

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24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：2009～2011

課題番号：21540388

研究課題名（和文） 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

研究課題名（英文） Collaboration of statistical mechanics and fluid mechanics
toward a new theory of plastic flows

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

研究成果の概要（和文）：粒子同士が互いの動きを邪魔することによって身動きがとれなくなり系全体の動きが遅くなる現象を扱う一手法を、流体力学と統計力学のコラボレーションによって編み出した。1次元系における例題としての一列縦隊拡散の問題において、この手法の有効性を示し、遅いダイナミクスのもとになっている協同運動をとらえることに成功した。

研究成果の概要（英文）：As a result of collaboration among researchers of statistical mechanics and fluid mechanics, we developed a method to deal with phenomena in which motion of each particle is hindered by its neighbors and thereby the whole system slows down. As a one-dimensional example to demonstrate the usefulness of this method, we applied it to the problem of single-file diffusion and succeeded in capturing the cooperative motion of the particles responsible for the slow dynamics.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	1,100,000	330,000	1,430,000
2010年度	1,200,000	360,000	1,560,000
2011年度	900,000	270,000	1,170,000
総計	3,200,000	960,000	4,160,000

研究分野：物理学（特に流体物理学およびレオロジー）

科研費の分科・細目：物理学、数理物理・物性基礎

キーワード： 塑性流動・やわらかいガラス・統計物理・乱流・ラベル変数・
一列縦隊拡散・揺動応答関係・モード結合理論

1. 研究開始当初の背景

（1）粉を水で溶いて泥状にしたもの（ペースト）は、水分が多いときは通常の液体のように流れるが、水分を減らすにつれて固体的な挙動を示すようになる。ペーストが流動性を失って固体化する過程は、結晶化を伴わな

いので、水が氷になるようなよく知られた現象とは機構が異なっており、むしろガラス転移の仲間だと考えられている。さらに、中間的な水分含有量のペーストは、ある意味で固体と液体の中間状態にあり、外力（剪断応力）が小さいと固体的に振る舞うが、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。近年になって、ガラス転移やそれに類する現象（結晶化を伴わない固体化）の物理的本質や微視的機構を理解しようとする機運が高まり、過冷却液体のみならず、濃密コロイド系、粉体など、いわゆるソフトマターあるいは「やわらかいガラス (soft glassy materials)」を含めた研究が各方面で開始された。

(2) ペーストを浅い皿に入れて乾燥させる実験で、塑性流動による記憶効果が発見された。これは、ペーストを皿に入れた直後に短時間のあいだ（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というものである。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、また現象的なモデルも提案されたが、微視的な機構に対する手がかりはほとんど皆無であった。

(3) ガラス転移の微視的理論として「モード結合理論 (mode coupling theory = MCT)」が注目を集め、活発な研究がおこなわれていた。ガラス系のMCTは密度のFourier表示に対する相関関数の方程式という形をとり、パラメータの変化（液体における温度低下やペーストにおける水分の減少に相当）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。しかし液体側からガラス転移点に向かってパラメータを近づけていくと、本当のガラス転移点に達する前に偽の転移現象を生じて破綻してしまう。また、ガラス系で流動性が失われるのは、もとをただせば粒子同士が互いに動きを邪魔するのでバラバラに動けなくなるためであるが、この効果をMCTで完全にとらえているとは言いがたく、たとえば棒状高分子系にMCTを適用しようとした場合にこの問題点が表面化する。さらに導出法自体も整備されておらず（平衡系に限れば射影演算子の方法によってMCT方程式が導出できるけれども）、塑性流動のような非平衡現象を矛盾なく扱う方法は明らかではない。このようにMCTにはいくつもの深刻な問題点が指摘されており、その改良が待ち望まれていた。

(4) 流体力学における乱流理論の分野では、速度場のFourierモードの相関関数に対する直接相互作用近似 (Direct-Interaction Approximation = DIA) が知られていた。大枠としては液体論のMCTと同等の構造をもつ統計理論である。考案当初のDIAは、実験事実と一致しない結果を導くという深刻な困難

