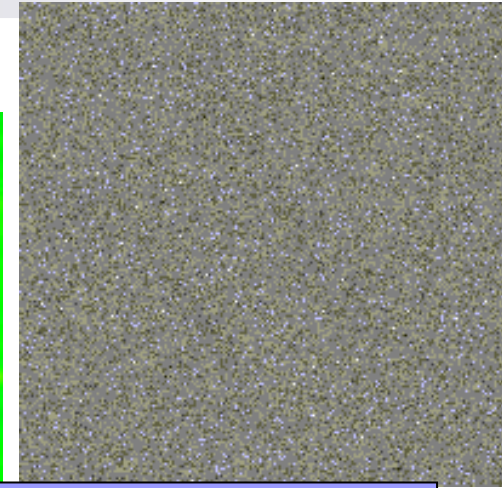
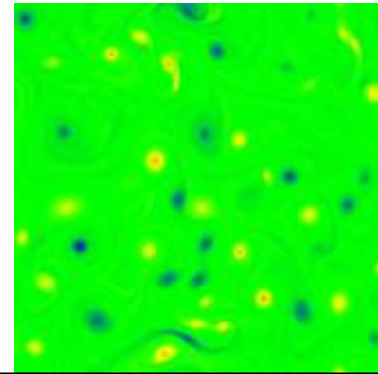
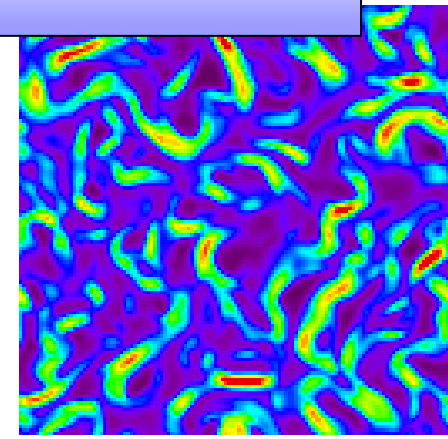
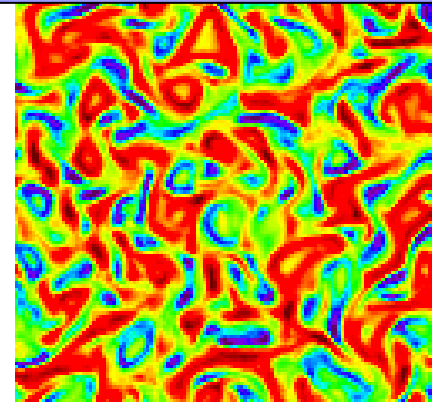
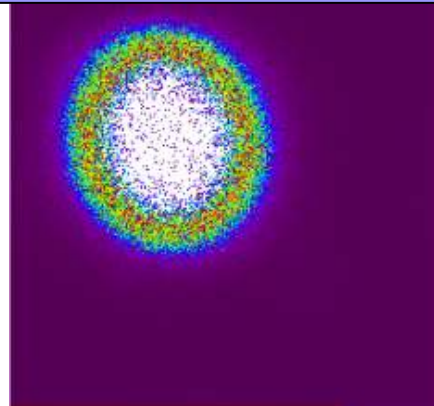
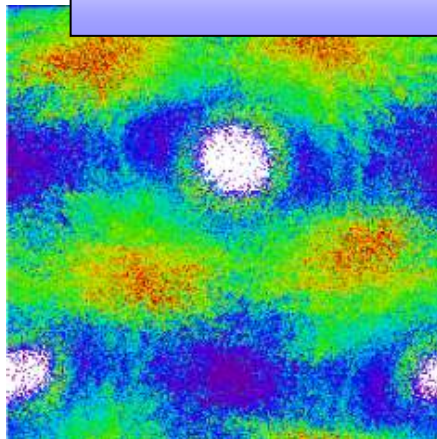


ワークショップ「惑星科学と粉体物理の接点を探る」
神戸大学惑星科学研究センター
神戸, 2010.11.22-23



粉体気体系の分子シミュレーション —乱流化と非平衡定常状態—



名古屋工業大学 磯部雅晴

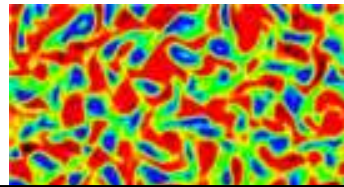
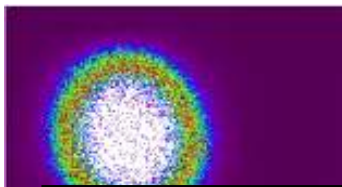
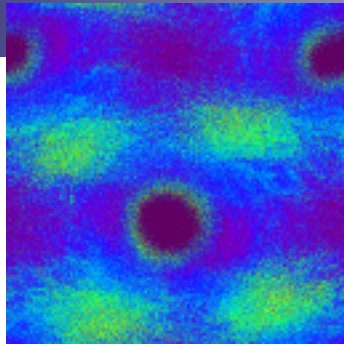
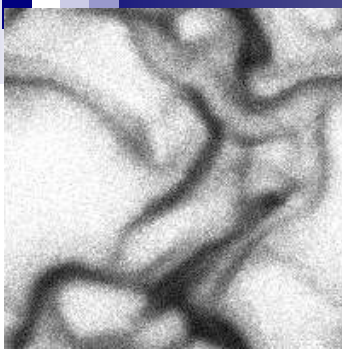
isobe@nitech.ac.jp

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

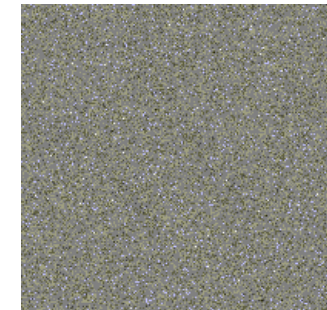
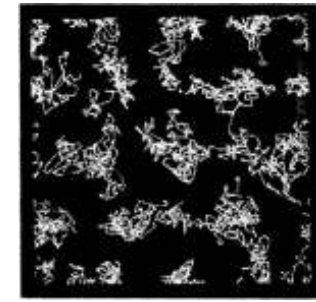
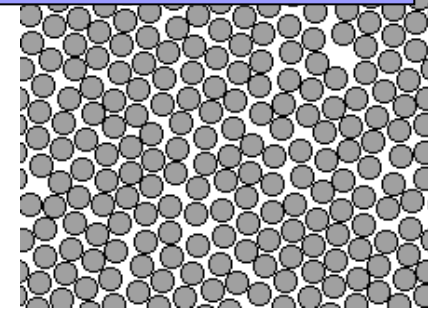
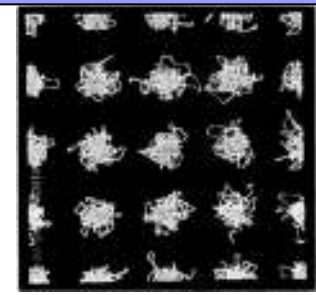
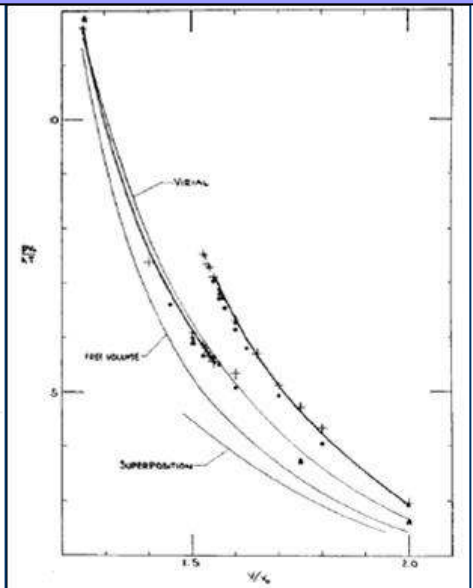
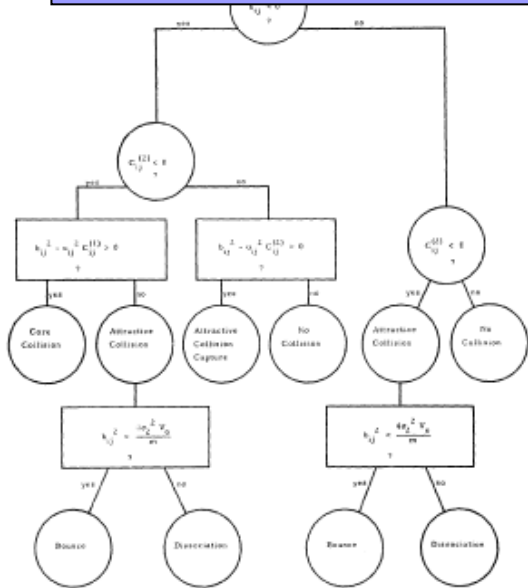
アウトライン



1. イベントドリブン型分子動力学法
(Event-Driven Molecular Dynamics)
2. 2次元粉体気体の乱流化と統計則
(Granular Turbulence in Two Dimensions)
3. 重力下粉体気体系の重心運動についての新しい現象論と揺動散逸関係の破れ
(Granular Gas under Gravity)
4. 今後の展望



1. イベントドリブン型分子動力学法 (Event-Driven Molecular Dynamics)



イベントドリブン型分子動力学法 (Event-Driven MD)

- 分子動力学法

ニュートンの運動方程式を計算機を使って直接解くことにより多体系の動力学を研究する重要な方法論

- イベントドリブン型分子動力学法 (Alder&Wainwright 1957)
- タイムステップドリブン型分子動力学法 (Rahman 1964, Verlet 1967)

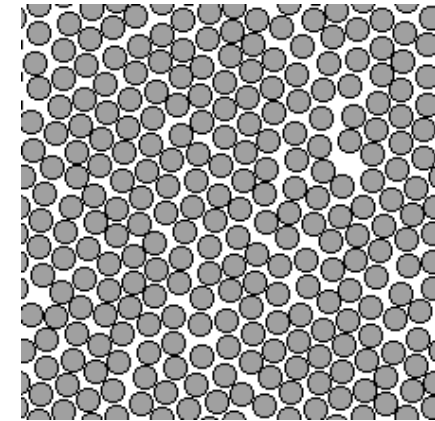
- イベントとは何か?

粒子間衝突, 境界(弾性壁、熱壁など)との衝突、サブセル通過など...

- イベントスケジューリング

効率化のエッセンス:

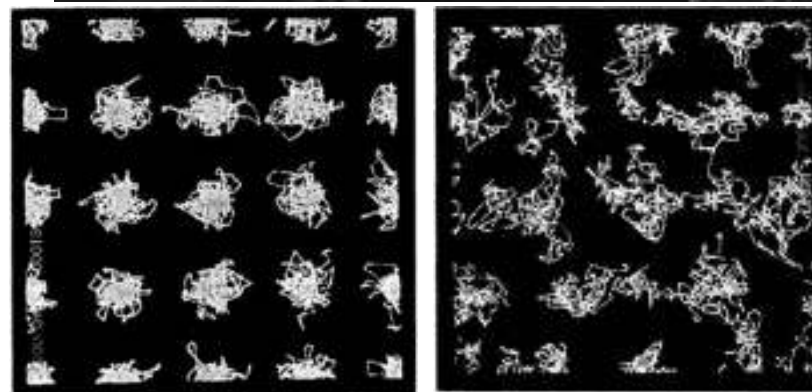
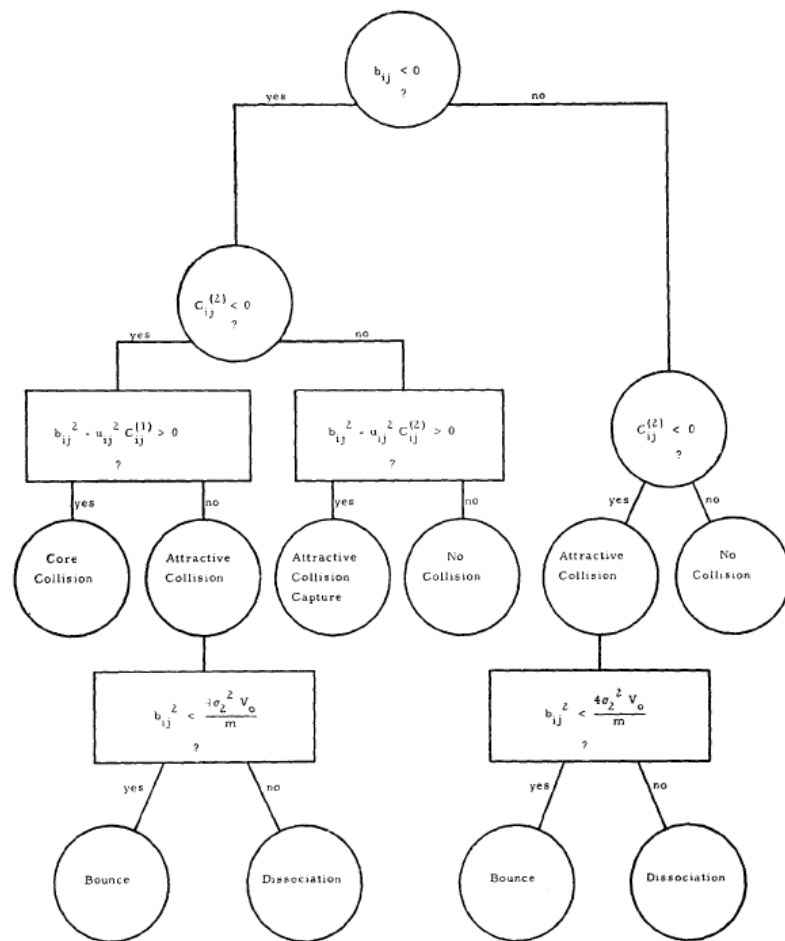
粒子間衝突の中で最も短い時間を効率よく探すこと



磯部雅晴, 剛体球系分子動力学シミュレーション —方法論の歴史的発展と大規模シミュレーションへの応用—, 日本物理学会誌 Vol.10 pp.748-753 (2007).

Historical Review of Event-Driven MD

Alder and Wainwright, J.Chem.Phys. 31, 459 (1959). **Pioneer Paper of MD**
Studies in Molecular Dynamics. I. General Method



Generalized algorithm of Event-Driven MD including Square-Well potential.

