

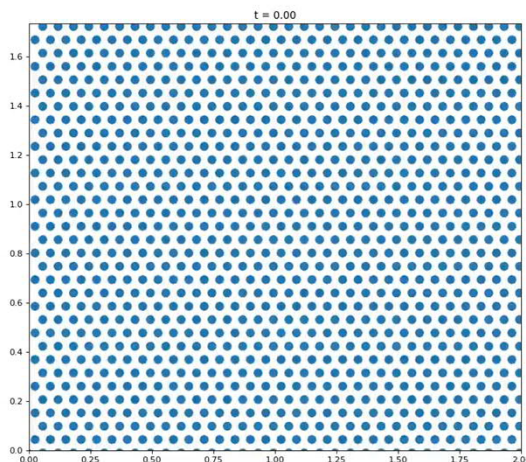


# 分子の協働と相転移の神秘を 高速アルゴリズムで解明

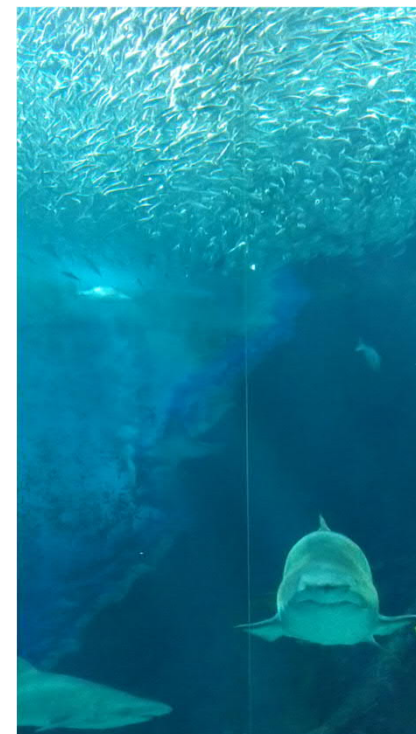
名古屋工業大学 工学専攻  
物理工学系プログラム  
准教授 磯部 雅晴

本研究室の特徴は、

**個別の要素（分子など）からなる多体系を  
高速に解析し、全体の協働的な動きを、  
予測できる技術（アルゴリズム）**  
を、研究している。



魚の群れでみられる協働的な動き  
(ファシリテーション)を高速アルゴリ  
ズムを用いシミュレーションで予測



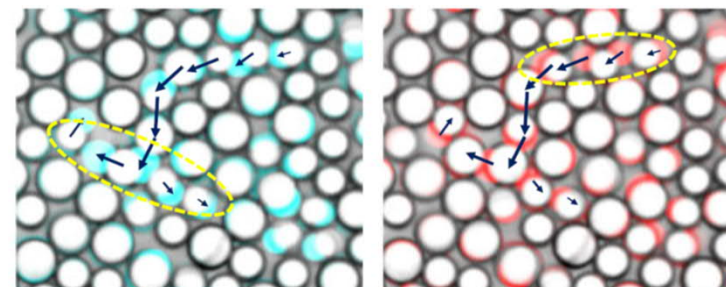
# 社会背景と技術的課題

①近年、人間が構成する組織の活動を活性化し協働的に促進させる「**ファシリテーション**」という概念がビジネス・教育の場で注目を集めている。分子が高密度に集まったガラス形成物質が織りなす「**遅い緩和**」の難問に対し、「**ファシリテーション**」が起こるとする理論が世界的に注目を集めている。

②「**遅い緩和**」の難問を解決するため、従来法と相補的な**イベント駆動型アルゴリズム**を用いた分子シミュレーションにより、微視的な緩和機構を解明する。

- M. Isobe, A. S. Keys, D. Chandler, and J. P. Garrahan, Physical Review Letters, 117, 145701, (2016).
- C.-T. Yip, M. Isobe, C.-H. Chan, S. Ren, K.-P. Wong, Q. Huo, C.-S. Lee, Y.-H. Tsang, Y. Han, and C.-H. Lam, Physical Review Letters, 125, 258001 (2020).

