

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 26 年 4 月 23 日現在

機関番号：13903

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2011～2013

課題番号：23740293

研究課題名(和文) 高密度粉体ダイナミクスの非平衡輸送における応答理論と動的多体相関による統一的解明

研究課題名(英文) Response theory and dynamical many body correlations for non-equilibrium transport in dense granular dynamics

研究代表者

磯部 雅晴 (Isobe, Masaharu)

名古屋工業大学・工学(系)研究科(研究院)・助教

研究者番号：80359760

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,900,000円、(間接経費) 870,000円

研究成果の概要(和文)：粉体気体系は、局所非平衡系の統計力学を推進する理想モデル系として理論的発展が大きく期待されている。また、高密度粉体系においては「ジャミング転移」が注目され、ガラス転移との関係が盛んに研究されている。本研究では、高速なEvent-Driven分子動力学法を軸に、「粉体気体系の乱流化現象」「粉体応答理論の拡張」「配向秩序変数の一般化と動的多体相関法的高速化」「2次元剛体球系の融解現象」に関して、国内外の共同研究を行い、基礎的方法論の開発(確立)を遂行した。

研究成果の概要(英文)：In this project, we investigated several non-equilibrium phenomena of the granular dynamics by using Event-Driven Molecular Dynamics (EDMD) algorithm and developed useful methods especially for the dense hard core systems. We have investigated the following topics; (i) Granular Turbulence from the viewpoint of Micro-scale Reynolds Number and Cluster Impact in Freely Evolving Granular Gas; (ii) Fluctuation-Dissipation Relations for Motions of Center of Mass in Driven Granular Fluid under Gravity; (iii) Generalized Bond Order Parameter to Characterize Transient Crystals; and (iv) Hard Disks Equation of State: First-Order Liquid-Hexatic Transition in Two Dimensions with Three Different Simulation Methods.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学・数理物理・物性基礎

キーワード：粉体気体 非平衡輸送現象 応答理論 分子動力学法 動的多体相関

## 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モデル系として理論的發展が大きく期待されている。また高密度粉体系においては「ジャミング転移」が注目され、ガラス転移との関係が盛んに研究されている。研究代表者は10年以上にわたり、Event-Driven 分子動力学(MD)法を用い、剛体球系や粉体系の動力学に関して計算統計物理学の観点から世界最大規模のシミュレーションを実行し成果を発表してきた。以下に、研究開始当初の背景をまとめる。

### (1)「粉体気体系の統計則と乱流化」：

無重力下での粉体気体系(自由減衰非弾性剛体球モデル)はGoldhirschら(PRL, 1993)の有名な論文以来多くの研究がなされてきた。研究代表者は、この系で世界最大規模(数百万粒子系)のシミュレーションを実行し、2次元ナビエストークス乱流との顕著な類似点(エンストロフィーカスケード、Bose凝縮様現象)を示した(Isobe, 2003, 2005)。これらの成果は、粉体気体系の統計則を明示的に示す先駆的成果として、理論發展の可能性並びに乱流化への起源を研究するひとつの方法論を提示した。

### (2)「粉体振動層における新しい応答理論」：

都城高専の若生潤一氏と共同で、粉体振動層の流動状態において、運動論や流体力学方程式とは異なる視点から巨視的物理量(重心運動など)を記述する新しい現象論的応答理論を定式化した。この方法論では、単純なランジュバン方程式を基礎としているため、巨視的物理量の厳密解を解析的に計算することが可能となる。この解析解として得られた理論予測はシミュレーションとよい一致を示し、理論の妥当性が検証された(Wakou&Ochiai &Isobe, 2008; Wakou&Isobe 2010)。

### (3)「高密度剛体球系における遅い緩和の起源とモラセステール」：

高密度剛体球液体系における遅い緩和の起源に関して、分子シミュレーションの創始者Berni J.Alder氏と共同研究を遂行した。高密度液体のシアストレス(ポテンシャルパート)自己相関関数の長時間緩和(いわゆるモラセステール)は、非平衡統計物理学やガラス転移における重要問題として認識されている。80年代後半、Tony Ladd(フロリダ大)とAlderらは、固相-流動(Alder)相転移近傍のモラセステールを研究し、速度相関関数のロングタイムテールにおける流体力学的起源(Alder&Wainwright, 1970; Isobe, 2008,2009)とは異なる機構(応力場の構造緩和)で生じるという仮説を立てた。Laddらの研究は、当時の計算機の制限により未解決問題となっていたため、大規模計算を実行しこの問題の解明を試みた。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。さらに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解析を行った(Isobe&Alder, 2009, 2010)。