イベントドリブンMDの最も単純なアルゴリズム

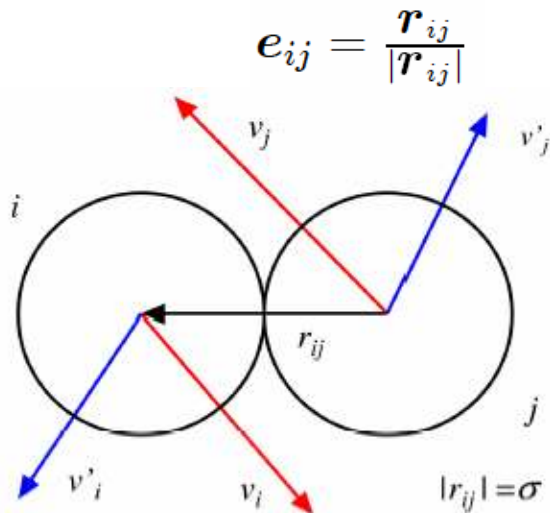
剛体球ポテンシャル

$$\phi(r) = \begin{cases} \infty & (r \leq \sigma) \\ 0 & (r > \sigma) \end{cases}$$

衝突則

$$\mathbf{v}'_i = \mathbf{v}_i - [(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \mathbf{e}_{ij}] \mathbf{e}_{ij}$$

$$\mathbf{v}'_j = \mathbf{v}_j + [(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \cdot \mathbf{e}_{ij}] \mathbf{e}_{ij}$$



粒子位置と速度からすべての粒子ペア (i, j) について衝突する時間を計算する. $O(N^2)$

最短の時間で衝突する粒子ペアを探す t_{\min} . $O(N)$

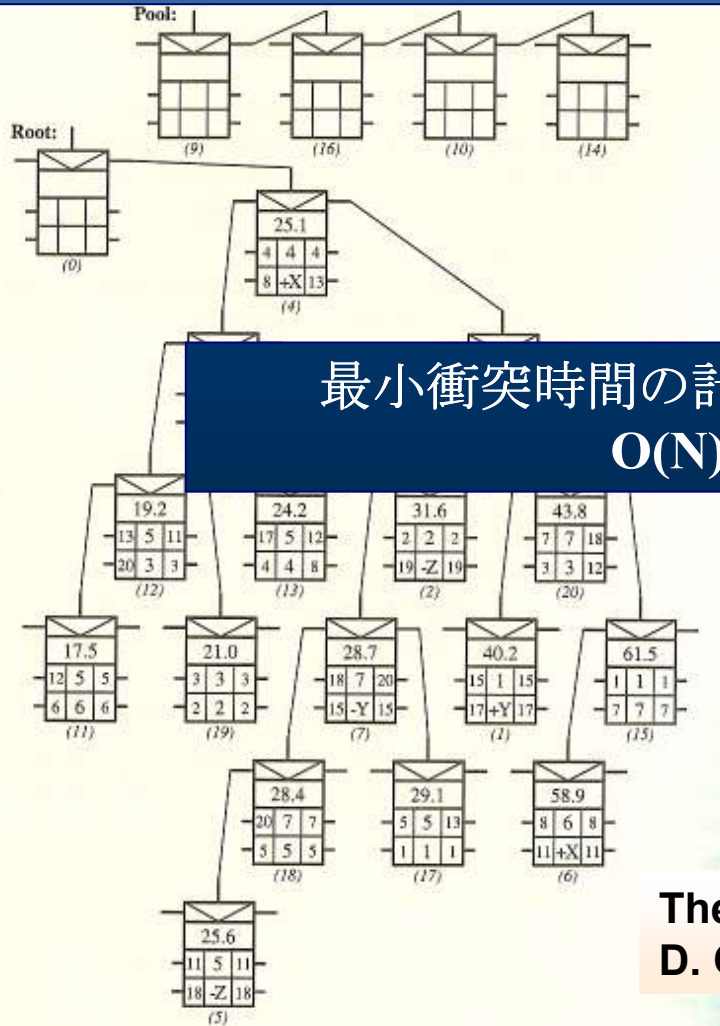
すべての粒子を上で求めた最短時間だけ進める t_{\min} . $O(N)$

衝突則を使って、衝突後の粒子の速度を計算する. $O(1)$

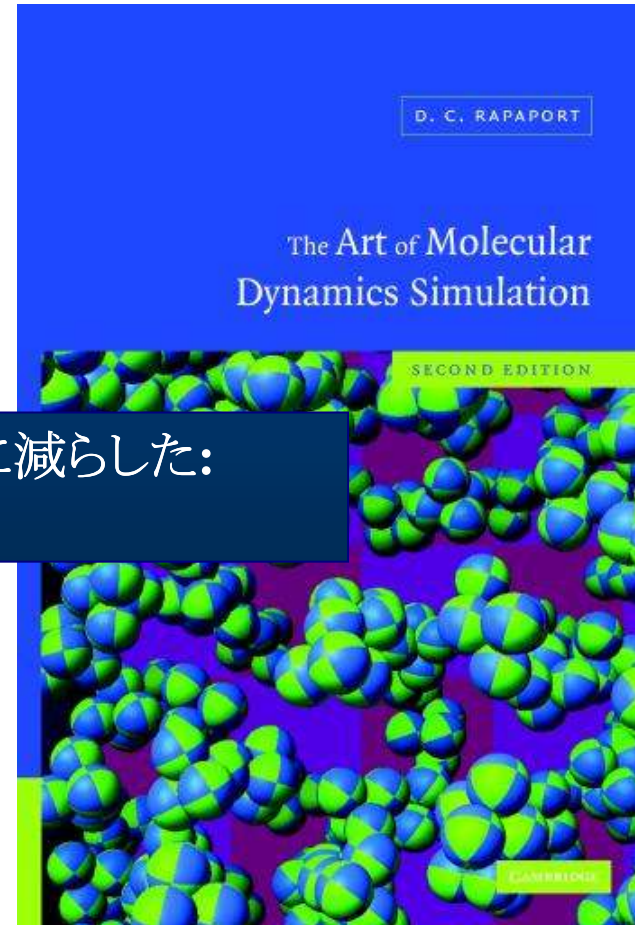
衝突に関与した粒子ペアに関して、次の衝突の時間を再計算する. $O(N)$

イベントドリブンMDのアルゴリズム発展の歴史

D.C.Rapaport, J. Comp. Phys. 34, 184 (1980).



最小衝突時間の計算量を劇的に減らした:
 $O(N) \rightarrow O(\log N)$



The Art of Molecular Dynamics Simulation - 2nd edn
D. C. Rapaport (Cambridge University Press, 2004)

2分探索木を使用: イベントドリブン分子動力学法の本質的なブレークスルー

イベントドリブンMDのアルゴリズム発展の歴史

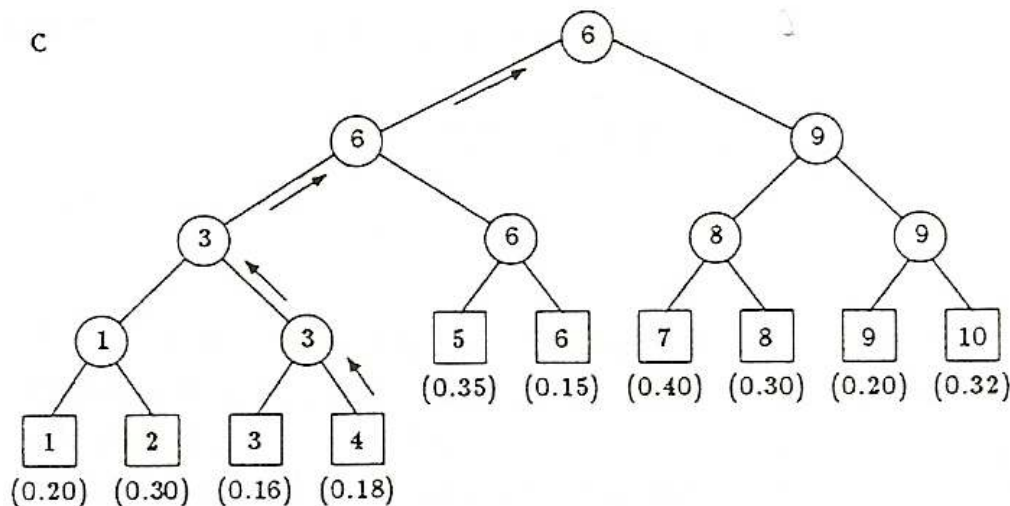
しかし、Rapaport (1980) のアルゴリズムはとても複雑すぎて理解しづらく、プログラミングコード作成には大変な困難を要する。90年代に入り、Rapaportの論文を基礎にデータ構造を単純化させ簡略化させるいくつかの改良が行われた。

B.D.Lubachevsky, J.Comp.Phys. 94,255 (1991).

Heap Algorithm

M. Marin, D. Risso and P. Cordero, J.Comp.Phys. 109, 306 (1993)

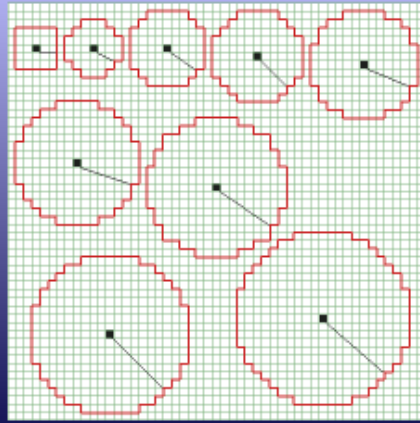
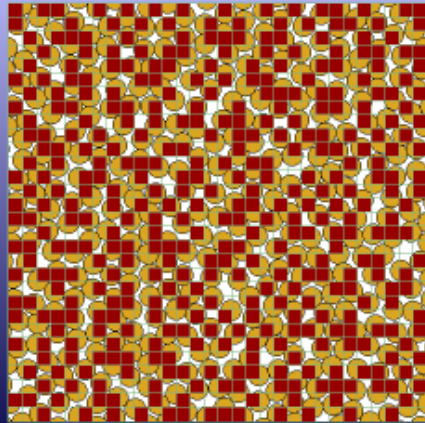
M. Marin and P. Cordero, Comp.Phys.Commun. 92, 214 (1995).



More efficient and simple algorithm by using Complete Binary Tree.

イベントドリブンMDのアルゴリズム発展の歴史

M.Isobe, Int. J. Mod. Phys.C 10, 1281 (1999).



- Extended Exclusive Grid Particle Method
- Dynamical Upper Time Cut-off
- Cell-Crossing Eventを考慮しない。

非平衡系に適用可能な単純で極めて効率的なアルゴリズムが完成した。

S. Muller and S. Luding,
J.Comput.Phys. 193, 306 (2004)

並列化への試み

A. Donev, S. Torquato and F.H.Stillinger,
J. Comput. Phys. 202, 737 (2005)

液晶系への応用

Development of Efficiency of Event-Driven MD

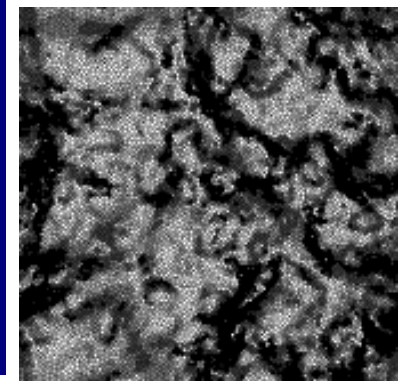
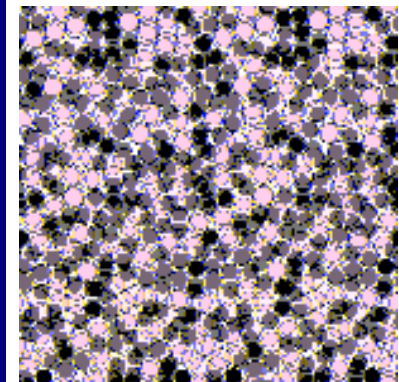
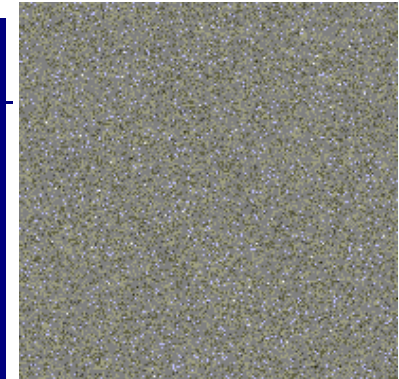
- **50 years ago...** Alder & Wainwright could perform only 2000 collisions per one (CPU) hour with 100 particles.

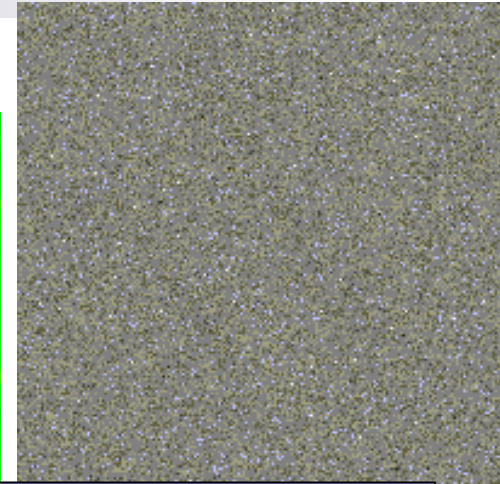
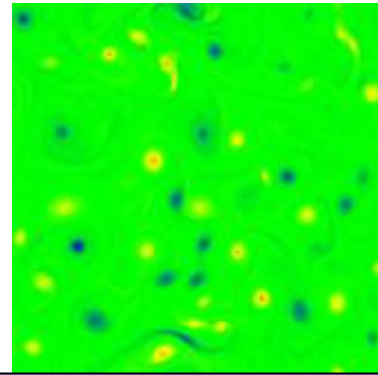
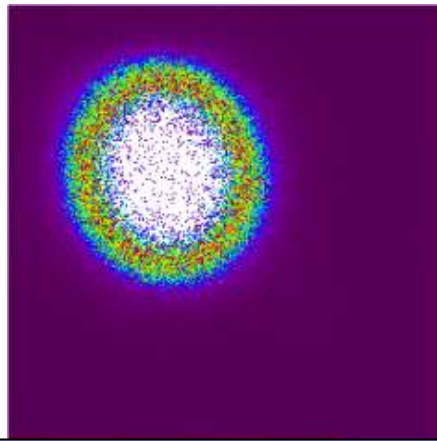
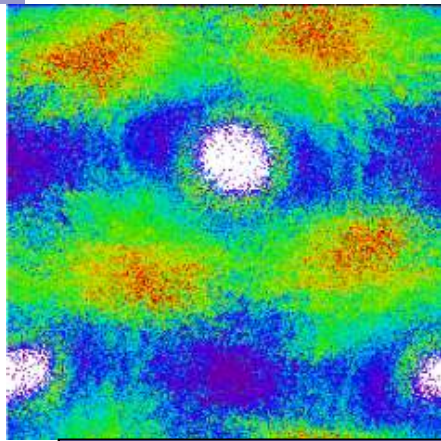
Authors	Published Year	Computer	Particle Number	Efficiency million coll. /h
Alder & Wainwright	1959	IBM704	100	0.002
Rapaport	1980	IBM370/168	256	1.060
Rapaport	1991	IBM3090E	57600	7.0
Marin et al.	1993	SUN690	2500	16.07
Isobe	1999	VT-Alpha 600	2500	460

- Now, we can perform **a few billion ($\sim 10^9$) collisions per one hour on the personal computer with one million particles.**

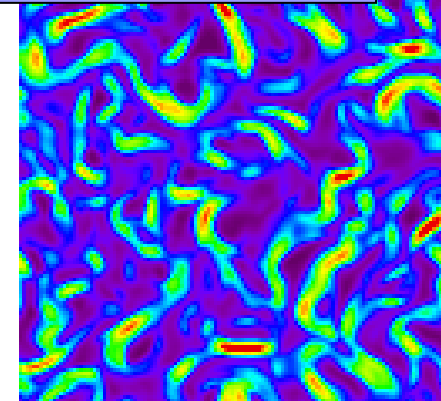
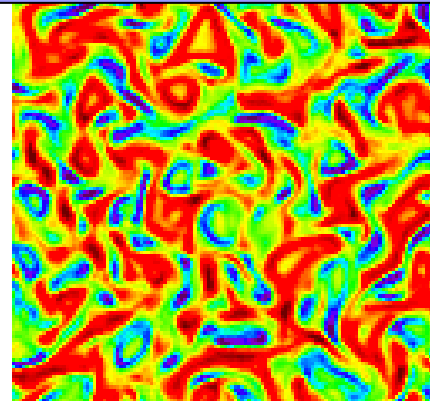
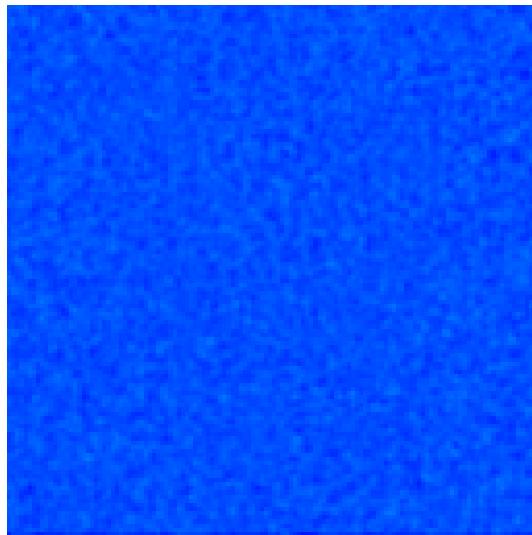
Event-Driven MDの多くの応用例

- イベントドリブン型分子動力学シミュレーションは、非平衡統計物理学のひとつの重要なツール
 - 2次元融解 (アルダー転移)
 - 2成分ガラスのシミュレーション
 - 流体力学の諸問題 (レイリーベナール対流, カルマン渦, レイリーテイラー不安定性, など..)
 - 化学反応系
 - 粉体気体(Granular Gas), 粉体シア流, 粉体振動層
 - 微小重力下でのコロイドの結晶化
 - 衝撃波
 - 低次元熱伝導問題と熱伝導率の発散
 - ロングタイムテールと輸送現象(輸送係数の発散)
1. 微小重力場中の粉体系の分岐(相転移) (PRE2001 他)
 2. 2次元粉体気体の乱流化 (PRE2003 他)
 3. 2次元ロングタイムテール問題 (PRE 2008 他)
 4. シアストレス自己相関関数とモラセステール (Mol.Sim.2009 他)
 5. 粉体系の非平衡定常状態と新しい現象論 (JPSJ2008 他)