をかかえていたが、その後、Lagrange記述を用いて時間発展を追う方法が乱流理論に導入され、乱流におけるDIAの困難は克服された。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、これによって乱流中の渦構造自体の変形に焦点をあてることが可能になる。

2. 研究の目的

(1) 既に述べたとおり、塑性流動とは、ペーストなど「やわらかいガラス」の示す力学的挙動であり、小さな外力に対しては固体のように振る舞う非結晶物質が、大きな外力に対しては液体のように流動するという現象である。したがって、塑性流動の新理論とはガラス系の理論の新展開を意味するものでなければならない。

本研究プロジェクトでは、同じくランダム系を扱う流体乱流の理論と液体の統計力学のコラボレーションにより、ガラス系の理論におけるブレークスルーを目指し、MCTの改良を試みる。究極的にはペーストなどの塑性流体について、固体側と液体側を統一的に記述する構成関係式を微視的に導出できるようにすることを目指し、そのための土台となるような新理論を本プロジェクトで構築する。具体的には、ガラス系の理論にLagrange記述（ラベル変数の方法）を持ち込むというアイデアの有効性を検証する。

(2) 逆に、非平衡統計力学の最近の手法を流体乱流に適用し、手法の有効性を検証する。もし非平衡統計力学の一般論というものがあり得るなら、それは、非平衡現象として最も基本的かつ重要な現象のひとつである流体乱流に対して有意義な情報を内包するものでなければならない。この点の可否を定量的に問うことのできるような問題を設定し、数値的検討をおこなう。

(3) 塑性流体の具体例としての炭酸カルシウムペーストおよび他のペーストに対して、乾燥破壊実験やレオロジー測定等による知見を蓄積する。これによって、記憶効果の微視的機構に関する手がかりを得る。

3. 研究の方法

(1) 実際に5名のメンバーが一堂に集まって議論することを重視し、3年のあいだに通算17回（実質16回）のセミナーを実施した。最初のセミナーでは各自の研究のバックグラウンドを紹介し、そのあと、最初の1年は、それぞれのアイデアを幅広く共有するための活動をおこないつつ、特にMCTとDIAの導出過程を理解し自家菜籠中の物とすることを主眼とした。たとえば第2回セミナーではMCTの研究で知られる鄭誠虎氏を講師に

招き（図1）、射影演算子法によるMCTの導出や最近の応用、乱流との関連などについて議論した。第4回セミナーでは食品工学や金属ガラスをも含む多彩な講演者による研究会を開催する一方、早朝や夜には内輪の勉強会をおこない（図2）、微妙な論点について実際に“手を動かして”計算しながら議論を深めた。年度末までに、DIAの方法をガラス系に適用して、MCT方程式にあたるものを再導出した。この結果およびラベル変数のアイデアについて、第6回セミナーで筑波大学の宮崎州正氏（日本におけるMCTの第一人者のひとり）を訪問して話を聴いていただき、貴重な示唆を得た。

2年め以降も定期的にセミナーをおこない計算と議論を進めるスタイルを続けた。セミナーだけでは足りない部分は、遠隔通信システム（skype）を導入して補った。新理論のためには着想が大事であるが、斬新な着想であつてもつまらないミスにトラップされて進まない危険性がある。セミナーを中心とするスタイルにより、そのような危険性をいくらか避けることができたように思われる。