## 2. 研究の目的

本研究では研究代表者の成果を基礎に、高密度、高次元、重力場、複雑な幾何学や境界条件の下での粉体の非平衡輸送と微視的原理の解明をめざし、理論と大規模シミュレーションの双方から新しい方法論の開発と全密度領域の粉体輸送現象の統一的解明をめざすことを目的とした。プロジェクトは大きく4つのステージにわけ、研究を發展させた。

(1) 1次元系で確立された粉体応答理論を擬1次元系に拡張し、理論の妥当性を検証する。

(2) 高次元、高密度、重力場の大きさ、様々な境界の影響を考慮する。

(3) 粉体気体系の乱流化現象において、3次元系への拡張を行い「統計則と乱流化の起源」

を探る。

(4) 高密度粉体系輸送現象に関して多体相関関数を解析する新しい方法論を開発し、「ジャミング転移」などの微視的起源を解明する。

### 3. 研究の方法

半世紀の歴史を持つ計算統計物理学は、初期のAlder転移の発見以来、計算機の演算能力の著しい発展に伴い飛躍的に発展し、ますます重要性が増している。剛体球分子動力学法(Event-Driven MD)は、状態方程式や輸送係数などの物理量をはじめ、平衡・非平衡現象を直接計算する重要な方法論を提供している。近年まで続く高速アルゴリズム開発や高速計算機の発展により、数百万粒子以上の大規模計算がパソコンでも実行可能となり、従来の理論研究の手法として確立された気体運動論や典型的な流体力学方程式に支配される現象と相補的な地位を確立している。また剛体球系は単純さゆえに、モデルや境界条件に少し変更を加えることにより、広範な非平衡物理現象を数値的に厳密に研究することができるという大きなメリットがある。しかし非平衡系特有の巨視的パターン形成や輸送現象の解析は、空間パターンが成長するほどの大規模かつ長時間の計算が必要なため未開拓であった。研究代表者は10年以上前に、非平衡系に適用できる高速な剛体球MDのアルゴリズム開発(Isobe,1999)を行い、理論では扱えない様々な現象の解析を行ってきた。これまでの研究成果により、剛体球MDは新しい理論や解決困難な難問に対し検証(解決)能力があることが実証されている。本研究においても、剛体球MDを基礎に効率的に研究を遂行した。

### 4. 研究成果

(1) 粉体気体系の自由冷却過程において、2次元準弾性衝突極限のテイラースケールレイ

ノルズ数を導出し、乱流領域に到達することを確認した(Isobe, IJMPC, 2012)。また、3次元系のコルモゴルフスケール則を確認した。さらに緩和の後期過程における粉体クラスタ間衝突に起因する衝撃波現象を見出した(Isobe, JPC, 2012)。このクラスタ衝突は、数百万粒子系以上の系でしか検知できず、これまでに提案された理論予測とも一致しない。これらの成果は、無次元数の定量化により流体乱流との直接比較も可能となり、粉体気体系の精密な統計則を探る上でさらなる新しい理論発展の基礎となると期待される。

(2) 1次元系で確立された応答理論を基礎に、擬1次元系の粉体振動層において、重心揺らぎを有効温度に修正した揺動散逸定理とそれに基づく応答理論を構築しシミュレーションとの比較により理論の妥当性を検証した(Wakou&Isobe, PRE, 2012)。この研究では、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詳細な解析を行い、理論の適用範囲を調べた。その結果、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。揺動散逸関係を見直し、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ることで現象論の確立に成功した。

(3) 高密度剛体球系の融点近傍で生じる「トランジェントな結晶」を定量化するため、新しい方法論「一般化配向秩序変数」と「動的多体相関関数法」を開発した。

① 最近接結合秩序パラメータの高次(第2、第3)近接シェルへの拡張。

② 配向因子相関関数における近接シェル内粒子の時空粗視化による高速化。

②は高密度粒子系のシアストレスや結晶核な

どの時空間相関関数を高速に計算できる手法で、従来の計算に比べ約2桁程度の高速計算が実現し、従来は不可能とされた4体2時刻配向因子自己相関関数の距離依存性の解析も可能となった (Isobe&Alder, JCP, 2012)。開発された方法論は、高密度液体の時空構造解析のみならず、高密度ガラス・粉体系の非平衡相転移現象解析(精密化)にも応用できると考えられ成果の発展に大きく貢献することが期待できる。