2. 2次元粉体気体系の乱流化と統計則 (Granular Turbulence in Two Dimensions)



名古屋工業大学 磯部雅晴

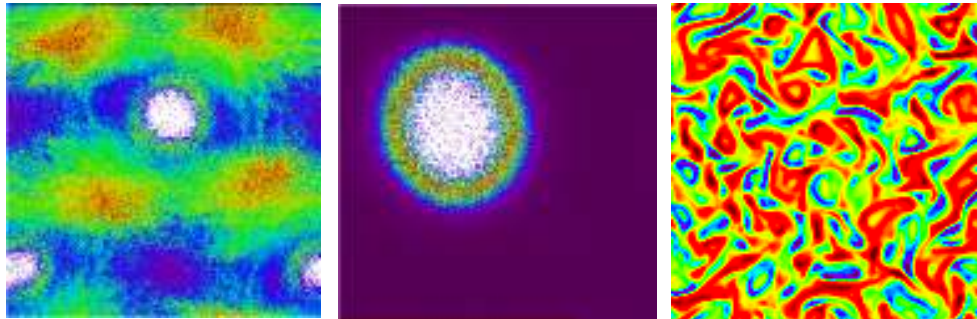
isobe@nitech.ac.jp

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

粉体気体(Granular Gas) 再訪

- 1993年のGoldhirsh&Zanetti(PRL.70,1619)の記念碑的論文以来、粉体自身の運動の時間スケールに比べ外場(重力、振動板など)で特徴づけられる運動の時間スケールがはるかに小さい系(すなわち微小重力、高励起)に対し、非平衡統計物理学の伝統的手法を拡張した系統的研究が展開され、一大分野として確立されている。
- この分野は特に、粉体気体(Granular Gas)と呼ばれ、何冊かの本や系統的レビューも出版されている。

- T. Pöschel & S. Luding (Eds.), *Granular Gases* (Lecture Note in Physics, 564), Springer (2001).; T. Pöschel & N. Brilliantov (Eds.), *Granular Gas Dynamics* (Lecture Notes in Physics, 624), Springer (2003).; N. Brilliantov & T. Pöschel, *Kinetic Theory of Granular Gases*, Oxford University Press (2004).; T. Pöschel & T. Schwager, *Computational Granular Dynamics*, Springer (2004).; I. Goldhirsch, *Rapid Granular Flows*, Annu.Rev.Fluid.Mech.35, 267 (2003).



- 粉体気体(Granular Gas)を2次元乱流(Two-Dimensional Turbulence)の観点から研究を遂行する。

自由冷却粉体気体とは何か？

極限系においては、
系統的な研究はほとん
どない。

外場がない
初期状態が熱平衡状態
非弾性剛体球系

システムサイズ(粒子数)

熱力学極限

密度(占有率)

非圧縮極限

反発係数

準弾性極限

粒子間の非弾性衝突により
いくつかの時空スケールが出現

時間発展

空間パターン

3つの階層による主な解析手段

一様冷却状態(Homogeneous Cooling State)

シアリング不安定性 (Shearing Instability)

クラスター不安定性(Clustering Instability)

最終アトラクター状態(Final Attractor State)

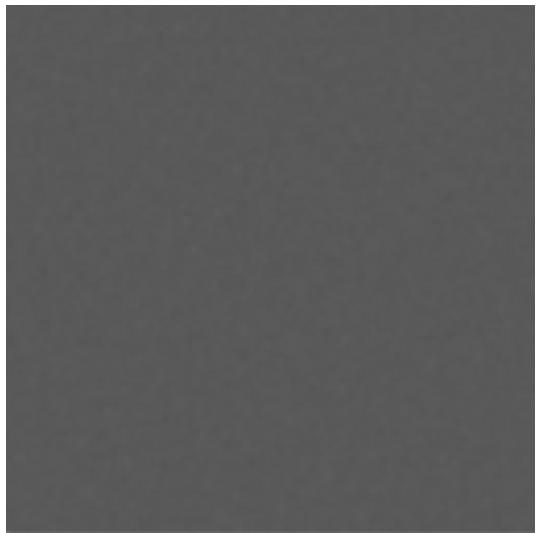
非弾性コラプス(Inelastic Collapse)

マクロ(流体力学的現象論)

メソ(気体運動論)

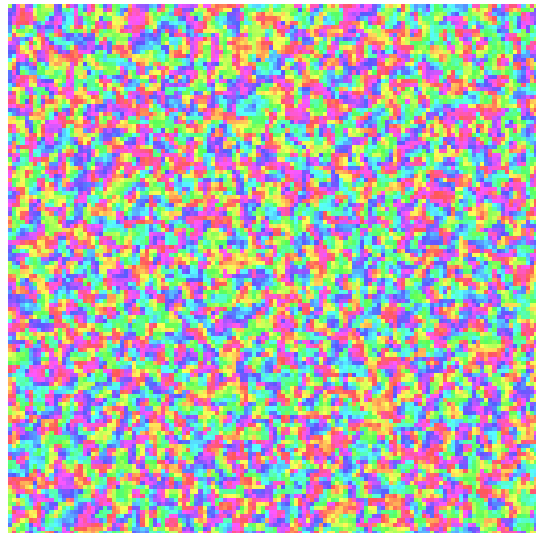
ミクロ(分子動力学)

密度場

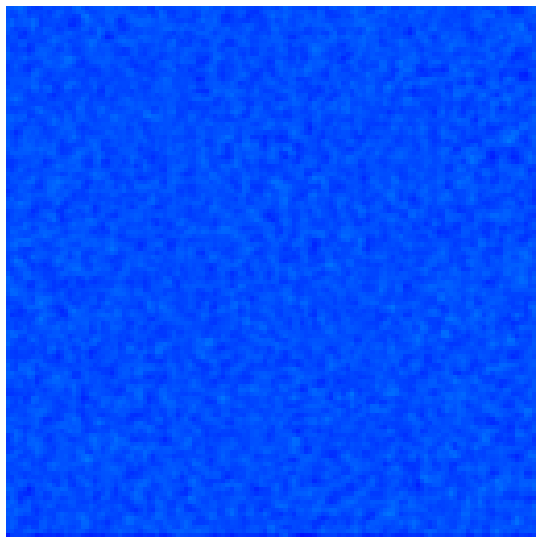


速度場

u

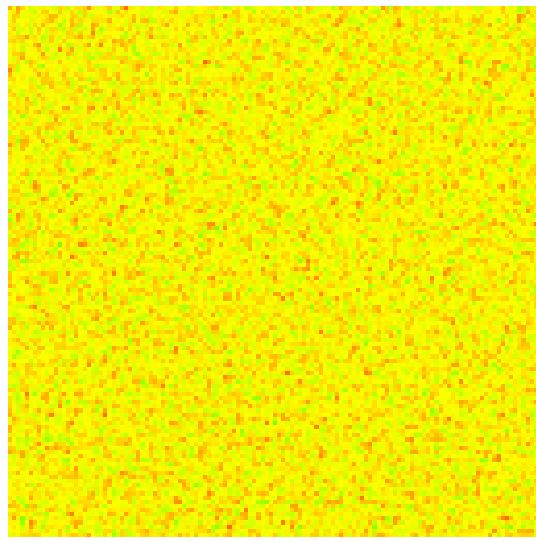


N=4.19 million
 $\nu=0.60$
 $r=0.996368$
C/N=6956



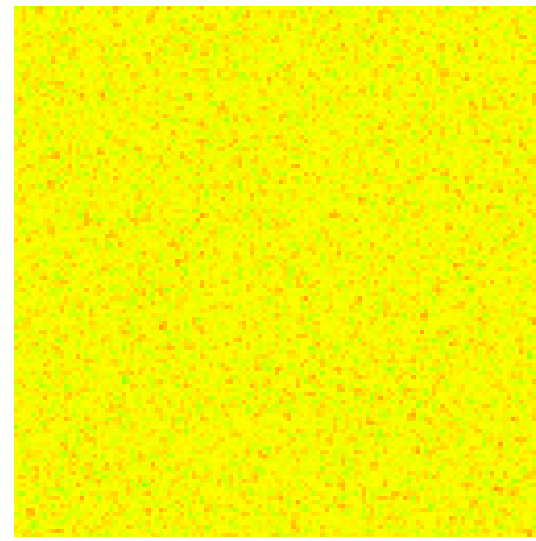
温度場

u^2



圧縮場

$divu$



渦度場

$rotu$

時間発展

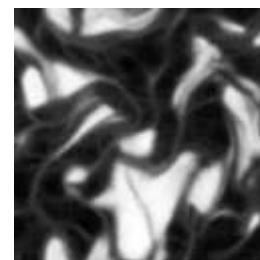
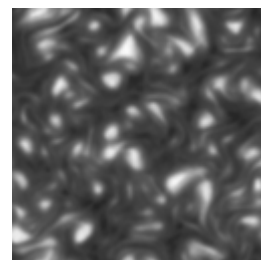
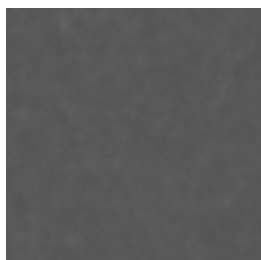
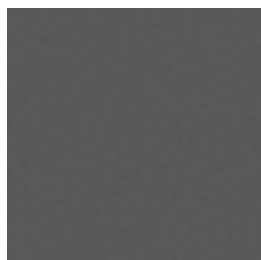
HCS

Shearing

Clustering

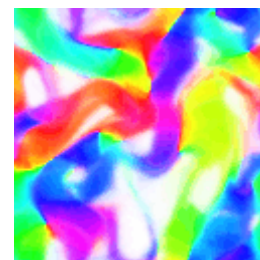
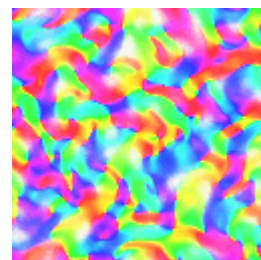
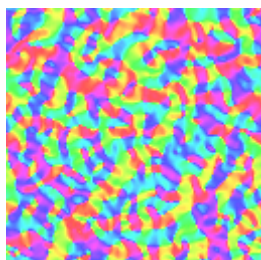
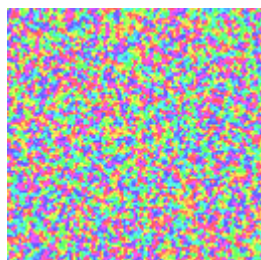
Final Attractor

密度場



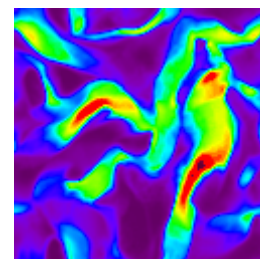
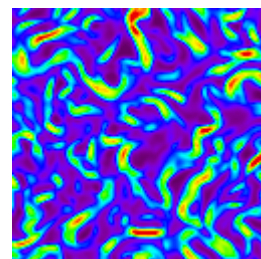
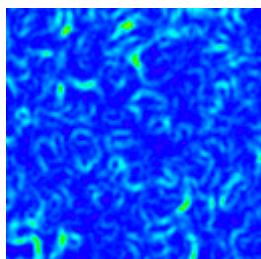
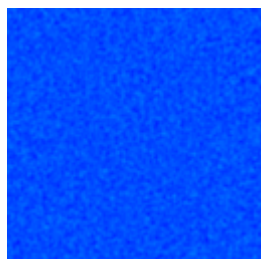
$N=2048^2$
 $\nu=0.60$
 $r=0.996$

速度場



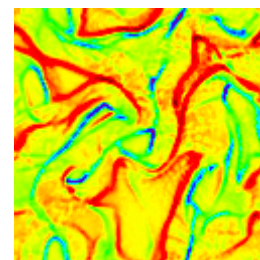
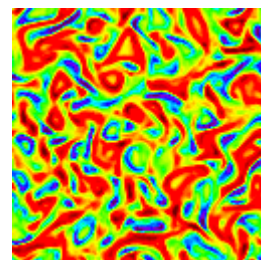
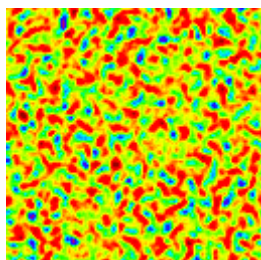
温度場、渦度場の
 パワースペクトル
 がエネルギースペ
 クトル、渦度スペク
 トル

温度場



→ $E(k)$

渦度場



→ $Z(k)$

Initial State

Onset of 3rd Stage

Final Steady State

2次元乱流現象を起こすひとつの単純なモデル

Isobe, *PRE* 68, 040301 (2003).

2003年に行われたEvent-Driven MDを用いた大規模計算では、自由冷却粉体気体の**2次元非弾性剛体球(IHS)系に決定論的熱浴(速度スケーリング)**を課したモデル系において、2次元乱流に特有ないくつかの現象が発見され、**2次元流体乱流で予測されたスケーリング指数そのものが(初めて)得られた。**

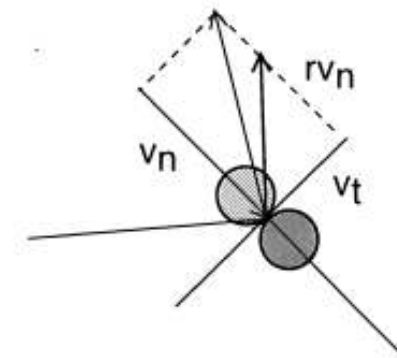
2次元非弾性剛体球(剛体円板)モデルはとても単純なモデルである→

初期条件 & 境界条件

熱平衡状態(密度は一様、速度はマックスウェル分布)

2次元周期境界条件、無重力状態

発達した乱流を研究するため、メソ、マクロな理論解析が不可能な領域に着目し、初期から最終状態に至るまでの長時間かつ広範なパラメータ空間における乱流化とエネルギー & 渦度スペクトル、散逸スケールなどの**空間構造の形成や相関関数の時間発展、スケーリングの性質**に関して系統的に調べることを目標。

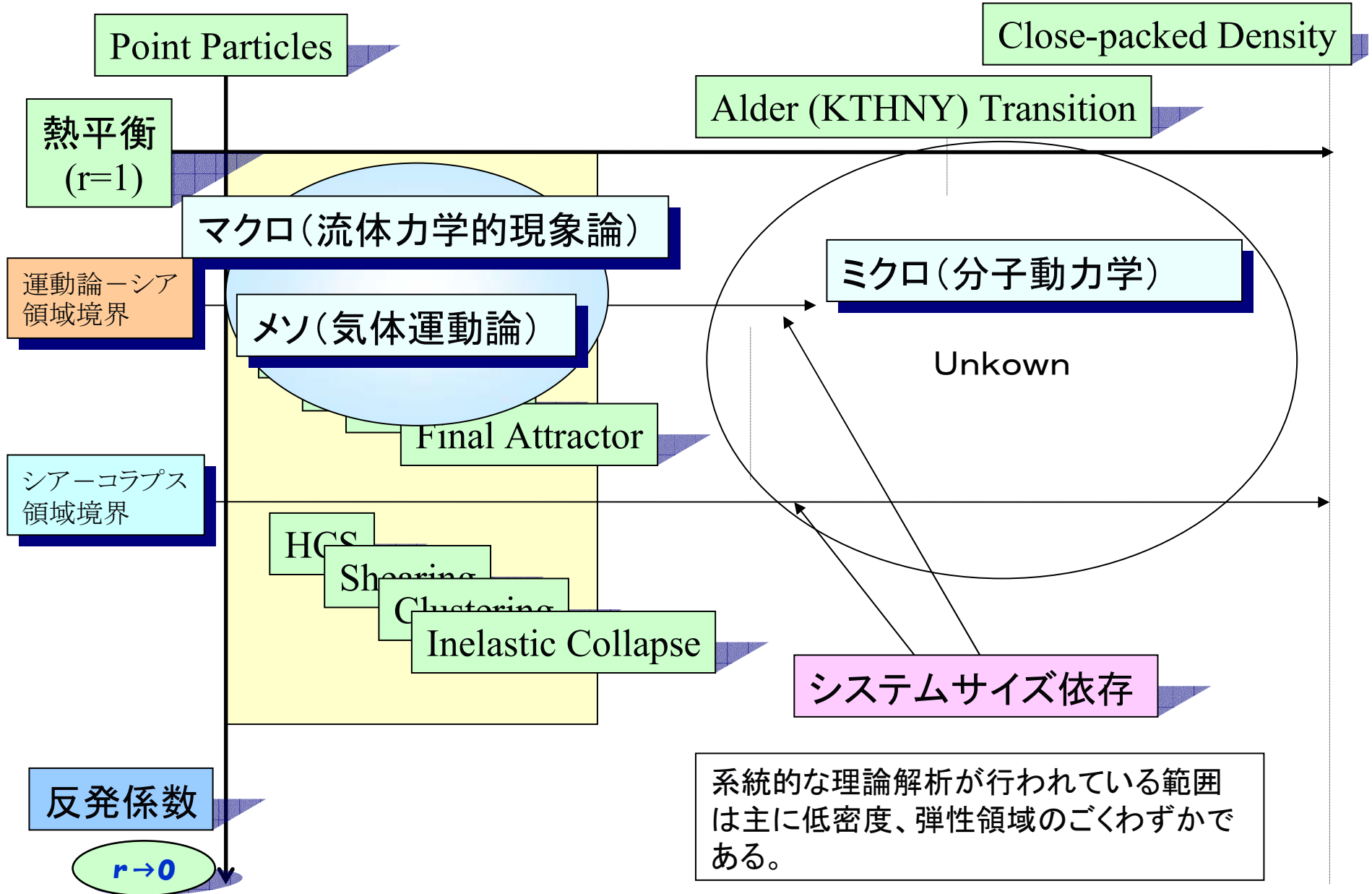


$$\mathbf{v}_i' = \mathbf{v}_i - \frac{1}{2}(1+r)[\mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)]\mathbf{n},$$

$$\mathbf{v}_j' = \mathbf{v}_j + \frac{1}{2}(1+r)[\mathbf{n} \cdot (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)]\mathbf{n},$$

