分子動力学法を用いた多分散系の摩擦シミュレーション

大阪大学大学院理学研究科宇宙地球科学専攻 上田 光生 [1] , 湯川 諭

概要

現在、複雑な物理が理解されているにもかかわらず、摩擦のメカニズムはほとんど理解されていない。摩擦は私達にとって非常に身近な物理現象である。また一方では地震の不安定性を引き起こすなど、その解明が私達にとって有益なものであると思われる。今回の研究では分子動力学法を用いて、半径比の異なる固い弾性円盤にずりをかけたシミュレーションを行い、垂直応力と接線応力の比を摩擦係数として摩擦を調べた。その結果から、摩擦のミクロな起源を探っていきたいと思う。

1 摩擦とは

一般に考えられている摩擦とは、2 体の接触面間の原子がクーロン力で結合しているため生じるというものである。しかし、摩擦面における原子は結晶のように規則正しく並んでいるのではない。むしろ、その摩擦面における原子の配置や構成原子の乱雑さが、摩擦に大きく寄与すると思われ、その寄与が摩擦の理解を難しくしている要因の 1 つであると思われる。

最も単純な摩擦則は、摩擦面にかかる垂直抗力 N に比例した抵抗力 F を受けるというものであり、その比例係数 $\mu(=F/N)$ を摩擦係数としたものである。また、摩擦係数には静止摩擦係数と動摩擦係数があり、それらは速度に依らず一定である。しかし、実際に摩擦係数が一定となる例はごくまれであり、また摩擦が垂直抗力に比例するかもわかっていないのが現状である。現在、様々な摩擦構成則が提案されているが、次にその中でも代表的なものを 2 つ紹介する。

1 つめは、Carlson と Langnr によって仮定された摩擦構成則であり [1]、摩擦係数 μ を速さ v の一価関数で表したものである。

$$\mu(v)=\begin{cases}\frac{1-\sigma}{1+2\alpha v/(1-\sigma)} & (v>0),\\ 1 & (v=0)\end{cases} \tag{1}$$

この構成の特徴は、速さが増加するともに摩擦が減少する速度弱化の形をしていることである。また α,σ は物質パラメータである。

もう 1 つは、Dietrich と Ruina によって行われた、岩石の 2 つの実験から提案された摩擦構成則である。この実験結果から、摩擦は面の状態に依存するということが強く示唆されている。この実験をもとに提案された式が次式である。[2, 3]

$$\mu(v,\theta)=c+a\log(v/v^*)+b\log(\theta/\theta^*) \tag{2}$$

ここで a、b、c は物質パラメータとなる正の定数、v は速さである。この構成則で注目すべき点は状態変数 θ を導入した点である。この θ は現象論的な変数であり、時間に依存するものとなっている。また、v^* と θ^* はそれぞれ系の特徴的な速さと状態変数であり、系の特徴的な長さ L を用いて $\theta^*=L/v^*$ と書く。この式の第 2 項目は速度強化を表現する項であり、第 3 項目は摩擦面に依存する速度弱化を表している。また、状態変数 θ の発展則についても様々な提案がなされている。その代表的なものの 2 つに、スローネス則とすべり則という 2 つの発展則がある。スローネス則は式 (3)、すべり則は式 (4) のように書ける。

$$\frac{d\theta}{dt}=1-\frac{v\theta}{L} \tag{3}$$

$$\frac{d\theta}{dt}=-\frac{v\theta}{L}\log(\frac{v\theta}{L}) \tag{4}$$

[1]E-mail : ueda@spin.ess.sci.osaka-u.ac.jp

2 モデル

二次元空間に固い弾性円盤でできた粒子をつめ、系の上下の境界を同じ弾性円盤粒子からなる壁で挟み、もう一方は周期境界とした。さらに、その壁の一方にシアをかけ摩擦面が動いていることを表現した。そして、系のエネルギーを一定に保つためにシアのかかっていない壁付近に能勢-フーバーの熱浴 [4] をつけた。粒子の散乱に関してはHeltz の接触理論 [5] を用い、また粒子の散乱によるエネルギーの散逸はないとした。

求める摩擦係数は $\mu = F/N$ とした。F はずりを与えている側の壁の粒子にかかる接線応力、N は法線応力である。N に関しては系内部の圧力から求める垂直抗力と、壁に加わる法線成分の応力から直接求める垂直抗力とと比較した結果、どちらもほぼ同じ値となったため、今回は境界粒子に直接かかる法線応力の方を採用した。