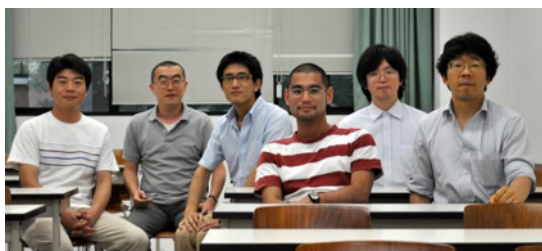


図1：第2回セミナー。左端が講師の鄭誠虎氏。



図2：第4回セミナーでの“勉強会”の様子。

表：今回の研究プロジェクトで開催したセミナー一覧。星印（☆）は研究会を示す。また第12回（★）は震災のためセミナーの日程を延期し、第14回と兼ねる形で開催した。

	開催日時	開催地	
1	2009年5月14日・15日	京大理	
2	2009年7月2日・3日	京大理	
3	2009年10月28日・29日	日大船橋	
4	2009年11月20日・21日	鳥取大	☆
5	2010年1月27日・28日	京大理	
6	2010年3月9日 同 3月10日	青山学院 (青山) 筑波大	
7	2010年6月6日・7日	青山学院 (青山)	
8	2010年8月8日・9日	青山学院 (相模原)	
9	2010年10月20日・21日	岡山大	
10	2010年12月16日・17日	鳥取大	☆
11	2011年1月26日・27日	京大理	
12	2011年3月15日・16日	日大船橋	★
13	2011年5月14日・15日	京大理	
14	2011年6月15日・16日	日大船橋	☆
15	2011年8月9日・10日	岡山大	
16	2011年11月23日・24日	鳥取大	☆
17	2012年3月18日・19日	青山学院 (相模原)	

(2) 中原研究室（日本大学）において乾燥破壊の実験をおこなった。本プロジェクトにより実験に必要な粉およびアクリル容器の予算が確保できたため、以前に比べて安心して実験を進めることができた。第3回セミナーの際には乾燥破壊における記憶効果のデモ実験をおこない、塑性流動による記憶効果についての認識を共有した。ほかにもセミナーの際に互いの大学を訪問するた

びに実験室等を見学し、本プロジェクトに生かせるような実験的知見が得られないかどうか議論した。

4. 研究成果

(1) 連続的ラベル変数の方法（流体力学におけるLagrange記述に相当するもの）の有効性を示すことに成功した。

ガラス系のモデルとしては、互いに重なりを許さないという拘束のもとで熱揺動力を受けて運動する粒子系（斥力的Brown粒子系）がよく用いられているが、我々が扱ったのは、その1次元版である（図3）。この系の挙動は「一列縦隊拡散（Single-File Diffusion = SFD）」と呼ばれる。この系では、粒子が1列に並んでいて互いに追い越す事ができないために、粒子が動くためにはどうしても隣の粒子とタイミングが合うまで待たねばならず、そのために拡散が非常に遅くなる。粒子の拡散の様子は、時間 t が経過するあいだの移動距離 R を求め、その二乗平均 $\langle R^2 \rangle$ を図示すれば分かる。他の粒子に邪魔されない自由なBrown粒子（水の多いペーストに相当）では、 $\langle R^2 \rangle$ は t に比例することがEinsteinの時代から知られていた。他方、図4に示されるように、SFDでは $\langle R^2 \rangle$ は t ではなくその平方根に比例する。このこと自体は何十年も前から知られていたが、その解析方法は1次元に特化したテクニックに大幅に依存していた。他方、ガラス系の理論であるMCTをSFDに適用しても、 $\langle R^2 \rangle$ が遅くなる様子を正しく示す結果は得られないということが、宮崎によって指摘されていた（当初この指摘は棒状高分子に対してなされたが、1次元で考えることで問題点が浮き彫りになる）。この困難は、粒子が周囲の粒子に阻まれて動けなくなる効果を、MCTがじゅうぶんに正しく扱っていないことを示唆する。

そこで我々は、流体力学におけるLagrange記述の方法にヒントを得て、Brown粒子系の密度場に対する方程式をラベル変数で書き直し、密度揺らぎの相関から $\langle R^2 \rangle$ を求める手法を構築した。すると、長時間極限で $\langle R^2 \rangle$ は t の平方根に比例するという正しい結果が得られた（図4の点線）。さらに、この挙動の背後には、隣り合った粒子どうしが協調して動くというメカニズムがあるはずで、その協同運動の様子を示す統計量を解析的に求めることに成功した。