自由冷却粉体気体の相図(反発係数-密度空間)

密度(占有率)



自由冷却粉体気体の時間発展のシナリオ

低密度系($v < 0.55?$)

時間発展

平衡状態
($r=1$)

運動論-シア
領域境界

シア-コラプス
領域境界

マクロ(流体力学的現象論)

メソ(気体運動論)

ミクロ(分子動力学)

Clustering

Final Attractor

Unkown

HCS

Shearing

Clustering

Inelastic Collapse

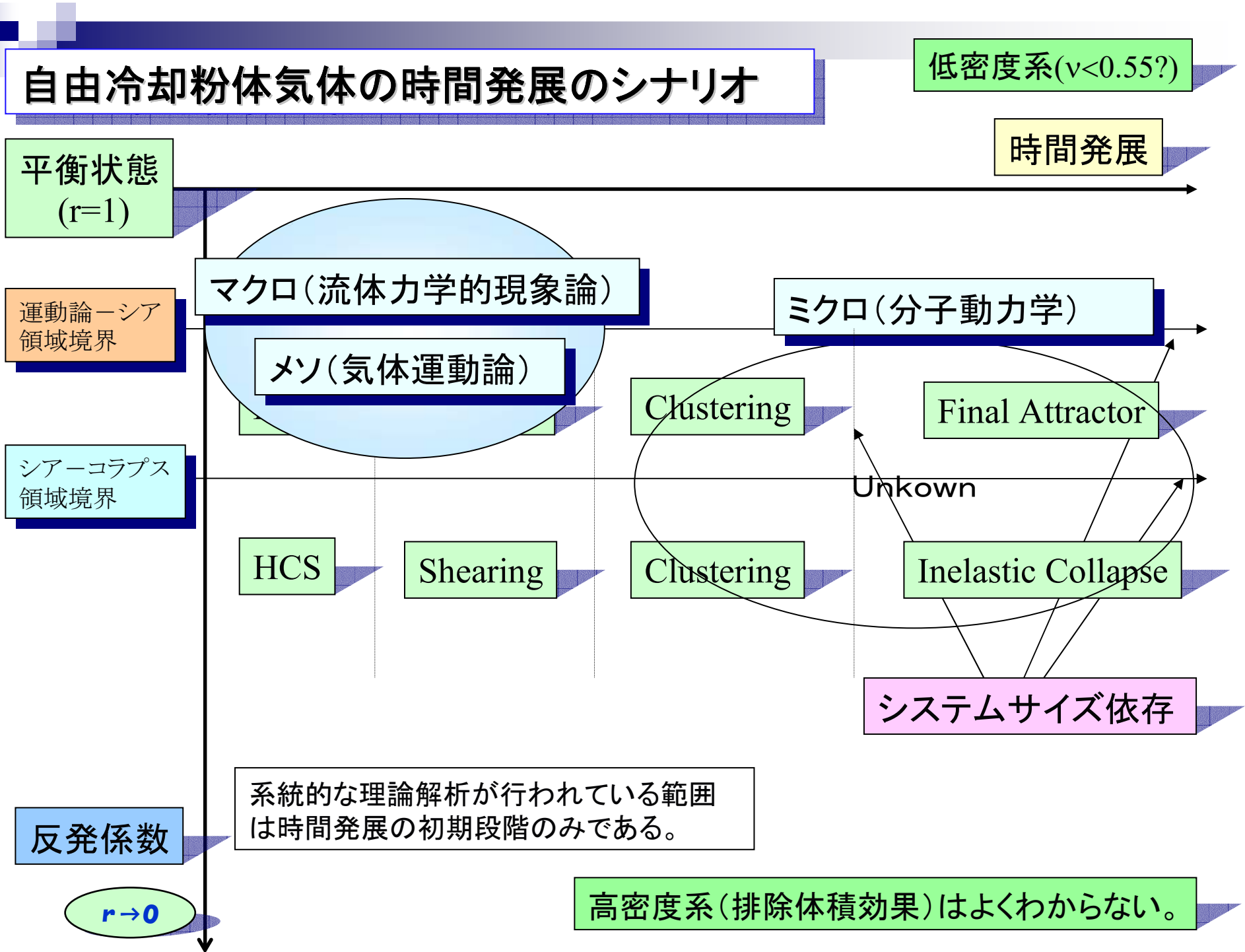
システムサイズ依存

反発係数

$r \rightarrow 0$

系統的な理論解析が行われている範囲
は時間発展の初期段階のみである。

高密度系(排除体積効果)はよくわからない。



高密度系での最終アトラクター

$N=512^2$
 $\nu=0.75$

McNamara & Young, PRE 53, 5089 (1996).

高密度系にて 2 Vortexモードの存在がEDMDシミュレーションの結果から示唆された。

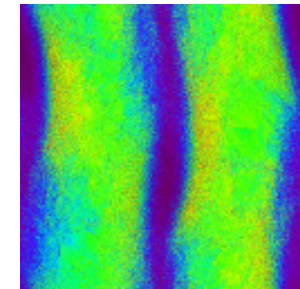
Soto, Mareschal & Mansour, PRE 62, 3836 (2000).

振幅方程式を用いた現象論: シアバンドと2 Vortexの間のモードの違いなど、研究された。

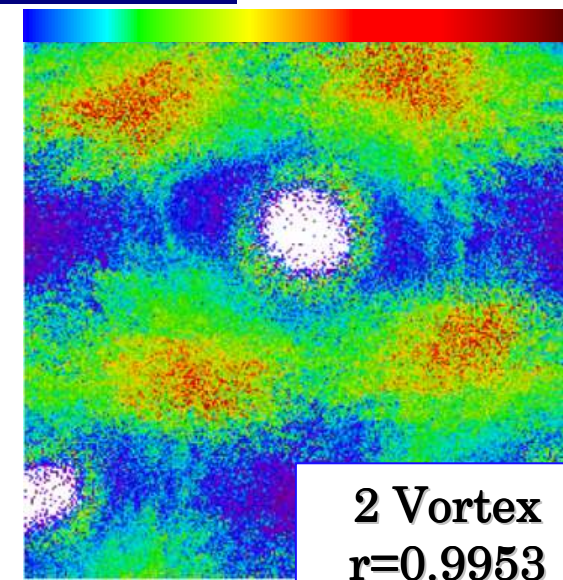
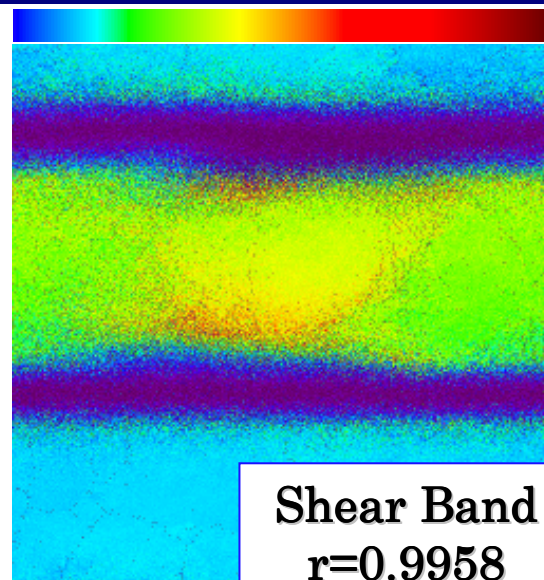
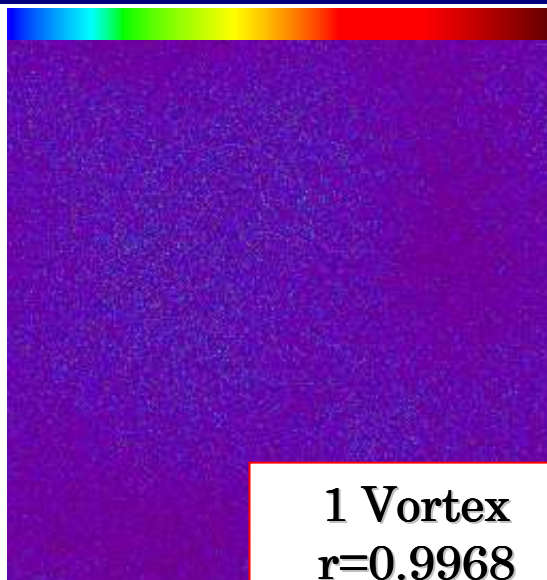
Hill & Mazenko, PRE 63, 031303 (2001); PRE 67,061302 (2003).

高密度系でも扱えるように修正された現象論的流体方程式が提案され、DNSにより最終アトラクターが状態が研究された。

Temperature Field



(↓)EDMDで新しく見つかった1 Vortex アトラクター状態



Bose-Condensed State(?) in Granular Gas

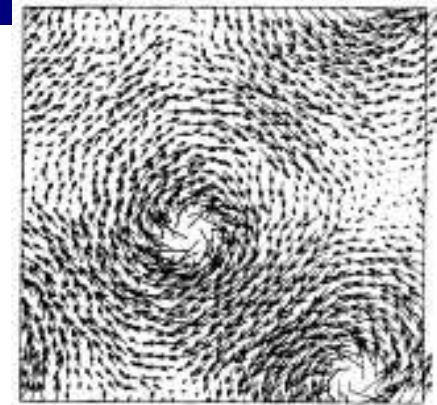
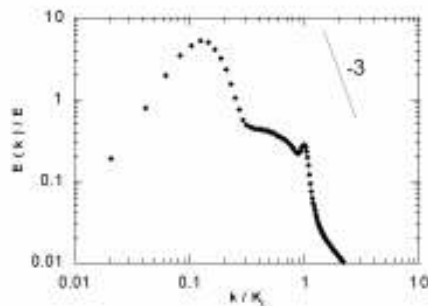
- **1 Vortex Mode:** Only particles near the edge of the void-crystal boundaries are moving actively, therefore, it looks like a ring shape in the temperature field. The prediction of final attractors seems to be difficult since **different final attractors (1 Vortex, Shear, 2 Vortex) appear even if the restitution coefficient is almost the same**. Of course, these results are out of expectation of the previous phenomenological theory.
- **Bose-Einstein condensation:** In the dense system, other physical mechanisms might be relevant, such as the condensed state in terms of 2D turbulence. Indeed, in the study of 2D turbulence, when the minimal correlation scale (such as Kolmogorov or dissipation scale) is larger than the system size, the one or two vortex state appears and **a type of Bose-Einstein condensation was pointed out by Kraichnan (Tabeling, Phys.Rep. 362 (2002))**.

Some Examples of Bose-Condensed State in Fluid Turbulence



Experiment

Paret et al., 1996



DNS

Smith and Yakhot (1994).

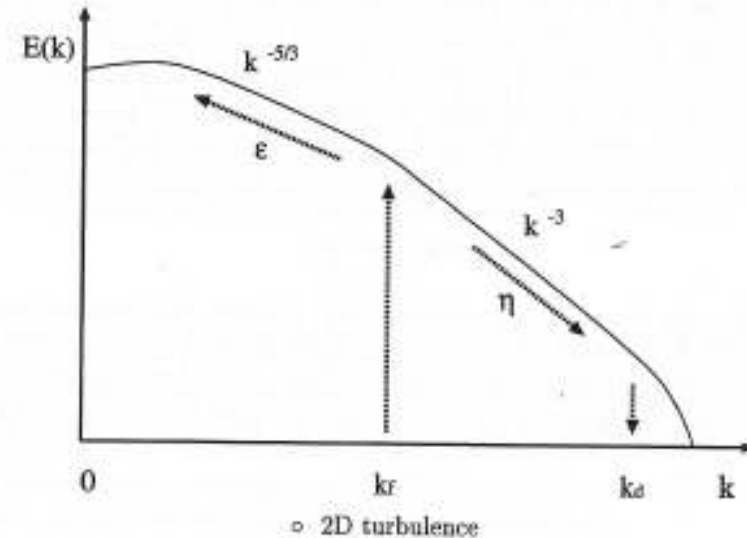
Energy Spectrum on 2D Turbulence

Theory

Kraichnan-Batchelor Theory

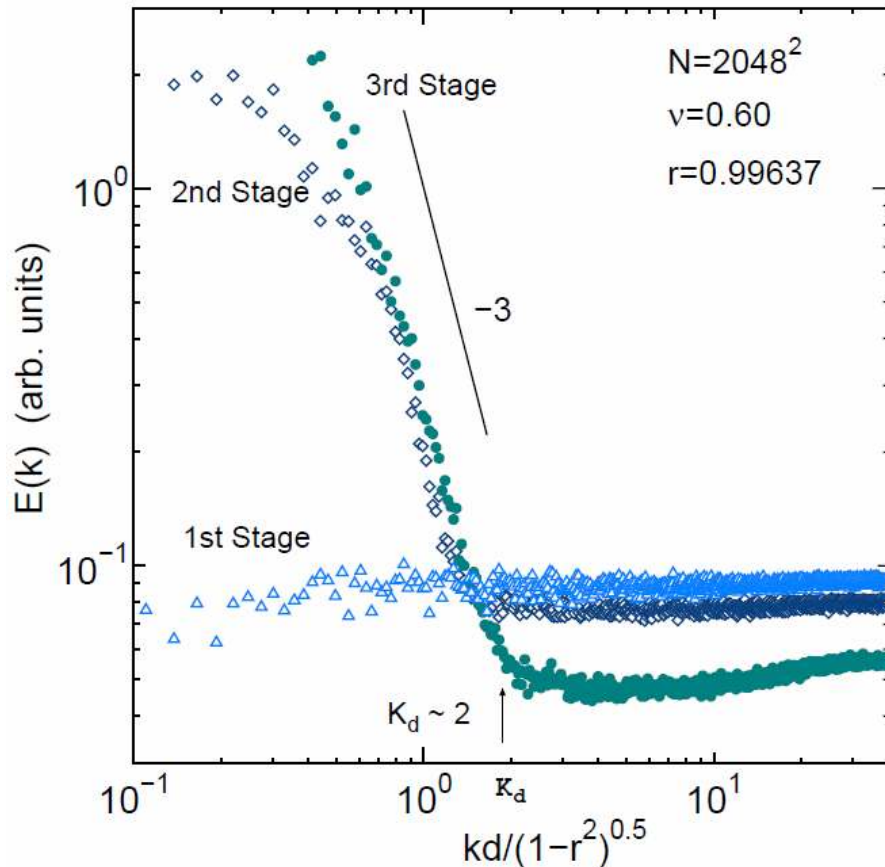
Energy Spectrum $E(k)$ [m^3s^{-2}]
Enstrophy Transfer Rate η [s^{-3}]
Wave number k [m^{-1}]

$$E(k) \sim \eta^{2/3} k^{-3},$$



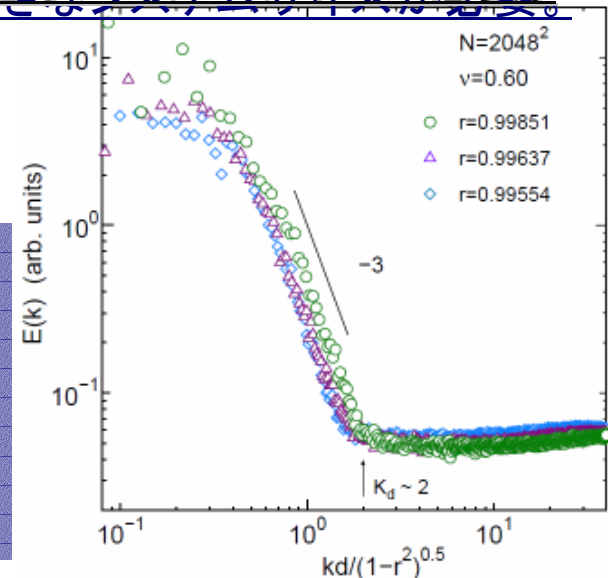
- R.H.Kraichnan, Phys.Fluids 10, 1417 (1967).
- The **inverse energy cascade** and **forward enstrophy cascade (2D forced turbulence)**
- G.Batchelor, Phys.Fluids Suppl. II 12, 233 (1969).
- The **forward enstrophy cascade (2D freely decaying turbulence)**
- From the dimensional analysis (like a Kolmogorov scaling in 3D turbulence), – 3 power law in energy spectrum is derived under the assumptions that the energy spectrum only depends on enstrophy transfer and wave number.