シミュレーションの手法はリープフロッグの公式を用いて運動方程式を解いた。時間の刻み幅 δt は、計算時間と精度を考慮した結果 10^{-3} とした。系内部の粒子数は 256 個である。

3 単分散系

単分散系では半径が等しい粒子を用いた。今回は等積と等圧下でシミュレーションを行い、その物理量を比較する。シミュレーションの結果、速度と摩擦の関係をプロットしたものが図 1 である。等圧系のでのシミュレーションは、等積と同様の系を用い、ずりのかかっている境界の壁に一定の外力を垂直方向にかけることにより、圧力を制御した。このグラフから、等積系では速度強化の摩擦則に、等圧系では摩擦則は速度

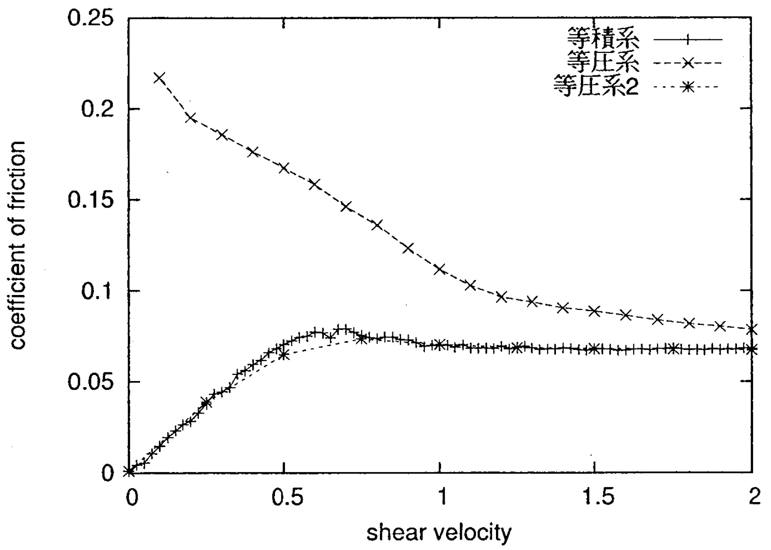

図 1: 等圧系と等積系におけるずり速度と摩擦係数の関係の違い

弱化となっていることがわかる。

平衡系のシミュレーションでは等圧系と等積系は本質的には同じであるが、非平衡系ではそれは自明ではない。よって次に、それらが同じものであるかを調べるために、等積下でのシミュレーションから得られたずり速度に対する圧力の値を等圧に制御してる系に代入し、摩擦係数を求めた (等圧系 2)。すると、グラフは等積系から得られた結果と非常に良く一致し、平衡系と同様に等圧、等積系による差はないという結果となった。つまり、単分散系でも摩擦係数は内部の状態によってその関数系が変化するということがわかった。

4　多分散系

内部の粒子半径 a が異なる 2 種類 a_1, a_2 の粒子を同数だけ系につめ、その他の条件は単分散系と同じ条件で、シミュレーションを行った。等積系では、ずり速度によって内部の圧力が大きくなってしまい、あまり現実的でないと思われるため、今回は等圧系でのシミュレーションを行った。その結果を図 2 に示す。すると、粒子の半径分散 $\sigma^2 = (a_1^2 + a_2^2)/2 + \{(a_1 + a_2)/2\}^2$ が大きくなるに従い、摩擦が速度弱化的な振舞から速度強化的なものへとシフトしているのがわかる。また、分散がある範囲で、ずり速度が小さい領域では摩擦の値にゆらぎがある。これをよくみると 2 つのブランチがあるととらえることもできそうである。この点については後で述べることにする。