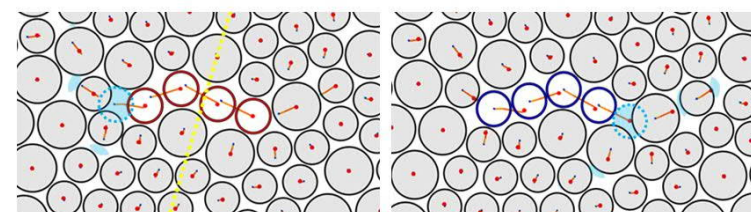
コロイド実験の解析 (光学画像)



ホッピング連鎖運動前

ホッピング連鎖運動後

分子シミュレーション (2成分剛体円板系)



ホッピング連鎖運動前

ホッピング連鎖運動後

# 本技術の特徴

**イベント駆動型アルゴリズム**は、高密度分子系をシミュレーションを用いて解析する際、単純性、効率性、汎用性のいずれも従来法と相補的である。

→従来法では高密度で生じる「遅い緩和」の解析が困難であった。

→従来法よりも、単純さゆえに汎用性が容易である。すなわち、衝突則（相互作用）の少しの変更で、粉体や生物（人間）の動きを解析することも可能。

- M. Isobe, Molecular Simulation, 42, pp. 1317-1329, (2016).
- M. Isobe, Int. J. Mod. Phys. C, 10, pp.1281-1293, (1999).
- E. Bernard, W. Krauth, and D.B. Wilson, Phys. Rev. E, 80, 056704 (2009).
- M. Klement and M. Engel, J. Chem. Phys. 150, 174108 (2019).

Events-Based Algorithm for Equilibration

Event-Driven Molecular Dynamics  
M. Isobe, IJMPC, 10, 1280 (1999).

Lawrence Livermore National Laboratory

Hybrid Scheme  
M. Isobe, Mol. Sim., 42, 1317 (2016).

Event-Chain Monte Carlo  
Bernard & Krauth & Wilson, PRE, 80, 056704 (2009).

Newtonian Event-Chain MC  
Klement & Engel, JCP, 150, 174108 (2019).

# 従来技術との比較

分子シミュレーションでは、従来法として、分子動力学法、モンテカルロ法がよく使われています。単純な比較はできませんが、

	分子動力学法	モンテカルロ法	イベント駆動型アルゴリズム
単純さ	△	○	○
汎用性	○	△	○
コード開発	△	○	○
計算効率	△	×	○



# 具体的な取り組み

## • イベント駆動型アルゴリズム

- M. Isobe, Molecular Simulation, 42, pp. 1317-1329, (2016).
- M. Isobe, Int. J. Mod. Phys. C, 10, pp.1281-1293, (1999).
- **剛体球系（2次元、3次元）の相転移（アルダー転移）**
- M. Isobe and W. Krauth, The Journal of Chemical Physics, 143, 084509, (2015).
- M. Engel, J. A. Anderson, S. C. Glotzer, M. Isobe, E. P. Bernard, and W. Krauth, Physical Review E, 87, 042134, (2013). PRE 25th MILESTONE PAPER