エネルギースペクトルの指数とスケーリング則



- 2nd Stage~3rd Stageに移行する際、エネルギースペクトルの低波数側は、2次元乱流におけるKraichnan-Leith-Batchelor(KLB)理論の予測と同じ指数-3をとる。
 - K_d から最小散逸スケールが見積もれる。
 $l_d/\sigma \sim 36.9$ ($\nu=0.60$)
 - 散逸領域(2次元)には、ほぼ
 $N=4\nu/(l_d/\sigma)^2/\pi \sim 10^3$ 粒子が関与している。
- 流体力学の議論をするには、最小散逸スケールよりも大きなシステムサイズが必要。

- 最小散逸スケールは $\sigma/(1-r^2)^{0.5}$ でスケーリングできる。(σ:粒子直径)
- (スケールされた)最小散逸スケールは、粒子数、反発係数の依存性はほとんどなく、粒子占有率に依存。 $\nu=0.60$ では、ほぼ2の値をとる。(ν=0.25では、 $K_d \sim 0.7$ 、ν=0.70では $K_d \sim 3$).粒子占有率でのスケーリングは現在、確認中。
- 慣性領域は、反発係数が準弾性極限で大。→高レイノルズ数。



自己組織化する乱流パターンと最小散逸スケール

$N=4.19$ million
 $\nu=0.60$
 $r=0.996368$
 $C/N=6956$

温度場

McNamara & Young (1996)
Peng & Ohta (1997)
Radjai & Roux (2003)
過去のこれらの研究は、数千粒子の規模で研究されている。しかし、そのサイズはほとんど空間相関の最小散逸スケールと同じである(!)

$N \sim 10^3$

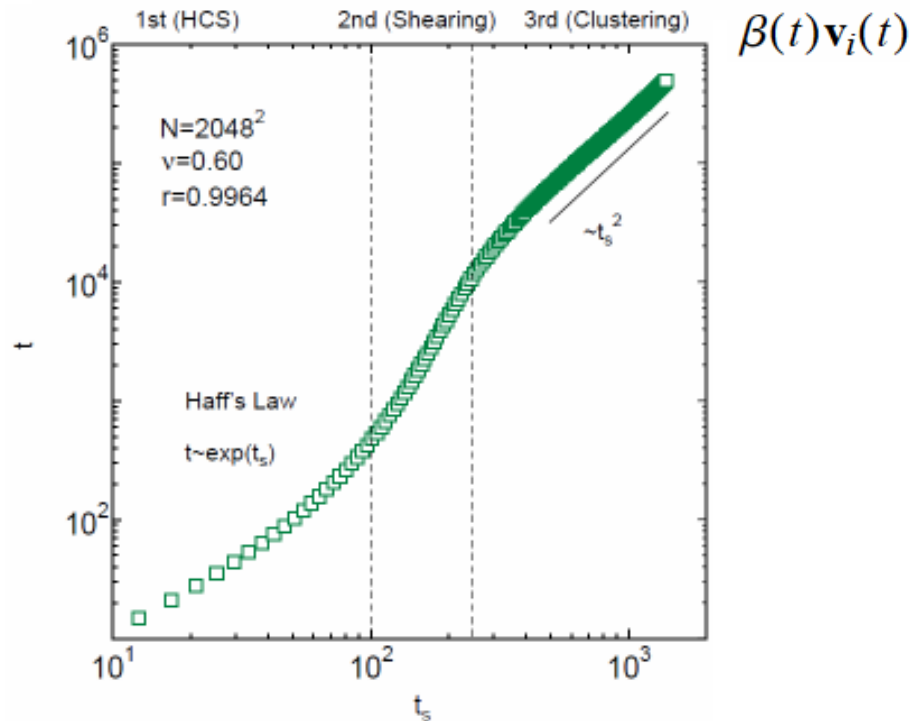
最小散逸スケール



エネルギー緩和 (Haff則とクラスター化による逸脱)

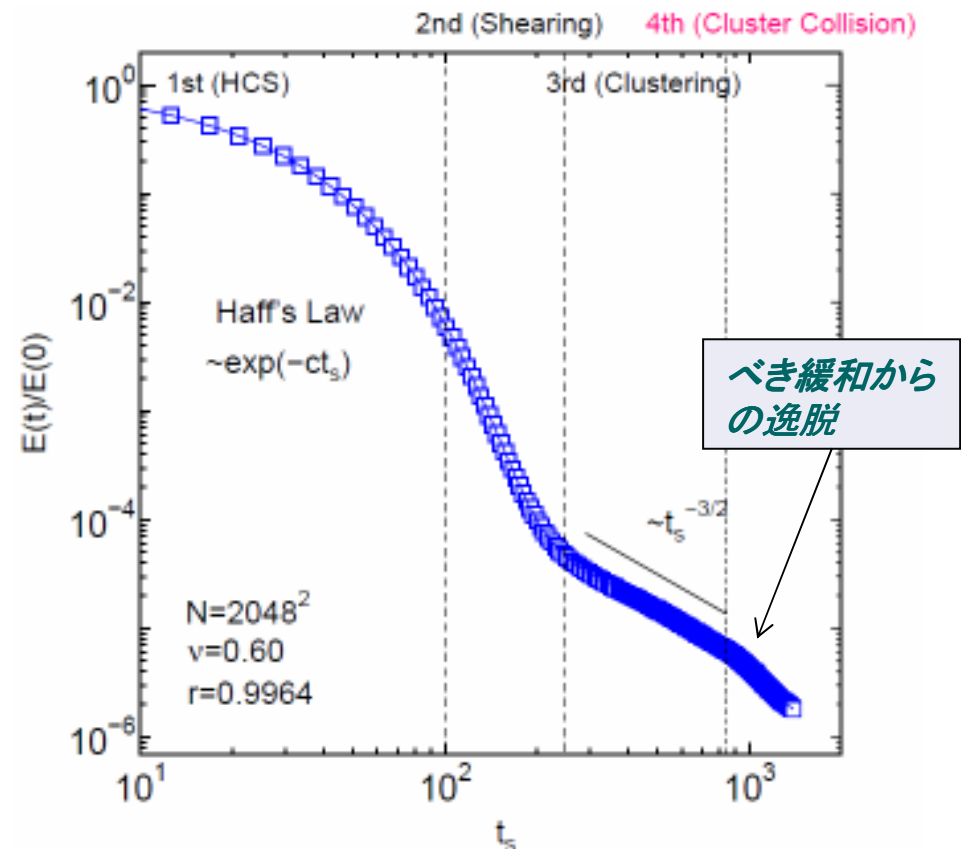
$$t_s = \int_0^t \frac{dt}{\beta(t)}, \quad \beta(t) = \sqrt{T(0)/T(t)},$$

$$T(t) = \frac{T_0}{(1 + \gamma_0 t/t_0)^2} \equiv T_0 \exp(-2\gamma_0 t)$$



• 3rd Stageは、 $E(t) \sim t^{-1}$ が理論予測されているが、高密度では逸脱する。さらに、 $t_s \sim 800$ 付近から、べき緩和からも逸脱する。

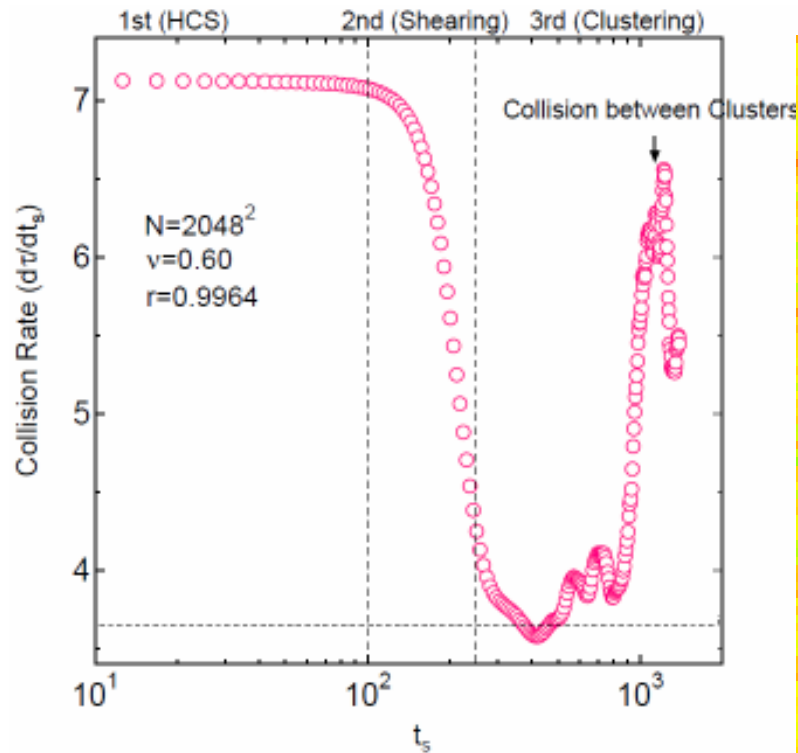
• シミュレーションは、全運動エネルギー(温度)を一定の拘束条件で、時間をスケールしている。 t と t_s の関係は、1~2 StageではHaff則の結果と一致し、クラスター化後(3stage~)は、 $t \sim t_s^2$ の関係になる。



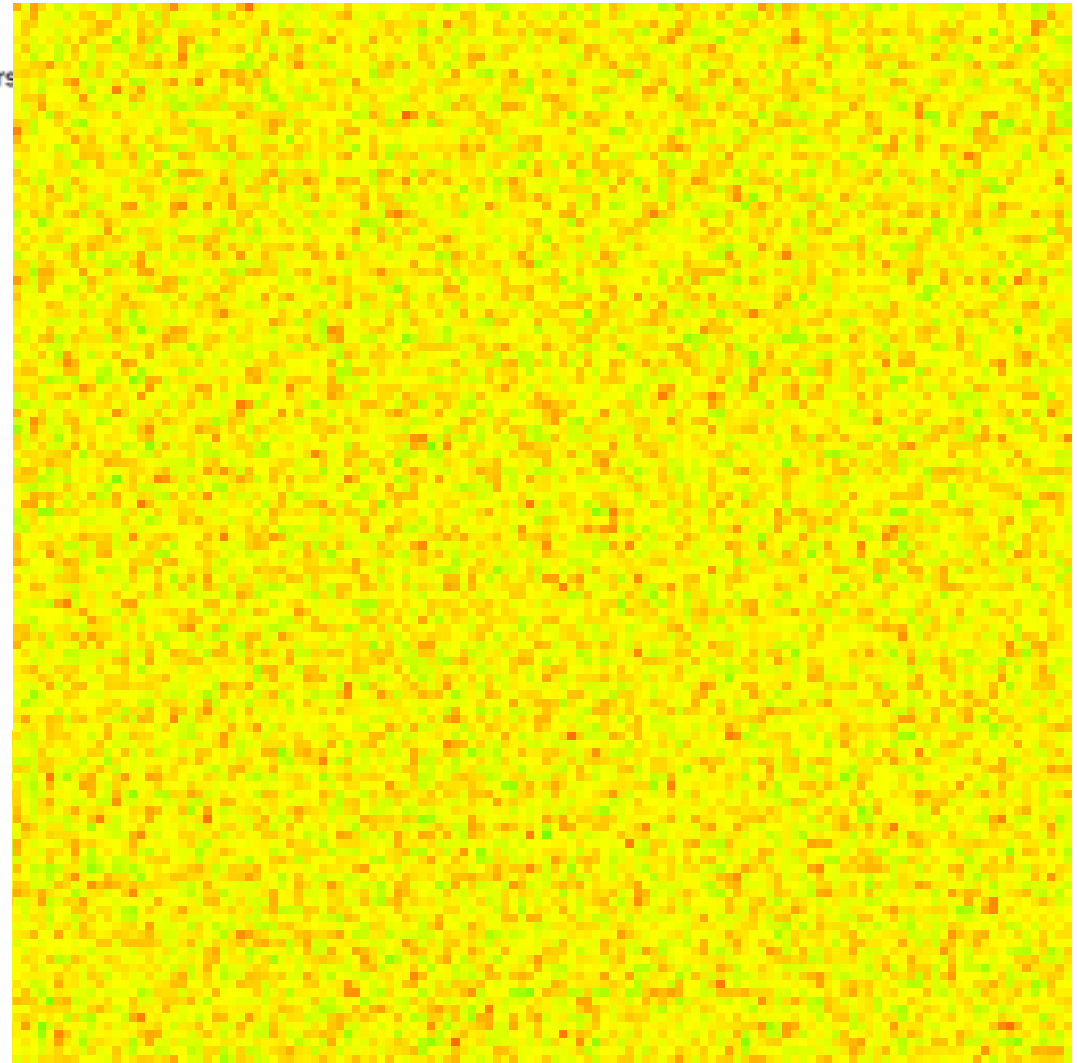
衝突率の時間発展、クラスター衝突領域

divu

圧縮場



$N=4.19$ million
 $\nu=0.60$
 $r=0.996368$
 $C/N=6956$



相対拡散とリチャードソン則

Theory

J.P.L.C. Salazar & L.R. Collins, *Annu. Rev. Fluid Mech.* 41, (2009) 405-32.

Richardson Law $\rightarrow R(t) \sim t^3$ (L.F. Richardson, *Proc. R. Soc. London Sect. A* 110, 709 (1926).)

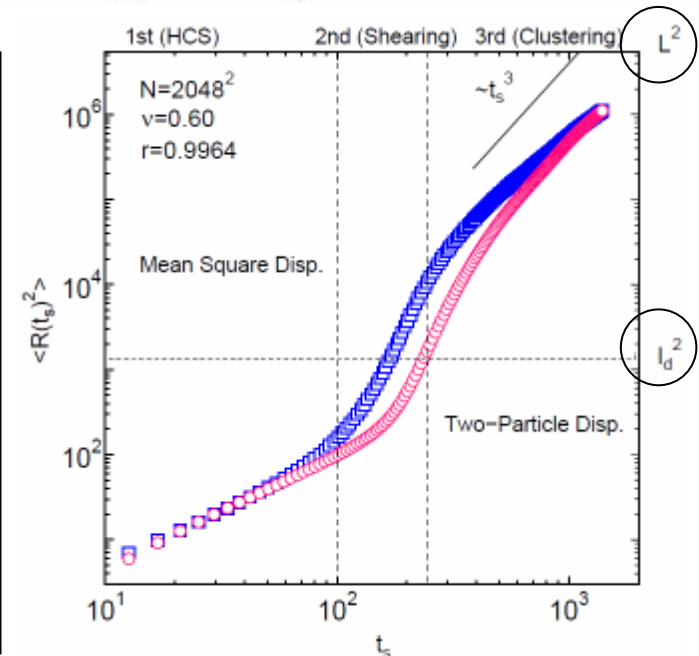
1. Dissipation Subrange: $r(t) \ll \eta$ $\eta \equiv (v^3 / \langle \epsilon \rangle)^{1/4}$ is the Kolmogorov length scale
2. Inertial Subrange: $\eta \ll r(t) \ll L$ L is the integral length scale
3. Diffusion Subrange: $r(t) \gg L$. statistically equivalent to the long-time limit of the problem of single-particle dispersion

Inertial Subrange (2D)

$$\langle r^2(t) \rangle = \begin{cases} \langle r_0^2 \rangle \exp(c' \frac{t}{t^*}) & \text{for } r(t) \ll l_I \\ \langle r_0^2 \rangle + g' \langle \epsilon \rangle t^3 & \text{for } l_I \ll r(t) \ll l_0, \end{cases}$$

l_I is the energy-injection length scale
 l_0 is the largest length scale in the flow.