(4) 近年(「Statistical Mechanics: Algorithms and Computations」(Oxford)の著書でも著名な) W. Krauth 氏 (ENS-Paris) らは、従来の Monte Carlo(MC)法とは全く異なるEvent-Chain MCという高速な方法論を開発した(2009)。この方法では、粒子衝突まで直線運動させ、次々に起こる衝突連鎖を1つのイベントとして扱い、棄却がないため、高密度系で高速計算が可能となる。高密度系では粒子が頻繁に衝突を繰り返す、相転移が伴うような大規模系では平衡状態緩和に非常にシミュレーション時間を要する。平衡状態作成の計算時間短縮(Event-Chain MC)と動的物理量解析(Event-Driven MD)の2つの相補的な長所を生かし、パリ滞在中(2012.3)高速ハイブリッド法を完成させた。同じころ、ミシガン大学(Sharon Glotzer氏のグループ)でGPUを用いた剛体球系の超並列MC法が開発され(2013)、日米仏の3極(ミシガン大学、ENS、研究代表者)で50年来の難問である「2次元剛体球系の融解問題現象」に関して共同研究を遂行した。3つの独立な方法論で約100万粒子系の世界最大規模最高精度の状態方程式が完全な一致を示し、液相-Hexatic相間の1次相転移が示された。方法論の有用性を確認したのみならず、過去の論争の原因が明瞭となり、2次元融解の全容解明に向けて大きく貢献したため、CNRSなどからプレスリリースが刊行され、大きな注目を集めた(Engel & Anderson & Glotzer & Isobe & Bernard & Krauth, PRE, 2013)

本研究で得られた成果は、雑誌論文9本(内、査読付5本)、国内外の講演19件(内、特別・招待・依頼講演6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 9 件)

1. M. Engel, J. A. Anderson, S. C. Glotzer, M. Isobe, E. P. Bernard and W. Krauth, “Hard Disk Equation of State: First-Order Liquid-Hexatic Transition in Two Dimensions with Three Different Simulation Methods”, *Phys. Rev. E*, **87**, 042134 (1-8) (2013). 【査読有】
2. 磯部雅晴, 「カリフォルニア大学バークレー校滞在記」, 分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」, **15**, pp.250-260 (2013). 【査読無】
3. 磯部雅晴, 「高密度剛体球系における遅い緩和の起源:トランジェントな結晶化と高次秩序変数-2つの新しい方法論-」, 分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」, **15**, pp.186-196 (2013). 【査読無】
4. M. Isobe, “Statistical Law of Turbulence in Granular Gas”, *Journal of Physics: Conference Series*, **402**, 012041(1-8) (2012). 【査読有】  
DOI: 10.1088/1742-6596/402/1/01241
5. M. Isobe and B. J. Alder, “Generalized Bond Order Parameter to Characterize Transient Crystals”, *The Journal of Chemical Physics*, **137**, 194501(1-9) (2012). 【査読有】 DOI: 10.1063/1.4767061
6. J. Wakou and M. Isobe, “Fluctuation-Dissipation Relations for Motions of Center of Mass in Driven Granular Fluids under Gravity”, *Physical Review E*, **85**,

061311(1-12) (2012). 【査読有】 DOI:  
10.1103/PhysRevE85.061311

7. M. Isobe, “Granular Turbulence in Two Dimensions---Microscale Reynolds Number and Final Condensed States---”, *International Journal of Modern Physics C*, **23**, 1250032(1-11) (2012). 【査読有】 DOI:10.1142/S0129183112500325
8. 磯部雅晴, 「Ecole Normale Superieure, Paris 滞在記」, 分子シミュレーション研究会会誌「アンサンブル」, **14**, pp.162-167 (2012). 【査読無】 DOI: 10.1103/PhysRevE87.042134
9. 磯部雅晴, 「2次元粉体乱流の相対拡散と統計則」, 物性研究 **96**, pp.123-124 (2011). 【査読無】

[学会発表] (計 19 件)

(平成 25 年度)

1. M. Isobe and D. Chandler, “Dynamic Facilitation and Non-equilibrium Transition in an Atomistic Model of Binary Hard Disk Systems”, 2014 Mini Stat. Mech. Meeting (Dept. of Chemistry, U.C.Berkeley, USA) (2014.1.10-12)
2. M. Engel, J. A. Anderson, S. C. Glotzer, M. Isobe, E. P. Bernard and W. Krauth, “Hard Disks Equation of State: First-Order Liquid-Hexatic Transition in Two Dimensions with Three Different Simulation Methods”, 2013 AIChE Annual Meeting (San Francisco, CA, USA) (2013.11.3-8)
3. 磯部雅晴, 「カリフォルニア大学バークレー校滞在記ー剛体球系の最近の発展、時空アンサンブル法の紹介ー」第4回計算統計物理学研究会 (山口大学: 宇部市) (2013.10.5-6) 【依頼講演】
4. M. Engel, J. A. Anderson, S. C. Glotzer, 磯

