

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 6 月 6 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2010～2013

課題番号：22540387

研究課題名(和文)非平衡条件下での輸送・構造形成におけるマイクロダイナミクス・マクロ記述

研究課題名(英文)Microscopic dynamics and macroscopic descriptions in transport and structural formation phenomena under nonequilibrium conditions

研究代表者

湯川 諭 (Yukawa, Satoshi)

大阪大学・理学(系)研究科(研究院)・准教授

研究者番号：20292899

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円、(間接経費) 840,000円

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くような現象を非平衡現象と言います。非平衡現象は、日常的に目にしますがその物理的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を理解するために、コンピュータ上でシミュレーションにより調べました。特に、火山噴火に見られるような急減圧下での気泡生成と構造形成の物理、泥のひび割れのような、体積が収縮することによる亀裂発生の様子とその性質、結晶粒界の温度勾配下での運動などを調べ、これまでに知られていなかったことを幾つか明らかにしました。この成果は非平衡現象の制御に応用できる可能性があります。

研究成果の概要(英文)：Phenomena such as heat transfer are called "nonequilibrium" phenomena. Physical understanding of the nonequilibrium phenomena is still poor, even though the phenomena are ubiquitous in nature. In this study, we investigate the nonequilibrium phenomena by the computer simulation for understanding; Especially, dynamics and structural formation of bubbles under rapid decompression, fracture dynamics caused by shrinkage, and dynamics of a grain boundary under a thermal gradient are studied. The results may be applicable to control the nonequilibrium phenomena.

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：非平衡ダイナミクス 輸送 構造形成 噴霧流転移 破壊・亀裂

1. 研究開始当初の背景

平衡系の統計力学が Gibbs らによって確立されてから 100 年以上になる。統計力学の黎明期より、非平衡現象に対する統計学的アプローチも同時に行われてきたが、平衡統計力学ほどの原理の完成にはまだ至っていない。輸送や構造、構造形成に関する各論がそれぞれ独自に発展しているのが現状である。例えば、輸送に関しては線形非平衡熱力学による現象論が確立している。非平衡条件下での構造や構造形成に関しても、散逸構造論や局所的な自由エネルギーを現象論的に記述した Ginzburg-Landau 理論などの理論がよく使われる。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。輸送の例で言えば、輸送係数がミクロな線形応答理論で計算されることで理論のパラメーターがミクロな状態を繰り込んだ形で得られる。このような観点から見ると、ミクロな状態が輸送や構造、構造形成にあたる影響をこれらの理論の枠内で評価するには、少し不向きである。統計力学的な立場に立てば、これらの理論はいわば平均値の理論であり、物理量の分布やゆらぎの効果等に関する議論には全く不向きである。

また実際の非平衡現象を眺めてみると、マクロな平均値の現象論で良いのかということが疑問になる。実際、近年の実験および観察において、ミクロな状態が、マクロな振る舞いに大きく影響を与えているような現象が発見されている。例えば、熱伝導と物質の拡散的輸送の間の交差現象として熱泳動現象が知られているが、泳動する成分の表面のミクロな違いで、マクロにも振る舞いが大きく変わることが知られている。また、最も簡単な界面系のモデルである⁴モデルにおける界面構造でさえ、ゆらぎの効果で界面構造が変化する。動的な現象に関しては、高粘性流体中の気泡核生成では、マクロな理論を使った解析が気泡生成の実験結果、観察結果とあわないことが知られている。この主たる原因は、気泡の臨界核半径が数ナノメートルと非常に小さくミクロな界面構造が無視できないこと、また粘性が高いことにより気泡核の成長が制限されていることによると思われているが、まだ理論的な解決には至っていない。

一方、コンピューターの性能の指数関数的成長とともに、近年、計算機をもちいた非平衡系の研究が盛んに行われるようになってきている。非平衡系では、同じサイズの平衡系と比較すると計算量がさらに「一桁」多く必要であり、ようやく計算機が非平衡系の研究に追いついてきたといえる。申請者は、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輸送、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、熱伝導などを調べてきた。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輸送や、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

前述の背景を踏まえ、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輸送や構造、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、非平衡現象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現象への影響を見る。その際、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。

3. 研究の方法

輸送現象や構造形成などの非平衡現象に対し、計算機上でシミュレートできるミクロモデルを構成する。また構成されたミクロモデルを計算機シミュレーションすることで、対象とする現象の理解を目指す。さらに、現象のマクロな記述による理解、およびマクロ記述による計算機シミュレーションを行い、対象とする非平衡現象現象の記述階層をまたがる理解を目指す。また関連する非平衡現象に関してもシミュレーションを元にした研究を行う。

4. 研究成果

研究期間中にいくつかの非平衡現象に対して成果が得られた。それら成果を以下にテーマ別にまとめる。

(1) 爆発的構造形成におけるモルフォロジーダイアグラムの記述

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。この系は、パラメーターに依存し、気泡核生成から気泡流の発生、および噴霧流に転移しながら流れることが我々の先行研究によって既に知られている。今回は、