• **第3ステージは、 $r(t_s) > l_d$ となったと同時に始まる。**
 l_d が Dissipation Subrange と Inertial Subrange を分ける (Kolmogorov スケールのような) よい指標になっていることがわかる。
 • システムサイズ L が十分に大きいため、**第4ステージ (クラスター衝突) は、粒子の相対拡散 $r(t_s)$ が L に到達する前で移行することがわかる。**つまり、第4ステージは周期境界条件の影響ではなく、熱力学極限で存在すると考えられる。



テイラーマイクロスケールとレイノルズ数

- **テイラーマイクロスケール: λ**

流体乱流では、テイラーマイクロスケールがよく使用されており、2次元非圧縮性等方性乱流では、

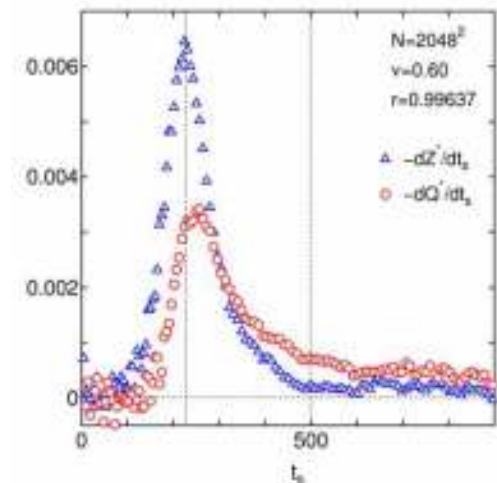
$\lambda = (8\nu \langle u^2 \rangle / \langle \varepsilon \rangle)^{1/2}$ となる。

- **レイノルズ数: $R_\lambda = \langle u^2 \rangle^{1/2} \lambda / \nu$**

テイラーマイクロスケールを使ってレイノルズ数を導出すると、実験室規模では、 $O(10^2 \sim 10^3)$ 、地球物理規模では $O(10^4)$ で乱流となることが知られている。

粉体気体のエネルギー散逸率 $\langle \varepsilon \rangle$ は、時間と共に減少しシミュレーションから見積もれる。動粘性係数 ν は $r=1$ のEnskog理論から求まる。 $t_s \sim 0$ では $R_\lambda \sim 12.4$ であるが、エンストロフィー散逸率が最大となるクラスタリング領域直前 $t_s \sim 252$ で $R_\lambda \sim 445.4$ に増大し、乱流化する。

エンストロフィー散逸率の時間発展



$$Z = \frac{1}{2} \langle (\nabla \times \mathbf{u})^2 \rangle$$

$$Q = \frac{1}{2} \langle (\nabla \cdot \mathbf{u})^2 \rangle$$

粉体気体系の準弾性極限におけるレイノルズ数は初期平衡状態から時間と共に増え、非圧縮一様等方性の条件が適用可能と思われる第2ステージの終わりにおいては、発達した乱流の値まで増加する。粉体気体系の乱流化を示す定量的な根拠が得られた。

自由冷却粉体気体の相図(反発係数-密度空間)

密度(占有率)

Point Particles

Close-packed Density

熱平衡
($r=1$)

Alder (KTHNY) Transition

HCS

運動論-シア
領域境界

エンストロフィーカスケード

Bose-Einstein凝縮

シア-コラプス
領域境界

HCS

Shearing

Clustering

Inelastic Collapse

システムサイズ依存

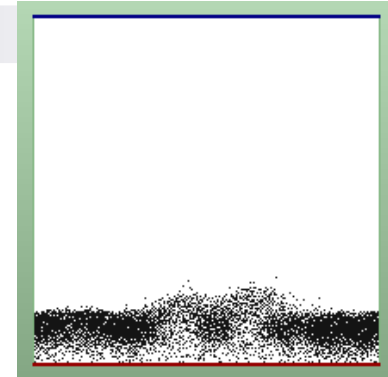
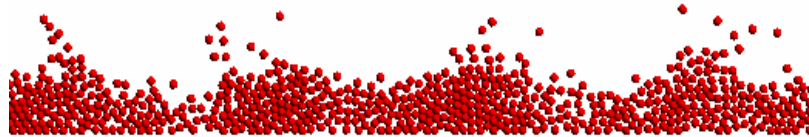
ミクロ(分子動力学)

システムサイズ依存?

反発係数

$r \rightarrow 0$

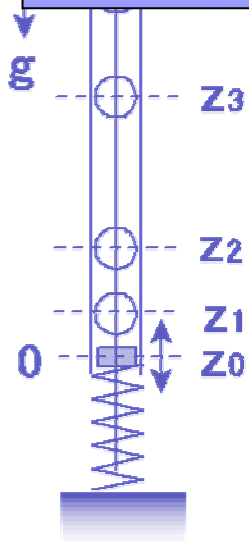
EDMDによる粉体気体系は乱流の統計則並びに乱流化のミクロな起源を探究する重要な方法論を提供していると思われる。



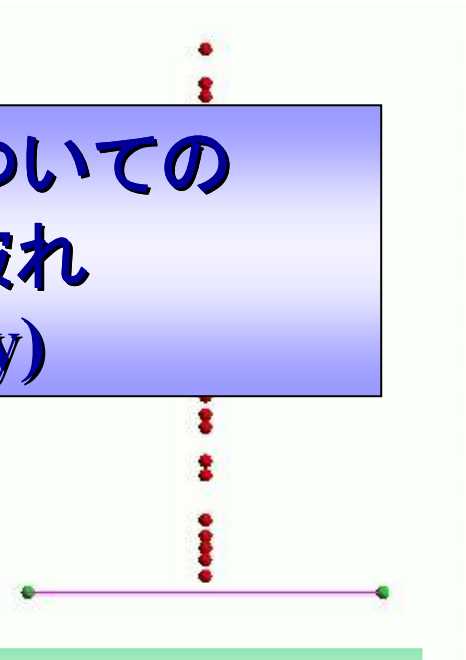
Brownian particle



3. 重力下粉体気体系の重心運動についての 新しい現象論と揺動散逸関係の破れ (Granular Gas under Gravity)



Force acting on
a Brownian particle



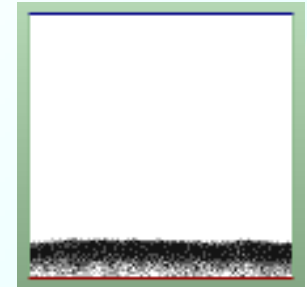
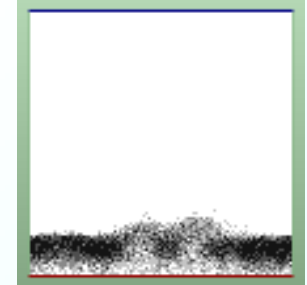
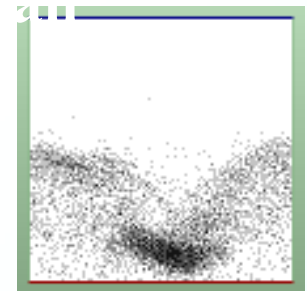
Miyakonojo National College of Technology
Jun'ichi Wakou
Nagoya Institute of Technology Masaharu Isobe

Driven Granular Gas under Gravity

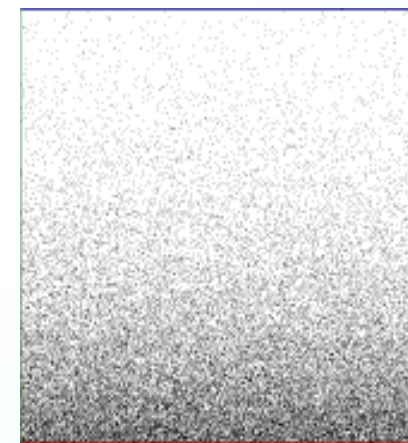
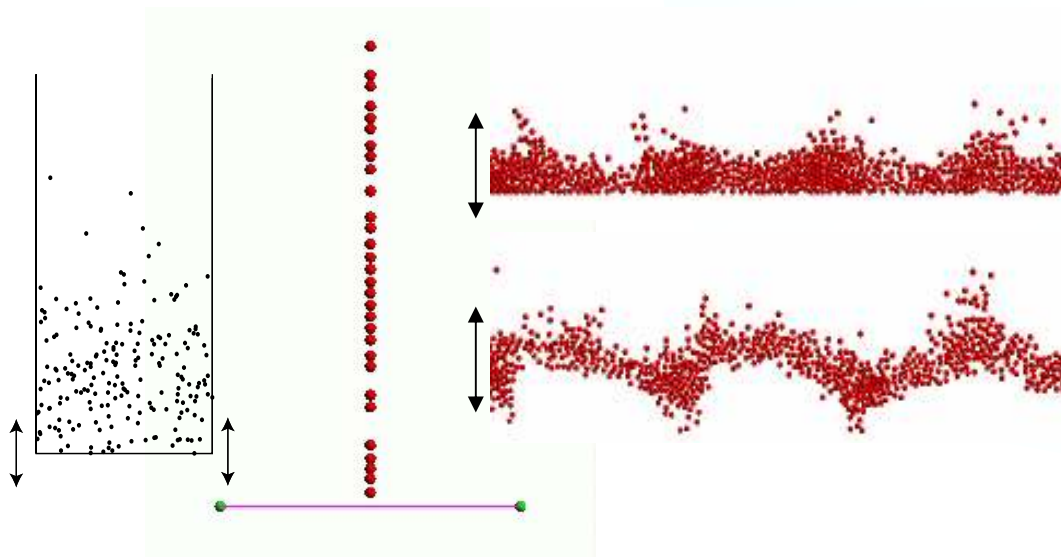
Introduction

- **Energy Balance**
- **Supply (External Driving):**
Vibrating Wall, Thermal Wall ...
- **Dissipation (Inelastic Collisions):**
- **Driven Granular Gas is one of prototype to investigate the Nonequilibrium Steady State (NESS)**

Thermal



Vibrating Wall



Thermal Wall

Various Interesting Phenomena

- **Convection (Faraday 1831, Evesque, Rajchenbach 89)**
- **Surface Waves (Fauve et al. 89, Umbanhowar et al. 96)**
- **Size Segregation (Duran et al. 93)**
- **Transition from a condensed state to a fluidized state (Luding et al. 94, Goldshtein et al. 95).**

Macroscopic Characterization

- **It is important to study how macroscopic quantities in the system (Center of mass, Granular temperature, etc..) depend on the system parameters (N , r , A , ω ...)**
- **Scaling relationship for the macroscopic quantities (Luding et al. 94, Warr et al. 95).**

- We propose a novel approach based on a **Langevin equation** for fluctuating motion of the center of mass of driven granular gas under gravity.
- In this framework, the analytical solution of the Langevin equation is used to **derive analytic expression for several macroscopic quantities and the power spectrum for the center of mass(COM).**
- In order to test our theory, we performed **extensive event-driven molecular dynamics simulations** for one- and two-dimensional systems for a wide range of parameters and compare with the theoretical predictions.

- **Equation of motion of Center of Mass (COM)**

$$M \frac{d^2 Z}{dt^2} = -Mg + F_b$$

M : total mass of particles

Z(t) : height of the COM

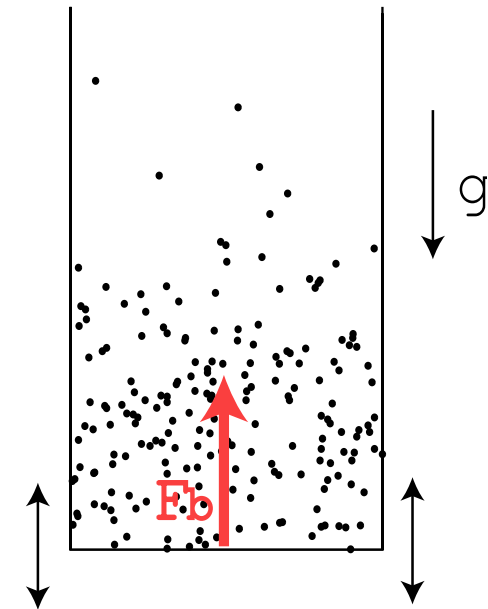
F_b(t) : force exerted by the bottom plate

- **Important time scales:**

τ : oscillation period of the bottom plate,

τ_{rel} : macroscopic relaxation time.

Fluidized state $\leftarrow \tau \ll \tau_{rel}$



Theoretical Approach

(Course-Graining from Micro- to Macroscopic)

Introduction

- **Molecular Dynamics**
(Gallas et al.92, Luding et al.94) etc..
- **Kinetic Thoery** (Jenkins Savage 83)
Velocity Distribution (Bernu et al. 94)
Scaling Relations (Kumaran 98)
- **Hydordynamics** (Jenkins, Richman 85)
Density, Flow, Temperature Profiles (Brey et al.01)
Scaling Relations (Lee 95)
- **Langevin equation** (Wakou, Ochiai, Isobe 08)
(which aims to describe macroscopic properties)
Center of Mass, Global Temperature

Microscopic



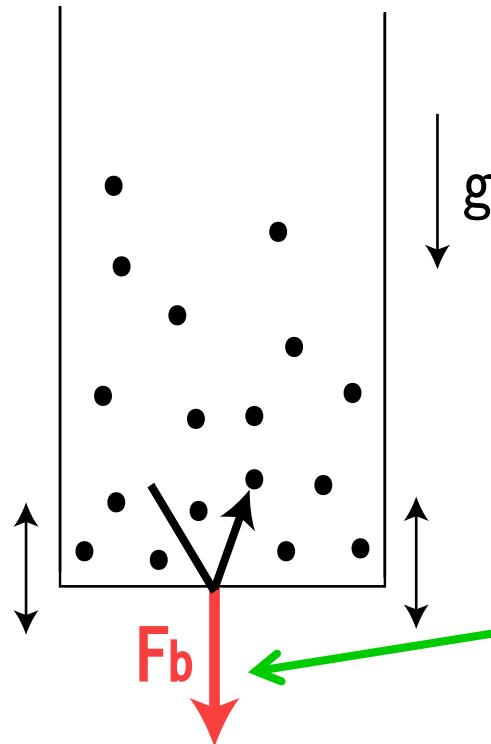
Macroscopic

Analogy with the Brownian Motion

Theory

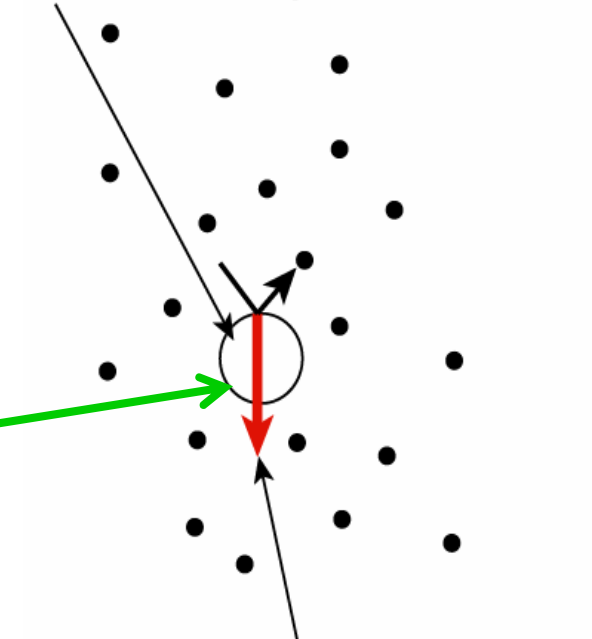
Assumption:

F_b consists of the static pressure &
1. Random force
2. Frictional force
3. Elastic force



Force acting on the bottom plate

Brownian particle



Force acting on a Brownian particle

Analogy

- Langevin Equation of the COM**

$$\frac{d^2 Z}{dt^2} = \boxed{-\Omega^2 (Z - \bar{Z})} + \boxed{f_s} \boxed{-\mu \frac{dZ}{dt}} + \boxed{R}$$

1. Elastic Force 2. Elastic Force Frictional Force Random Force

Elastic Force due to:

1. Expansion and contraction of the granular gas
2. Excitation of a sound wave

- Macroscopic Parameters:** $\Omega = \hat{\Omega} / \tau_{\text{rel}}$, $\mu = \hat{\mu} / \tau_{\text{rel}}$
 $\tau_{\text{rel}} \equiv c/g$ (c: thermal velocity)

- **Elastic Force due to excitation of sound wave**

Hydrodynamic sound-wave theory

if $v_{\text{bottom}} \ll c$, then

$$\longrightarrow f_s(t) \cong \hat{\sigma} \frac{g}{c} A_0 \omega \cos \omega t$$

(if $v_{\text{bottom}} \gg c$, f_s might become nonlinear (shock-like))

- **Random Force**

Gaussian white noise

Fluctuation-Dissipation Relation

$$\langle R(t)R(t') \rangle = 2\mu k_B T / M \times \delta(t - t')$$

(T is granular temperature)

$$Z(t) - \bar{Z} = A_0 \zeta \sin(\omega t + \theta) + \int_{-\infty}^t G(t - t') R(t') dt'$$

① Power injected by the bottom plate

$$P_b = \overline{F_b v_0} = -M\omega \overline{Z v_0} = \frac{\hat{\sigma}}{2} Mg \frac{(A\omega)^2}{c} \left(1 + O(\hat{\omega}^{-2})\right)$$

$$\left(\hat{\omega} \equiv \omega \tau_{\text{rel}} \cong \frac{\tau_{\text{rel}}}{\tau} \gg 1 \right)$$

② Power spectrum for the height of the COM

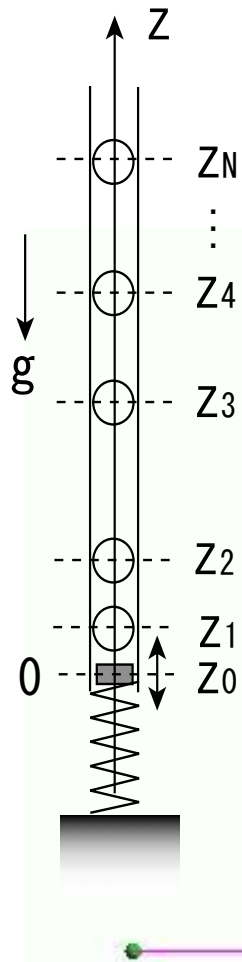
$$I_{\text{CM}}(\hat{\omega}') / \frac{c^5}{Ng^3} = \frac{\pi}{2} N \left(\frac{Ag\zeta}{c^2} \right)^2 (\delta(\hat{\omega}' + \hat{\omega}) + \delta(\hat{\omega}' - \hat{\omega})) + \frac{2\hat{\mu}}{(\hat{\Omega}^2 - \hat{\omega}'^2)^2 + (\hat{\mu}\hat{\omega}')^2}$$

Delta functional peaks at the frequency of the bottom plate

Continuous spectrum

Event-Driven MD :1D System

Model



- **N inelastic particle under gravity**
- **Bottom plate oscillate sinusoidally**
$$Z_0(t) = A_0 \sin \omega t$$
- **Acceleration:**
$$\Gamma = \frac{A_0 \omega^2}{g}$$
- **Inelastic collisions between particles with the restitution coefficient r**
- **Elastic collisions between particles and the bottom plate**
- **No rotational degrees of freedom**

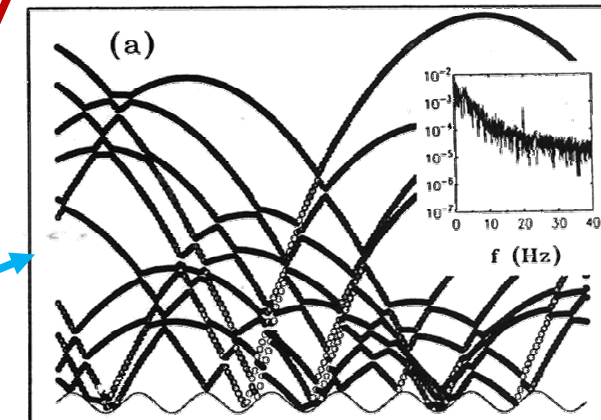
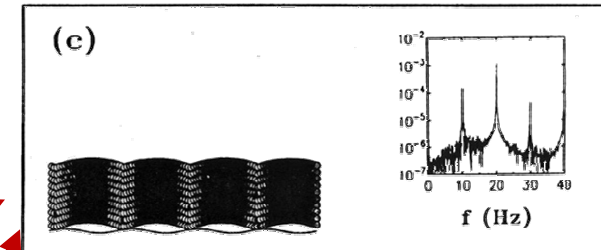
S. Luding et al., Phys. Rev. E 49, 1634 (1994) and many papers.

M. Isobe and A. Ochiai, Mol. Sim. 33, 147 (2007).

J. Wakou, A. Ochiai and M. Isobe, J. Phys. Soc. Jpn. 77, 034402 (2008).

1D Event-Driven MD (Luding et al. 94)

- **Order Parameter: $X=(1-r)N$**
- **Acceleration: $\Gamma = \frac{A_0 \omega^2}{g}$**
- **$X > X_C$: Condensed State**
- **$X < X_C$: (Γ small) Condensed State
(Γ large) Fluidized State**



- **Averaged height of COM
in Fluidized State**

$$\bar{Z} \propto \frac{V_0^2}{X}$$

V_0 : Maximum Velocity
of the vibrating plate

Kinetic Theory(2D,3D) (Warr et al. 95)(Kumaran 98)

- **Theoretical Derivation for the Height of COM**

Power Spectrum for the height of the COM

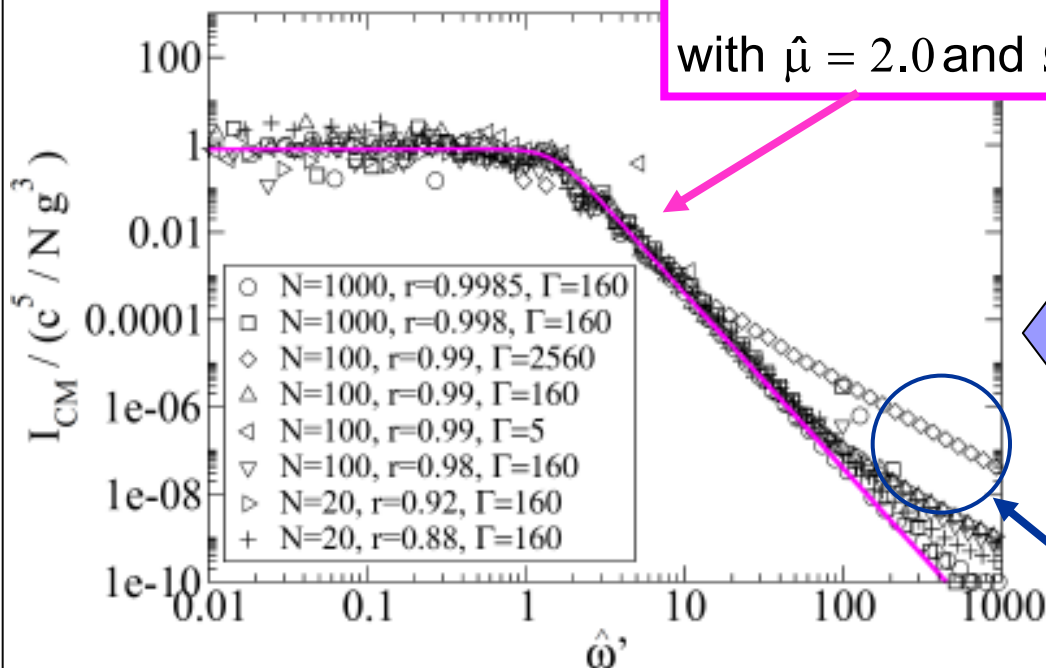
Result

$$\left. \frac{I_{CM}(\hat{\omega}')}{Ng^3} \right|_{\text{continuous spectrum}} = \frac{2\hat{\mu}}{(\hat{\Omega}^2 - \hat{\omega}'^2)^2 + (\hat{\mu}\hat{\omega}')^2}$$

$\hat{\mu}, \hat{\Omega}$: curve-fit parameters

Theoretical prediction with $\hat{\mu} = 2.0$ and $\hat{\Omega} = 1.5$.

Power spectrum $I_{CM}(\omega')$ without scaling



Behavior at high frequency is out of our theory

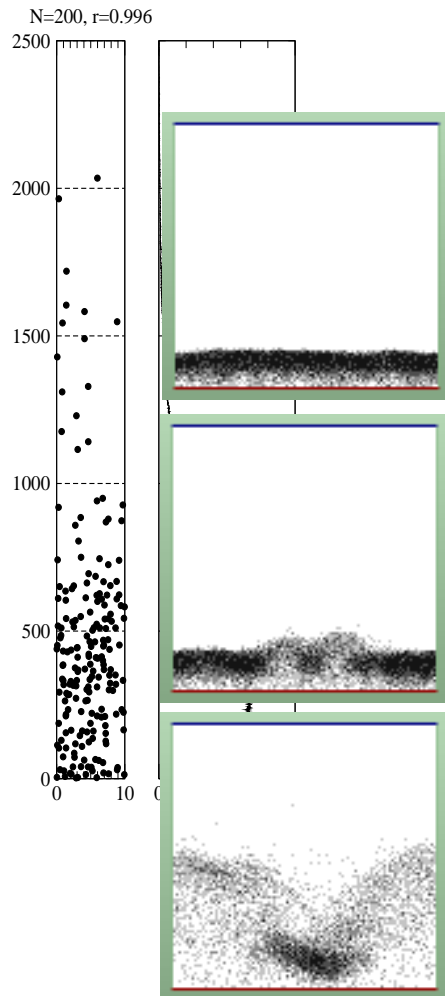
The continuous part of the power spectra at various system parameters collapse on a single master curve, which agree well with the theoretical prediction.

- **Comparison with the extensive microscopic Event-Driven MD simulation for a wide range parameters**
- $\tau \ll \tau_{\text{rel}}$: fluidization
- $\mathbf{A}_0\omega \ll c$: hydrodynamic sound-wave theory is valid
- **Amplitude of Oscillation of the COM**
- **Power Injected by the Bottom**
- **Power Spectrum for the height of the COM**
- **Kinetic Energy of the COM (Violation of Equipartition)**
- *Theoretical prediction is good agreement with the event-driven MD simulation by the following three parameters:*

$$\hat{\sigma} = 1.5, \hat{\mu} = 2.0, \hat{\Omega} = 1.5$$

Event-Driven MD :2D System

Model



- **N inelastic particles with diameter d**
- **Periodic boundary condition in the horizontal direction**
- **Bottom plate is a thermal wall with temperature T_0**
- **Driving Intensity:** $\Lambda = \frac{k_B T_0}{mgd}$
- **Inelastic collisions between particles with the restitution coefficient r**
- **No rotational degrees of freedom.**

M. Isobe and H. Nakanishi, J. Phys. Soc. Jpn. 68, 2882 (1999).

M. Isobe, Phys. Rev. E 64, 031304 (2001).

J.Wakou and M.Isobe, AIP Conf. Proc. 1145,171 (2009).;1217,135 (2010).

- Langevin Equation of the COM**

$$\frac{d^2 Z}{dt^2} = \boxed{-\Omega^2 (Z - \bar{Z})} + \boxed{-\mu \frac{dZ}{dt}} + \boxed{R}$$

1. Elastic Force Frictional Force Random Force

2. Elastic Force

Elastic Force due to:

1. Expansion and contraction of the granular gas
2. Excitation of a sound wave

- Macroscopic Parameters:** $\Omega = \hat{\Omega} / \tau_{\text{rel}}$, $\mu = \hat{\mu} / \tau_{\text{rel}}$
 $\tau_{\text{rel}} \equiv c/g$ (c: thermal velocity)

Power Spectrum of the height of the COM

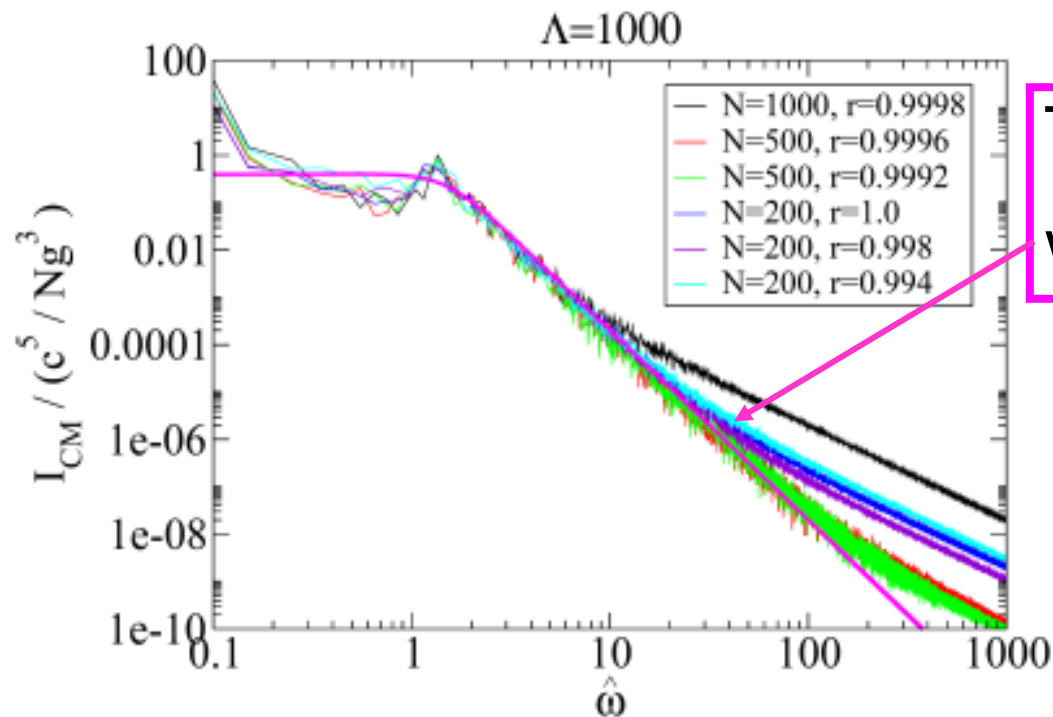
Result

Theory:

$$I_{\text{CM}}(\hat{\omega}') / \frac{c^5}{Ng^3} = \frac{\hat{\mu}}{(\hat{\Omega}^2 - \hat{\omega}'^2)^2 + (\hat{\mu}\hat{\omega}')^2}$$

Continuous spectrum

Nearly Elastic Case



Theoretical predictions
with $\hat{\mu} = 2.0$ and $\hat{\Omega} = 1.5$.

In the case of nearly elastic particles, the power spectrum (with same parameters as 1D case) agrees well with our theoretical prediction.

