilibrium transport phenomena(招待講演)、第10回 International NTZ-Workshop on New Developments in Computational Physics:CompPhys09、2009年11月26日、ライプツィヒ、ドイツ
- ⑬ 伊藤 伸泰, 破壊の計算統計力学(招待講演)、日本物理学会第65回年次大会, 2009年9月27日、熊本大学
- ⑭ N. Ito, Trend of HPC and applications(招待講演), Workshop on High Performance Computing and Applications, 2010年12月3日, Beijing Computational Science Research Center, Beijing, China
- ⑮ N. Ito, Diversifying system(招待講演), Workshop on High Performance Computing and Applications, 2010年12月4日, Beijing Computational Science Research Center, Beijing, China
- ⑯ N. Ito, Diversifying Systems(招待講演), APCTP Workshop on Current Progress of Simulations in Complex Systems, 2010年11月17日, APCTP Headquarters, Pohang, Korea
- ⑰ N. Ito, Universality in ecoevolution(招待講演), 2<sup>nd</sup> Debrecen Workshop on Statistical Physics of Fracture and other Complex Systems, 2010年9月13日, Debrecen University, Debrecen, Hungary
- ⑱ N. Ito, S. Matsumoto, F. Takagi, A simple model of Ribosome(招待講演), The 10<sup>th</sup> Taiwan International Symposium on Statistical Physics, 2010年7月28日, Academia Sinica, Taipei, Republic of China
- ⑲ N. Ito, Universality in ecoevolution(招待講演), StatPhysHK-Complexity, Computaiton, Information, 2010年7月14日, Baptisut University, Hong Kong, China
- ⑳ N. Ito, Diversifying dynamics and their universality(招待講演), Conference on Computational Physics 2010, 2010年6月26日, Trondheim, Norway

[図書] (計0件)

[産業財産権]

○出願状況 (計0件)

名称:

発明者:

権利者:

種類:

番号:

出願年月日:

国内外の別:

○取得状況（計0件）

名称：  
発明者：  
権利者：  
種類：  
番号：  
取得年月日：  
国内外の別：

〔その他〕

ホームページ

<http://aph.t.u-tokyo.ac.jp/~ito>

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

伊藤 伸泰 (NOBUYASU ITO)  
東京大学・大学院工学系研究科・准教授  
研究者番号：70211745

### (2) 研究分担者

島田 尚 (TAKASHI SHIMADA)  
東京大学・大学院工学系研究科・助教  
研究者番号：90431791  
(H20→H22：連携研究者)

### (3) 連携研究者