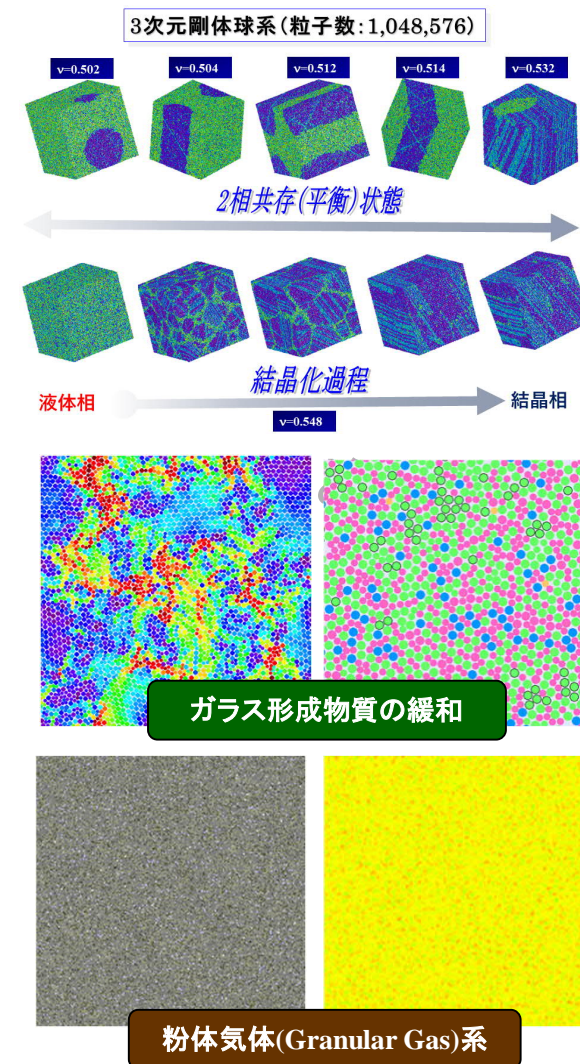
## • 高密度ガラス形成物質の遅い緩和

- C.-T. Yip, M. Isobe, C.-H. Chan, S. Ren, K.-P. Wong, Q. Huo, C.-S. Lee, Y.-H. Tsang, Y. Han, and C.-H. Lam, Physical Review Letters, 125, 258001 (2020).
- M. Isobe, A. S. Keys, D. Chandler, and J. P. Garrahan, Physical Review Letters, 117, 145701, (2016).

## • 粉体気体系

- Isobe, Physical Review E, 68, 040301 (2003); IJMPC, 23,1250032 (2012)).
- 「粉体乱流－マクロとミクロをつなぐ架け橋へ」礒部雅晴、齊藤国靖、日本物理学会誌特集, 73, 469 (2018)。

## • 自己駆動粒子系（生物や人の動き）への応用



# 求める連携先・メッセージ

・ 高密度に集まった分子（粉体や生物（自己駆動）といった個別要素（ユニット）含む）が、周りとの相互作用により、協働的に動くことで「緩和（活動）」が促進されるファシリテーションは、広範な工学分野や日常生活の身近な現象において基本的な概念と考えられます。



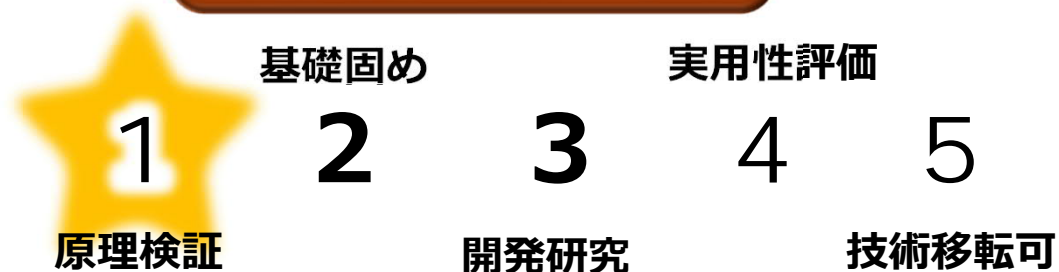
・ 本研究室では、分子のファシリテーションに起因した様々な難問に対し、高速なイベント駆動型アルゴリズムを用いて解析に取り組んでおります。広範な応用分野（粉体、ガラス、アクティブマター、パッキング、相転移、人の流れの問題など）のシミュレーションについて、ご協力できることがございましたら、お気軽にお問い合わせください。

# 本技術に関する情報

## 試作品の状況

未定

## 研究フェーズ



## 文献・特許の情報

- C.-T. Yip, M. Isobe, C.-H. Chan, S. Ren, K.-P. Wong, Q. Huo, C.-S. Lee, Y.-H. Tsang, Y. Han, and C.-H. Lam, Physical Review Letters, 125, 258001 (2020).
- M. Isobe, A. S. Keys, D. Chandler, and J. P. Garrahan, Physical Review Letters, 117, 145701, (2016).
- M. Isobe, Molecular Simulation, 42, pp. 1317-1329, (2016).
- M. Isobe and W. Krauth, The Journal of Chemical Physics, 143, 084509, (2015).
- M. Engel, J. A. Anderson, S. C. Glotzer, M. Isobe, E. P. Bernard, and W. Krauth, Physical Review E, 87, 042134, (2013).  
**PRE 25th MILESTONE PAPER**
- M. Isobe, Int. J. Mod. Phys. C, 10, pp.1281-1293, (1999).



# 【お問合せ】

名古屋工業大学 産学官金連携機構

〒466-8555 名古屋市昭和区御器所町字木市29番

TEL:052-735-5627

E-mail: [nitfair@adm.nitech.ac.jp](mailto:nitfair@adm.nitech.ac.jp)

URL: <https://technofair.web.nitech.ac.jp/>