部雅晴, E. P. Bernard, W. Krauth, 「2次元剛体球系の融解現象: 3つの独立な手法による大規模数値シミュレーション」日本物理学会 2013 年秋季大会 (徳島大学: 徳島) (2013. 9.25-28)

5. M. Isobe, “Cluster Impact and Shock Wave Propagation in Freely Evolving Granular Gas”, STATPHYS25 (Seoul National University, Korea) (2013.7.22-26)

(平成 24 年度)

6. J. A. Anderson, M. Engel, S. C. Glotzer, M. Isobe, E. P. Bernard and W. Krauth, “Hard Disks Equation of State: First-Order Liquid-Hexatic Transition in Two Dimensions with Three Different Simulation Methods”, APS March Meeting (Baltimore, MD, USA) (2013.3.18-22)
7. M. Isobe and B. J. Alder, “Generalized Order Parameter for Establishing Transient Crystals”, APS March Meeting (Baltimore, MD, USA) (2013.3.18-22)
8. M. Isobe and B. J. Alder, “Generalized Order Parameter for Establishing Transient Crystals”, 2013 Mini Stat. Mech. Meeting (Dept. of Chemistry, U.C.Berkeley, USA) (2013.1.11-13)
9. M. Isobe, “Molecular Simulation in the Non-Equilibrium Statistical Physics ---Event-Driven Molecular Dynamics and its Applications---”, Seminar at Prof. Glotzer’s Group (Univ. of Michigan, Ann. Arbor, USA) (2012.9.28) 【Invited Seminar】
10. M. Isobe, “Higher Order Parameter for Establishing Transient Crystals”, Seminar at Prof. Chandler’s Group (Dept. of Chemistry, U.C.Berkeley, USA) (2012.9.6) 【Invited Seminar】

(平成 23 年度)

11. M. Isobe, “Higher Order Parameter for Establishing Transient Crystals”, Seminar of Theory and Simulation (Laboratoire Charles Coulomb, Universite de Montpellier II, Montpellier, France) (2012.3.16) 【Invited Seminar】
12. M. Isobe, “Higher Order Parameter for Establishing Transient Crystals”, Seminar of Statistical Physics of Complex Systems (Laboratoire de Physique Theorique, Univ. Paris-Sud 11, Orsay, France) (2012.3.8) 【Invited Seminar】
13. M. Isobe and B. J. Alder, “Higher Order Parameter for Establishing Transient Crystals”, Unifying concepts in glass physics V (Institut Henri Poincare, Paris, France) (2011.12.13)
14. 磯部雅晴, Berni J. Alder, 「高密剛体球系における遅い緩和の起源：トランジェントな結晶化と高次秩序変数」第 25 回分子シミュレーション討論会 (東京工業大学: 東京) (2011. 12.6)
15. M. Isobe, “Molecular Simulation in the Non-Equilibrium Statistical Physics ---Event-Driven Molecular Dynamics and its Applications---”, ノースカロライナ大学物理学科セミナー(Charlotte, TN, USA) (2011.11.4) 【Invited Seminar】
16. M. Isobe, “Statistical Law of Turbulence in Granular Gas”, Conference on Computational Physics 2011 (Gatlinburg, TN, USA) (2011.10.31)
17. 磯部雅晴, Berni J. Alder, 「高密剛体球系における遅い緩和の起源：トランジェントな結晶化と高次秩序変数」日本物理学会 2011 年秋季大会 (富山大学：富山) (2011. 9.23)
18. M. Isobe and B. J. Alder, “Higher Order Parameter for Establishing Transient Crystals”, 8th Liquid Matter Conference (Wien, Austria) (2011.9.8)
19. 若生潤一, 磯部雅晴, 「鉛直加神された粉体気体系における重心運動」, 基研研究会 2011 非平衡系の物理ーミクロとマクロのかけ橋 (京都大学基礎物理学研究所：京都) (2011.8.19)

〔その他〕

ホームページ等

【4. 研究成果(4)に関して】

・フランス国立科学センタープレスリリース：  
<http://www.cnrs.fr/inp/spip.php?article1799>

【研究代表者ホームページ】

<http://stat.fm.nitech.ac.jp/~isobe>

## 6. 研究組織

### (1)研究代表者

磯部 雅晴 (ISOBE MASAHARU)

名古屋工業大学・工学(系)研究科(研究院)・助教

研究者番号：80359760