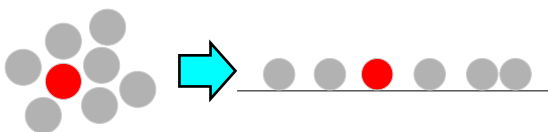


図3：我々が扱った1次元系の概念図。着目している粒子の動きが周りの粒子に妨げられる様子をモデル化している。

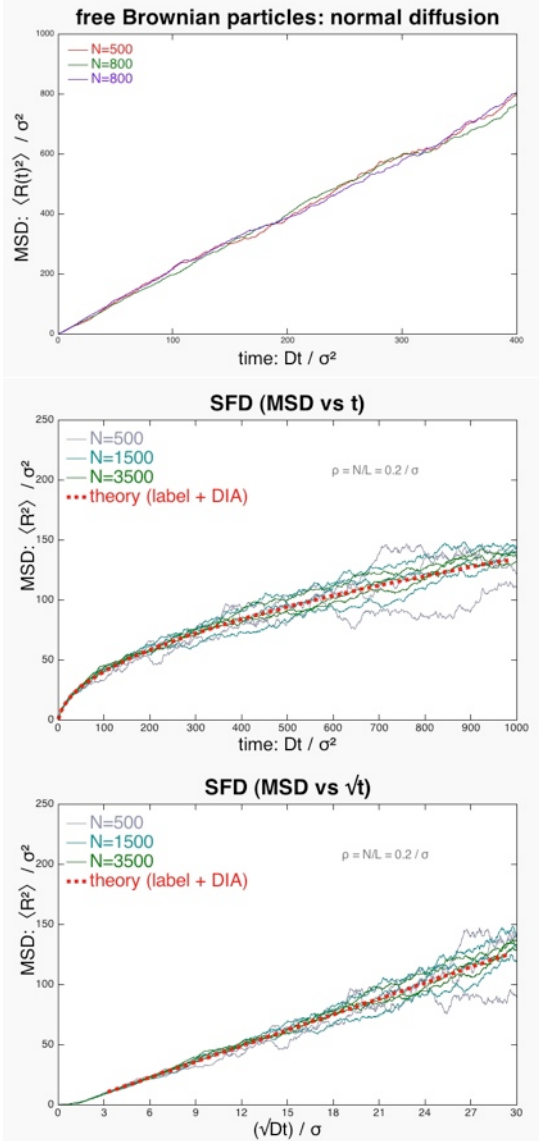


図4：平均二乗変位 $\langle R^2 \rangle$ の挙動。無次元化の基準量には拡散係数 D と粒子直径 σ を用いている。最初の図は自由なBrown粒子の場合で、平均二乗変位は時間 t に比例する。2番めの図はSFDで、明らかに比例よりも遅い（伸びが鈍化している）。同じデータで横軸を $(\sqrt{Dt})/\sigma$ に変数変換したのが3番めの図で、グラフが直線になることから、漸近的に $\langle R^2 \rangle$ が t の平方根に比例することが分かる。細い線は粒子 N 個の数値実験結果、太い点線は本研究による理論式で、よく一致している。

(2) 乱流理論におけるDIAのオリジナルのアイデアに近い方法を、ガラス系の密度場の揺らぎに対する方程式に適用し、MCT方程式に相当するものを再導出した。通常の変数を用いる限り、結果はMartin-Siggia-Roseのダイアグラム展開による方法と同じであって、どこかで不整合が生じる（揺動応答関係式を満たさない）。ところが、この方法とラベル変数による再定式化を融合させると、揺動応答関係式との矛盾が自然に解消されることが分かった。特に1次元系の場合は具体的な計算が可能であり、SFDの過渡的挙動など