パラメーターに依存して、どのような流れの構造が現れるかを詳細に調べた。その中で相図の一部を図1に示す。また、マクロな連続体記述との比較を行い、どのようにミクロなダイナミクスとマクロな記述が整合しているか明らかにした。

この成果は非平衡物理のみならず、火山噴火の素過程などにも応用できる成果である。また、ミクロダイナミクスの有用性を示したことで、今後の非平衡現象の理解に利用できる手法を確立したと言える。

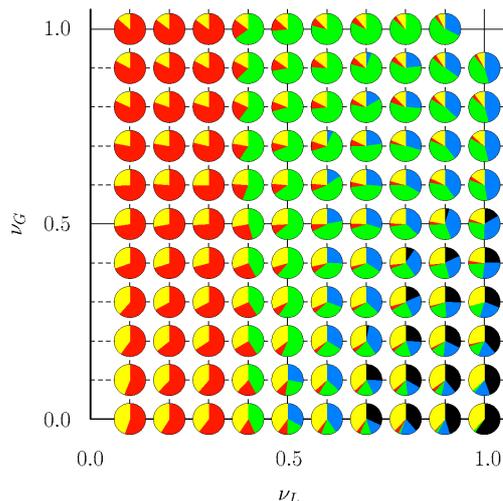


図1：あるパラメーターにおける流れの形態

(2) 体積収縮による破壊のミクロモデルとマクロモデル、確率的記述

体積が収縮することによる破壊の様子をミクロシミュレーションによって調べた。その結果、破壊後の構造の長さスケールが、収縮レートに応じて冪的に依存することがわかった。また、マクロ記述として、連続体モデルを構成し、収縮によるひび割れのダイナミクスをシミュレーションによって再現した。この系では、破片のサイズ分布に注目し、その統計的性質を調べた。その結果、収縮過程のダイナミクスに応じて、破片のサイズ分布がスケール不変性を示すことがわかった。これは世界初の新しい成果であり、破壊初期の破片分布がわかれば、その後、破壊が進行した後の分布の様子を予測することができることを意味しており、他の系への応用が期待できる。また、マクロな記述をさらに粗視化した確率モデルを構成することに成功し、スケール不変性の完全な理解を得た。この系では、ミクロモデルとマクロ記述のつながりがまだ十分に理解出来ておらず、これは今後の課題である。

(3) 結晶粒界の温度勾配条件下での運動

結晶粒界をミクロモデルにより原子スケールからモデル化し、計算機内に構成した。その界面に直交する方向に熱流を流したときの、界面の運動を計算機シミュレーション

により調べた。その結果、これまでに知られていない熱流によって駆動される界面運動を発見した。(図2) この運動を記述するマクロモデルを構成し、界面運動は、界面付近での自由エネルギー障壁を非対称な熱活性過程で越えることに起因することがわかった。現在、この成果を論文として準備している。今後、多結晶における温度勾配効果を理解すれば、応用にむけた研究に進むことができる。

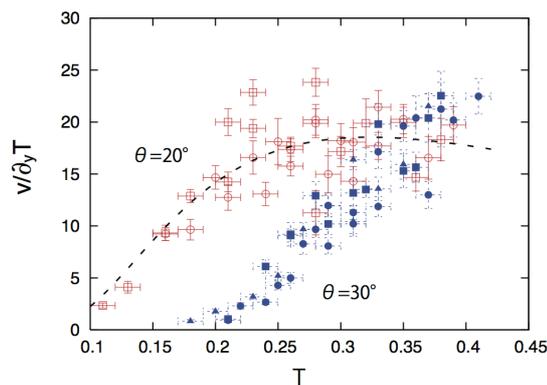


図2：結晶界面の温度勾配による易動度の温度依存性と結晶軸角度依存性

(4) その他

関連する問題として、鳥の群れなど自ら駆動する粒子系のミクロモデルを構成し、その非平衡定常状態におけるマクロな応答関係を調べた。その結果、非平衡定常な状況での、揺動散逸定理の成立とその破れが、鳥の群れのようなモデルでも起きていることが確認された。また、熱活性破壊過程をミクロモデルで構成し、その挙動をシミュレーションによって調べた。この結果、マクロな記述に必要な、破壊亀裂先端における、ある特徴的な長さスケールの温度依存性などが明らかになった。

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5件)

1. Shin-ichi Tadaki, Macoto Kikuchi, Minoru Fukui, Akihiro Nakayama, Katsuhiro Nishinari, Akihiro Shibata, Yuki Sugiyama, Taturu Yoshida and Satoshi Yukawa: "Phase transition in traffic jam experiment on a circuit", New Journal of Physics 15, 103034 (2013). 査読あり