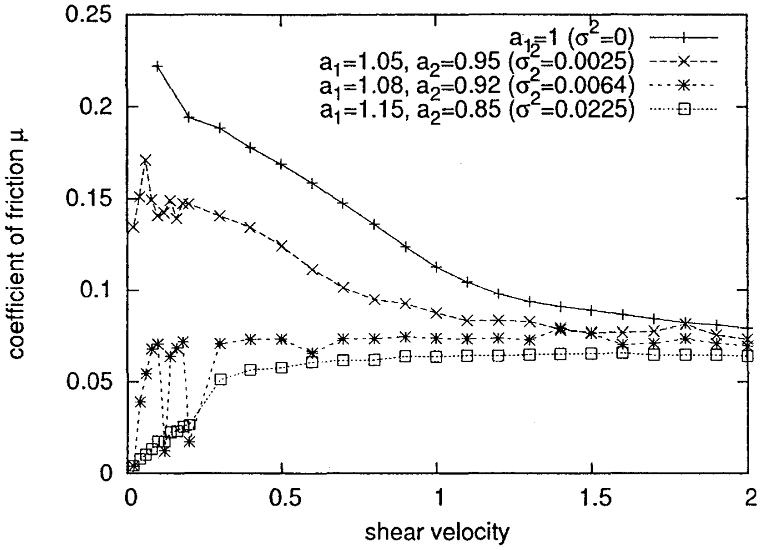

図 2: 粒子の半径分散 σ によるずり速度と摩擦係数の関係

まず、このときの系の内部構造を見てみる。内部粒子の接線方向の平均速度分布 $< vx >$ を垂直な座標 y に関してプロットすると、図 3 のような結果となった。ずり速度は 1 とした。すると、分散 σ が小さいと固液相に相分離しており、分散が大きくなると固相がなくなっていることがわかる。この相分離が、速度強化か速度弱化という違い生じることに関係があるかもしれない。また、単に固相ができることによって流れることのできる範囲が小さくなっていることに依るとも考えることができる。また粒子の半径分布を同様にプロットしてみたが、特にこれといった特徴的な結果は得られず、粒子のサイズによる相分離は起きなかった。

また、図 3 の 2 つの下のブランチがあると思われる系の速度分布を調べると、図 3 のような速度勾配は現れず、全ての内部粒子がずり速度と等しい速度で運動しているという、奇妙な状態が現れることがわかった。ただ、その後の研究で系のサイズを大きくすることにより現れなくり、サイズ効果に起因するものであったと思われる。

5　まとめ

系の状態によって摩擦の速度依存性が変化する、即ちこのモデルでは摩擦構成則は状態に依存することが定性的に示せた。ただ実験結果から導き出された Dietrich-Ruina による速度・状態依存摩擦構成則のような式で表されるかを議論するには、まだ不十分であるだろう。今後としては、3 次元への拡張や、境界条件を変えることによる結果と比較し、摩擦により深い理解へとつなげていきたいと思う。

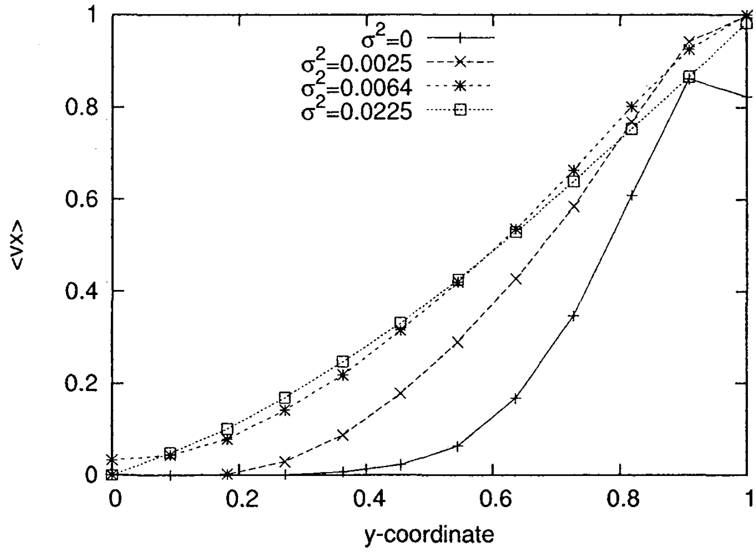

図 3: ずりと垂直方向の座標 y に関するずり方向の平均速度分布 $<vx>$

参考文献

[1] J. M. Carlson, J. S. Langer and B. E. Shaw, Rev. Mod. Phys. **66**, 657-669, (1994).

[2] J. H. Dietrich, J. Geophys. Res. **84**, 2161-2168, (1979).

[3] A. Ruina, J. Geophys. Res. **88**, 359-370, (1983).

[4] Wm. G. Hoover 原著, 小竹進 監訳, 志田晃一郎 訳, 計算統計力学, 森北出版株式会社, (1999)

[5] Heltz H. , J. Reine Angew. Math. **92**, 156, (1882).