に関して妥当な結果が得られる。この方法を高次元に拡張することによりガラス系の新理論への道が開けるものと期待できる。

(3) 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揺動応答関係式が平衡系の場合と異なるという問題がMCTの適用を困難にしている。他方、DIAの本来のターゲットである流体乱流では、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、乱流において揺動応答関係式の修正を問う問題が重要な試金石となる。そこで我々は、乱流の力学系モデルであるシェルモデルに揺動力を加えた系について、速度相関 C と応答関数 G を数値的に計算した。統計量の収束が遅いため、結果は未だ予備的であるが、図5に示すように、平衡系での関係式 ($G \propto C$) は成り立たないらしいこと、むしろHarada-Sasa関係式 ($G = H$) と整合するらしいことを示唆する結果を得た。

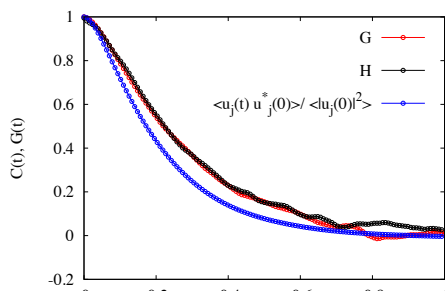


図5：シェルモデルに揺動力を加えた系における計算結果の一例。

(4) ペーストの破壊の制御を目指す別の科研費プロジェクト(基盤(B)22340112)と協力し、ペーストの粒子間相互作用を変えることによる記憶効果への影響を調べる実験をおこなった。その結果、Coulomb斥力の有無が記憶効果に影響することが分かった。具体的には、炭酸カルシウムペーストに微量の食塩を添加してCoulomb斥力を遮蔽し、そのペーストを加振して、乾燥亀裂の異方性を調べた。別種の粉を用いた実験では、水分の量や加振強度に応じて2種類の記憶効果(仮に“type I”および“type II”と呼ぶ)が生じるが、純粋に水と炭酸カルシウム粉末からなるペーストでは、type Iの記憶効果のみが観測され、type IIは見られない。ところが、食塩を加えることで炭酸カルシウム粒子のあいだのCoulomb斥力を遮蔽すると、type IとIIの両方の記憶効果を示すようになった。このことは塑性流動による記憶効果の微視的機構に対する手がかりを与えるものである。

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8件)

- (1) Ooshida Takeshi, Susumu Goto, Takeshi Matsumoto, Akio Nakahara & Michio Otsuki: “An approach to glassy systems with direct-interaction approximation”, *Prog. Theor. Phys. Supplement* **195** (in press) [査読あり]
- (2) Y. Matsuo & A. Nakahara: “Effect of interaction on the formation of memories in paste”, *J. Phys. Soc. Japan* **81** (2012) 024801 [査読あり]
- (3) A. Nakahara & Y. Matsuo: “Control of crack pattern using memory effect of paste”, *Journal of Physics: Conference Series* **319** (2011) 012014 [査読あり]
- (4) Ooshida Takeshi, Susumu Goto, Takeshi Matsumoto, Akio Nakahara & Michio Otsuki: “Continuum Theory of Single-File Diffusion in terms of Label Variable”, *J. Phys. Soc. Japan* **80** (2011) 074007 [査読あり]
- (5) Song-Ho Chong, Michio Otsuki & Hisao Hayakawa: “Generalized Green-Kubo relation and integral fluctuation theorem for driven dissipative systems without microscopic time reversibility”, *Phys. Rev. E* **81** (2010) 041130 [査読あり]

〔学会発表〕 (計48件)

- (1) 太信田丈志ほか: 「ガラス系の統計理論に対する流体屋のアプローチ」
京都大学数理解析研究所共同研究集会:
乱流の普遍性と個別性: 流体乱流を通して宇宙を見る
2012年1月13日 京大数理解析研究所
- (2) Ooshida Takeshi et al.: “Slow diffusion in a one-dimensional system of repulsive Brownian particles”
Jadavpur Univ. & IACS Seminar: *Complex Systems and Nonlinear Phenomena in Condensed Matter*
2012年1月7日 Kolkata (インド)
- (3) 松本剛ほか: 「乱流シェルモデルの相関関数と応答関数」
京都大学数理解析研究所共同研究集会:
偏微分方程式の背後にある確率過程と解の族が示す統計力学的な現象の解析
2011年12月20日 京都大学数理解析研究所