DOI: 10.1088/1367-2630/15/10/103034

2. Hajime Inaoka, Satoshi Yukawa, and Nobuyasu Ito: "Scaling relation and regime map of explosive gas-liquid flow of binary Lennard-Jones particle system", *Physica A* 391, 423-438 (2012). 査読あり
DOI: 10.1016/j.physa.2011.08.018
 3. Atsushi Yamamoto, Ferenc Kun, and Satoshi Yukawa: "Micro-structure of damage in thermally activated fracture of Lennard-Jones systems", *Physical Review E* 83, 066108 (2011). 査読あり
DOI: 10.1103/PhysRevE.83.066108
 4. Satoshi Yukawa, Fumiko Ogushi, Takashi Shimada and Nobuyasu Ito: "Nonequilibrium Distribution of the Microscopic Thermal Current in Steady Thermal Transport Systems", *Progress of Theoretical Physics Supplement* 184 (2010) 415. 査読あり
DOI: 10.1143/PTPS.184.415
 5. Hajime Inaoka, Satoshi Yukawa, and Nobuyasu Ito: "Spray flow-Network flow transition of binary Lennard-Jones particle system", *Physica A*, 389 (2010) 2500-2509. 査読あり
DOI: 10.1016/j.physa.2010.02.035
- [学会発表](計 18 件)
1. 伊藤伸一、湯川諭「収縮破壊における破片分布の確率モデルによる解析」2014 年日本物理学会第 69 回年次大会(東海大学湘南キャンパス 2014 年 3 月 30 日)
 2. 伊藤伸一、湯川諭「バネ質点モデルにおける乾燥破壊パターンの乾燥過程依存性」2013 年日本物理学会秋季大会(徳島大学常三島キャンパス 2014 年 9 月 28 日)
 3. 佐光政人、湯川諭「群れモデルのシミュレーションにおけるゆらぎと応答 II」2013 年日本物理学会第 68 回年次大会(広島大学東広島キャンパス 2013 年 3 月 27 日)
 4. 伊藤伸一、湯川諭「乾燥破壊パターンの動的スケーリングの確率モデルによる解析 II」2013 年日本物理学会第 68 回年次大会(広島大学東広島キャンパス 2013 年 3 月 27 日)
 5. 佐光政人、湯川諭「群れモデルのシミュレーションにおけるゆらぎと応答」2012 年日本物理学会秋季大会(横浜国立大学常盤台キャンパス 2012 年 9 月 19 日)
 6. 伊藤伸一、湯川諭「乾燥破壊パターンの動的スケーリングの確率モデルによる解析」2012 年日本物理学会秋季大会(横浜国立大学常盤台キャンパス 2012 年 9 月 19 日)
 7. 岡村諭、吉野元、湯川諭「ジャミング転移点近傍における有限温度応力緩和」2012 年日本物理学会第 67 回年次大会(関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス 2012 年 3 月 24 日)
 8. 佐光政人、湯川諭「近接次数に依存した相互作用を持つ群れモデルのシミュレーション」2012 年日本物理学会第 67 回年次大会(関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス 2012 年 3 月 25 日)
 9. 伊藤伸一、湯川諭「SPH 法乾燥破壊モデルの解析とその統計的性質」2012 年日本物理学会第 67 回年次大会(関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス 2012 年 3 月 25 日)
 10. 山本敦志、湯川諭「温度勾配のある系での界面の運動の研究」2011 年日本物理学会秋季大会(富山大学五福キャンパス、2011 年 9 月 22 日)
 11. 湯川諭「体積収縮による破壊のダイナミクス」2011 年日本物理学会秋季大会

- (富山大学五福キャンパス、2011年9月23日)
12. 伊藤伸一、湯川諭「SPH法を用いた乾燥破壊シミュレーションとその統計的性質」2011年日本物理学会秋季大会(富山大学五福キャンパス、2011年9月23日)
 13. 岡村諭、吉野元、湯川諭「構造ガラスにおけるエイジング効果のMDシミュレーション」2011年日本物理学会秋季大会(富山大学五福キャンパス、2011年9月24日)
 14. 湯川諭「体積収縮による破壊」2011年日本物理学会第66回年次大会(新潟大学五十嵐キャンパス 2011年3月28日 東日本大震災により予稿をもって発表に代える。)
 15. 山本敦志、Ferenc Kun、湯川諭「クリープ破壊現象の寿命の解析」2011年日本物理学会第66回年次大会(新潟大学五十嵐キャンパス 2011年3月28日 Mar. 25-28: 東日本大震災により予稿をもって発表に代える。)
 16. 稲岡創、湯川諭、伊藤伸泰「レナードジョーンズ粒子系による爆発流のスケールリング関係」2011年日本物理学会第66回年次大会(新潟大学五十嵐キャンパス 2011年3月28日 Mar. 25-28: 東日本大震災により予稿をもって発表に代える。)
 17. 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による爆発粒の流動様式」2010年日本物理学会秋季大会(大阪府立大学中百舌鳥キャンパス、2010年9月24日)
 18. 山本敦志、Ferenc Kun、湯川諭「クリープ破壊における温度効果」2010年日本物理学会秋季大会(大阪府立大学中百舌鳥キャンパス、2010年9月26日)

〔図書〕(計0件)

〔産業財産権〕
出願状況(計0件)
取得状況(計0件)

〔その他〕
なし

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

(2) 研究分担者
なし

(3) 連携研究者
なし