Power Spectrum of the height of the COM

Result

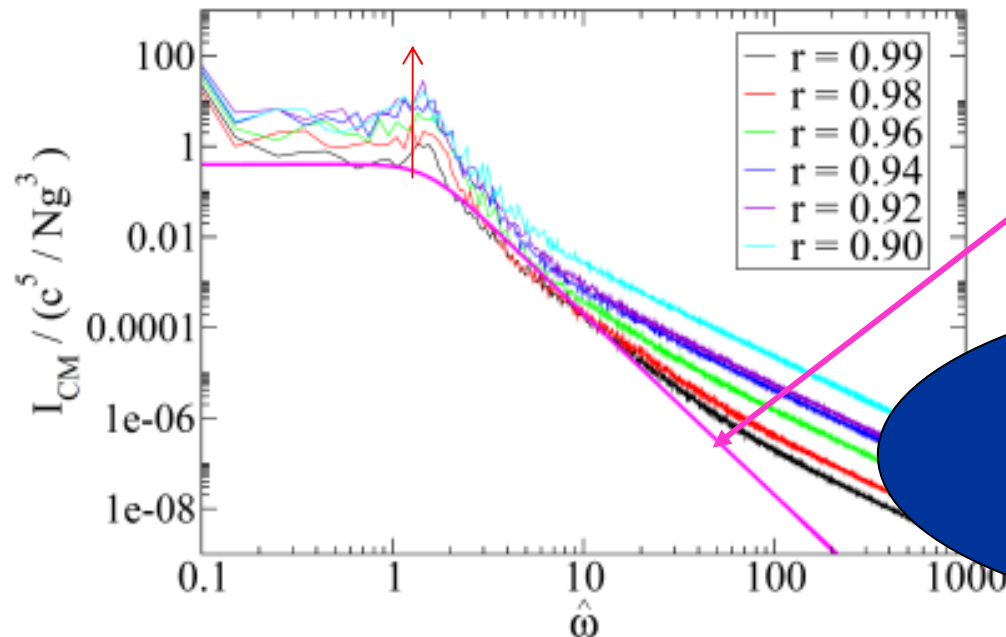
Theory:

$$I_{\text{CM}}(\hat{\omega}') / \frac{c^5}{Ng^3} = \frac{\hat{\mu}}{(\hat{\Omega}^2 - \hat{\omega}'^2)^2 + (\hat{\mu}\hat{\omega}')^2}$$

Continuous spectrum

Largely Inelastic Case

$N=200, \Lambda=1000$

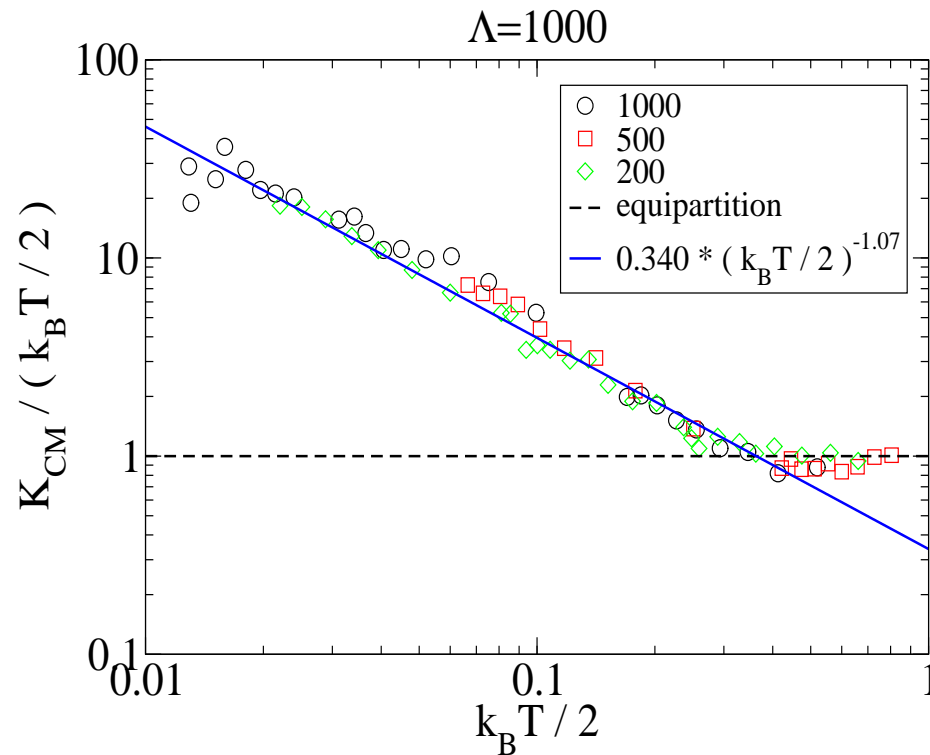


Theoretical predictions
with $\hat{\mu} = 2.0$ and $\hat{\Omega} = 1.5$.

What is the cause
of the deviation?

We find that systematic deviation from the theoretical predictions as inelasticity increases, which have high intensity.

Failure of the Law of Equipartition



K_{CM} : Kinetic energy of the COM

$$k_B T_{global} \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \overline{v_i^2}$$

$$K_{CM} \equiv \left\langle \frac{1}{2} M V^2 \right\rangle \neq \frac{k_B T_{global}}{2}$$

We found the failure of the law of equipartition at low temperature. This is not surprising because the system is far from equilibrium. No theoretical predictions on the behavior of $K_{CM} / (k_B T / 2)$.

The Violation of the Law of Equipartition

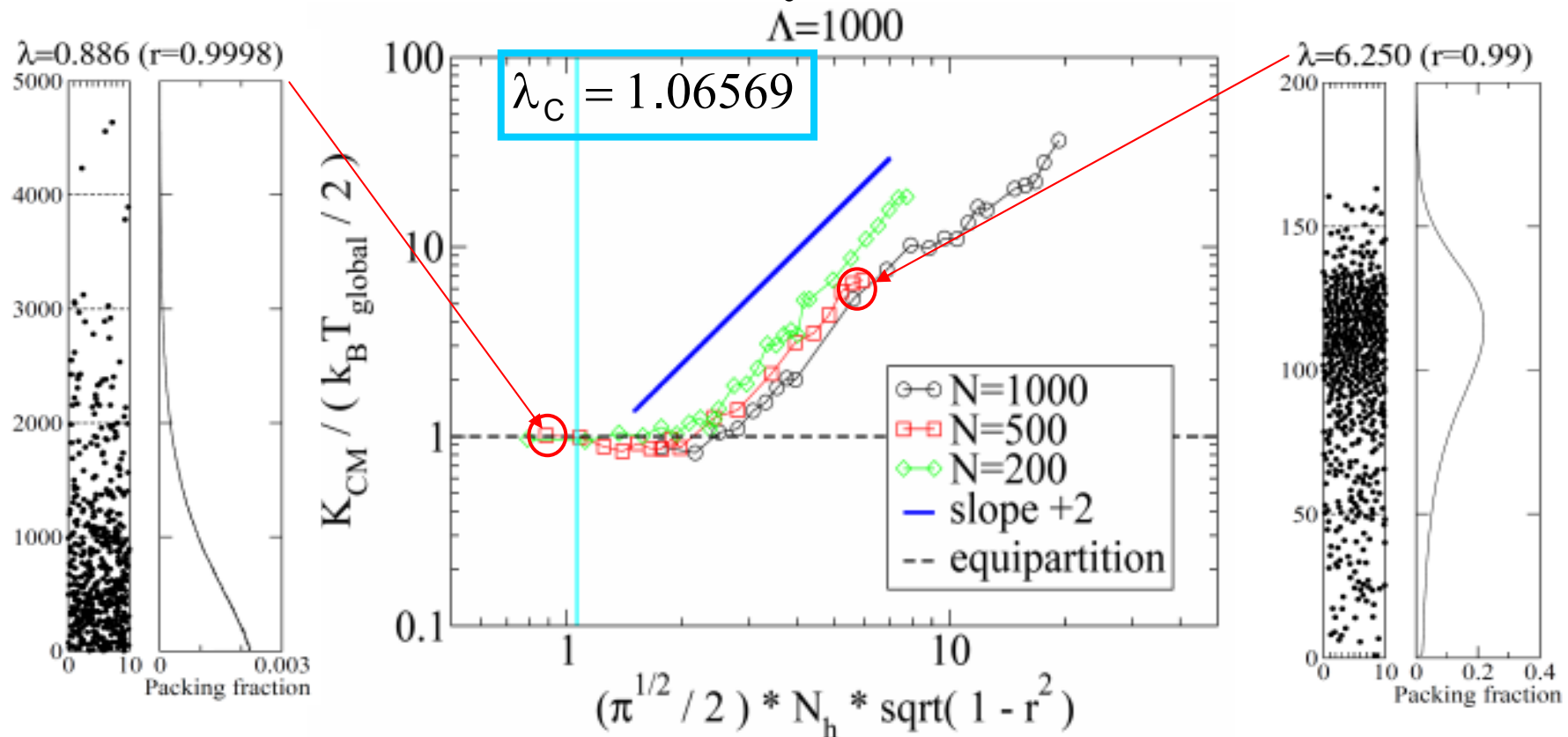
Discussion

Development of the density inversion

(Simulation: Isobe&Nakanishi 99; Theory: Brey et al. 01, Bromberg et al. 03)

$$\lambda \equiv \frac{\pi^{1/2}}{2} N_h (1 - r^2)^{1/2} \quad N_h: \text{number of layers of particles at rest}$$

Density inversion occurs at $\lambda > \lambda_c$



Fluctuation-Dissipation Theorem (of the first kind)

$$\langle R(t)R(t') \rangle = I \delta(t - t')$$

Langevin equation

$$K_{CM} \stackrel{\downarrow}{=} \frac{M}{4\mu} I \stackrel{\times}{\neq} \frac{k_B T_{global}}{2} \Rightarrow I \stackrel{\times}{\neq} 2\mu kT_{global} / M$$

Equipartition

Is the Langevin equation still useful?

We put $I = \frac{4\mu}{M} K_{CM}$ and determine K_{CM} from simulation data

重心運動についての現象論

J.Wakou, A.Ochiai, M.Isobe
J.Phys.Soc.Jpn.77(08)034402

- 重心高さZに対するランジュバン方程式

$$\frac{d^2Z}{dt^2} = \underbrace{-\Omega^2(Z - \bar{Z})}_{\text{線形弾性力}} \underbrace{-\mu V}_{\text{摩擦力}} + \underbrace{r}_{\text{ランダム力}}$$

Ω : 固有振動の角振動数
 μ : 摩擦係数

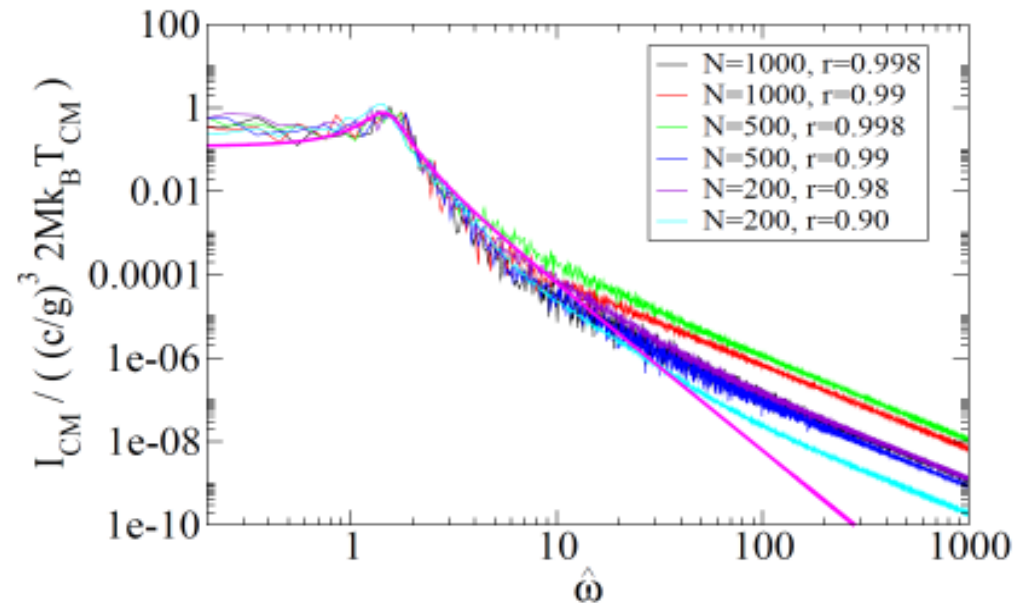
$$\langle r(t)r(t') \rangle = I\delta(t - t') \quad \text{ただし、} I = 2\mu k_B \boxed{T_{CM}} / M$$

重心高さの パワースペクトル

理論:

$$I_{CM}(\hat{\omega}) / \left[\left(\frac{c}{g} \right)^3 2Mk_B T_{CM} \right] = \frac{\hat{\mu}}{(\hat{\Omega}^2 - \hat{\omega}^2)^2 + (\hat{\mu}\hat{\omega})^2}$$

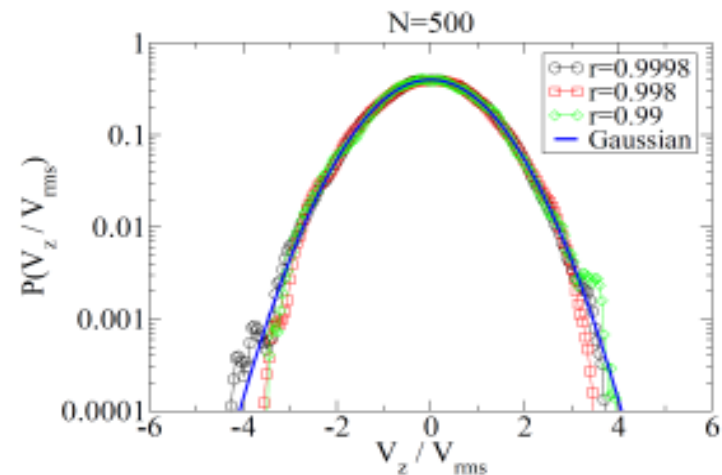
フィッティングパラメタ $\hat{\mu} = 0.6$, $\hat{\Omega} = 1.5$



揺動散逸関係においては、 T_{CM} が適切な「温度」変数

2次元系の結果のまとめ

- 重心運動の温度 T_{CM} と粉粒体の温度 T_g について、エネルギー等分配則の破れ $T_{CM} \neq T_g$ が観測された。
- エネルギー等分配則の破れは密度反転現象が進むにつれて顕著になる。
- 密度反転が起きても重心の速度分布はガウス分布。
- 重心運動を記述するランジュバン方程式を考えた。(第2種)揺動散逸関係において T_{CM} を用いるとシミュレーション結果とある程度良い一致。

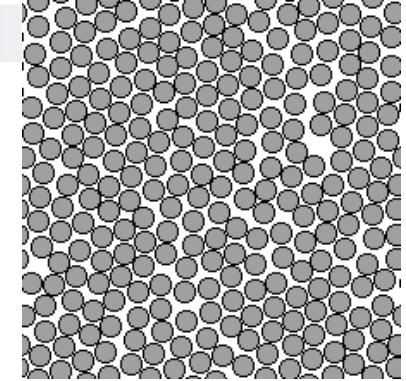
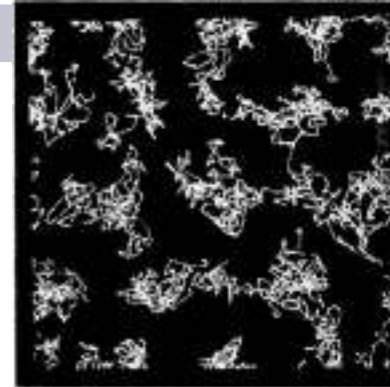
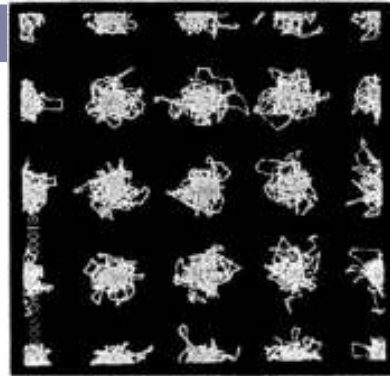


- **A Langevin equation** for the motion of COM was formulated to describe the macroscopic properties of the fluidized state of granular gas under gravity. Comparison with the result of extensive simulations:

	Vibrating Wall	Thermal Wall
1D System	excitation of the sound wave (*)	Good agreement
2D System (nearly elastic)	Under consideration	No density inversion
2D System (Large inelasticity)	Under consideration	density inversion (**) Deviation

- **The origin of Violation of the Law of Equipartition is different between (*) and (**)**
- *Future Works: Extended theoretical framework for the presence of density inversion (modified Fluctuation-dissipation relation)*

今後の展望



- AlderとWainwrightによって拓かれたイベントドリブン型分子動力学法は、現在、数百万粒子系の分子動力学シミュレーションがパソコンレベルで可能になった。
- 分子動力学法は、ミクロな粒子レベルとマクロな現象論(流体力学)をつなげる非平衡統計物理学の構築(粉体系への応用など)に不可欠な重要なツールとしてますます重要になっていくと思われる。

御静聴、ありがとうございました。