- (4) 後藤晋ほか：「乱流における揺動応答関係」九州大学応用力学研究所 研究集会：乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性 2011年11月10日 九州大学応用力学研究所
- (5) T. Matsumoto *et al.*: “Correlation function and response function in shell model of turbulence”
International Workshop on *Nonequilibrium Dynamics in Astrophysics and Material Science*
2011年11月2日 京大基礎物理学研究所
- (6) 中原明生ほか：「ペーストのメモリー効果における歪と応力の測定」
日本物理学会 2011年秋季大会
2011年9月24日 富山大学 五福キャンパス
- (7) 大信田丈志ほか：「一列縦隊拡散における二粒子変位相関」
日本物理学会 2011年秋季大会
2011年9月23日 富山大学 五福キャンパス
- (8) 松本剛ほか：「乱流力学系モデルの分布関数と揺動応答関係」
日本物理学会 2011年秋季大会
2011年9月22日 富山大学 五福キャンパス
- (9) 大信田丈志ほか：「外場中での一列縦隊拡散のラベル変数理論」
ガラス関連講演会
2011年3月25日 京都大学吉田キャンパス
- (10) A. Nakahara & Y. Matsuo: “Control of crack pattern using memory effect of paste”
12th International Symposium on *Continuum Models and Discrete Systems* (CMDS 12)
2011年2月24日 Kolkata (インド)
- (11) 中原明生ほか：「ペーストの流れの記憶と粉の協同現象」京大数理解析研究所共同研究集会：乱流研究 次の10年：乱流の動的構造の理解へ向けて
2011年1月12日 京都大学数理解析研究所
- (12) A. Nakahara *et al.*: “Memories of paste visualized as desiccation crack patterns”
International Workshop on *Recent Progress in Physics of Dissipative Particles*
2010年11月25日 京大基礎物理学研究所
- (13) Michio Otsuki: “Jamming transition for sheared frictional granular materials”
International Workshop on *Recent Progress in Physics of Dissipative Particles*
2010年11月24日 京大基礎物理学研究所
- (14) 大信田丈志ほか：「一列縦隊拡散の連続体理論」日本物理学会 2010年秋季大会
2010年9月26日 大阪府立大学
- (15) 中原明生ほか：「ブレンドペーストの記憶と乾燥破壊」
日本物理学会 2010年秋季大会
2010年9月26日 大阪府立大学
- (16) A. Nakahara: “Memory of paste visualized as crack patterns”
Hungary/Japan Joint Seminar: *Simulation study on breakdown of materials*
2010年9月14日 Debrecen (ハンガリー)
- (17) A. Nakahara *et al.*: “Control of desiccation crack pattern using memory effect of clay paste”
18th European Conference on Fracture
2010年8月30日 Dresden (ドイツ)
- (18) A. Nakahara & Y. Matsuo: “Memory of paste visualized as crack pattern”
CNRS/JSPS Joint Seminar on *Deformation, Flow and Rupture of Soft Matter*
2010年7月6日 Lyon (フランス)
- (19) A. Nakahara & Y. Matsuo: “Memory of clay paste visualized as crack pattern”
European Geosciences Union: 2010 General Assembly
2010年5月3日 Wien (オーストリー)
- (20) A. Nakahara: “Memories in clay paste of vibration and flow: their visualization as crack patterns”
American Geophysical Union 2009 Fall Meeting
2009年12月17日 San Francisco (米国)
- 〔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)
岡山大学・自然科学研究科・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)
青山学院大学・理工学部・助教
研究者番号：30456751