

2次元弾性体モデルによる接触及び低速衝突シミュレーション

京都大学理学研究科化学専攻 國仲 寛人 (Hiroto Kuninaka)

京都大学理学研究科物理学・宇宙物理学専攻 早川 尚男 (Hisao Hayakawa)

Department of Chemistry, Department of Physics,
Kyoto University

1 Introduction

粉体等の多数の粒子からなる系を理論的または数値的に扱うときに重要なのは、対象とする系の動的な振る舞いの素過程である、粒子間の接触や衝突を正確に模倣することである。本講演では巨視的な弾性体をばねと質点から構成される2次元の格子モデルで表現し、粒子間の接触や低速衝突のシミュレーションの結果と理論から予測される結果とを比較する。

2 モデル

著者の用いたモデルは1099個の質点を円内にランダムに配置して作ったランダム格子モデルである(図1)。質点間はデローニー三角分割のアルゴリズムを用いて近接の質点同士を接続している。各質点間の相互作用は非線形ばねによる復元力に加えてばね両端の相対速度に比例する摩擦力が働くとして、以下の式で表す。

$$f(\mathbf{x}_{ij}) = -k_a \mathbf{x}_{ij} - k_b \mathbf{x}_{ij}^3 + \eta_{dis}(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j). \quad (1)$$

ここで右辺第二項までは非線形ばね相互作用を表しており、 $\mathbf{x}_{ij}$ はばね両端の粒子 ij 間の自然長からの伸びである。 k_a 、 k_b はばね定数であり、その値は $k_a = 1.0 \times mc^2/R$ 、 $k_b = k_a \times 10^{-3}/R^2$ という値を用いている。ここで m は質点の質量、 R は円盤の半径、 c は1次元音速である。右辺第三項は質点間の摩擦を表したもので、両端の粒子の相対速度に粘性係数 η_{dis} を乗じた形で導入する。粘性係数 η_{dis} は $\eta_{dis} = 1.0 \times 10^2 m/(R/c)$ という値を用いる。

3 接触のシミュレーション

このようにして導入した弾性円盤を壁に接触させ、圧縮力とそれによって生じる歪みの関係を求め、Hertzの接触理論[1]と比較する。一般に弾性球の接触において圧縮力 P によって生じる歪み ξ は、 $P^{2/3}$ に比例する形で表され、その係数は圧縮する物質のヤング率やポアソン比によって表される[1]。2次元の場合は以下の関係式で表すことができる[2]。

$$\xi \simeq b \frac{P}{\pi E} \left\{ \ln \left(\frac{4\pi ER}{bP} \right) - 1 - \nu \right\}, \quad b = 1 - \nu^2. \quad (2)$$

ここで、 E はヤング率、 ν はポアソン比である。モデルのポアソン比は同様のアルゴリズムで生成した長方形を牽引した後横方向の伸びに対する縦方向の縮みを直接測定することで計算でき、このモデルの場合、 $\nu \simeq 7.5 \times 10^{-2}$ であることがわかっている[3]。従って b の値は $b \simeq 1$ となる。

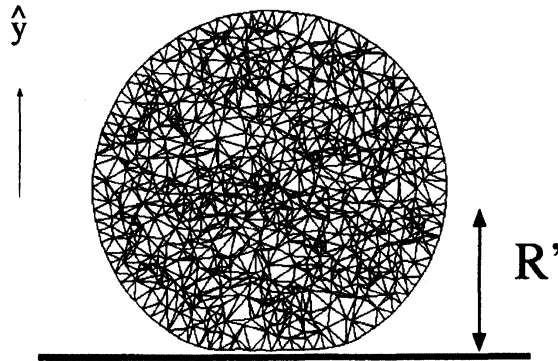


図 1: ポテンシャル壁と接触する円盤モデル

円盤の接触シミュレーションは次のように行なう。円盤を構成する各質点 i の運動方程式は次のように書くことが出来る。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_{j=1}^{N_i} \{ -k_a \mathbf{x}_{ij} - k_b \mathbf{x}_{ij}^3 - \eta (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \} + a V_0 \exp(-ay) \hat{\mathbf{y}} - \frac{\mathbf{P}}{N} \hat{\mathbf{y}}. \quad (3)$$

ここで $\mathbf{r}_i$ は質点 i の位置、 t は時間、 $\mathbf{v}_i$ は質点 i の速度、 N_i は質点 i に接続されているばねの本数である。また指数関数の項は円盤を接触させる壁を表現した項であり、 $a = 300/R$ 、 $V_0 = amc^2/R$ という値を用いている。 $\hat{\mathbf{y}}$ は垂直方向の単位ベクトル、 N は質点数 $N = 1099$ である。

$\mathbf{P}$ は圧縮力で、式 (3) を数値的に解いて全質点の位置を時間発展させると、徐々に円盤全体の振動が緩和していく。振動が緩和した時の重心と円盤下端の距離を R' とし、円盤の歪みを $\xi \equiv |R - R'|$ で定義する。シミュレーションでは圧縮力 P を $4.0 \times 10^{-3} mc^2/R$ から $1.0 \times 10^{-2} mc^2/R$ の範囲で変化させ、圧縮力 P と歪み ξ の関係を求める。

図 2 の $\times$ 印はシミュレーションから求めた圧縮力 P と歪み ξ の関係である。ここで横軸は πRE 、縦軸は R でスケールし、無次元化した。

この結果と 2 次元の Hertz の接触理論との比較を試みる。(2) 式の b をフィッティングパラメータとし、 $b = 1.55$ という値でシミュレーション結果をフィットした結果が図 2 の実線である。この図からモデルの接触シミュレーションの結果は、2 次元 Hertz 理論から予想される関係と、ほぼ調和的であることがわかる。

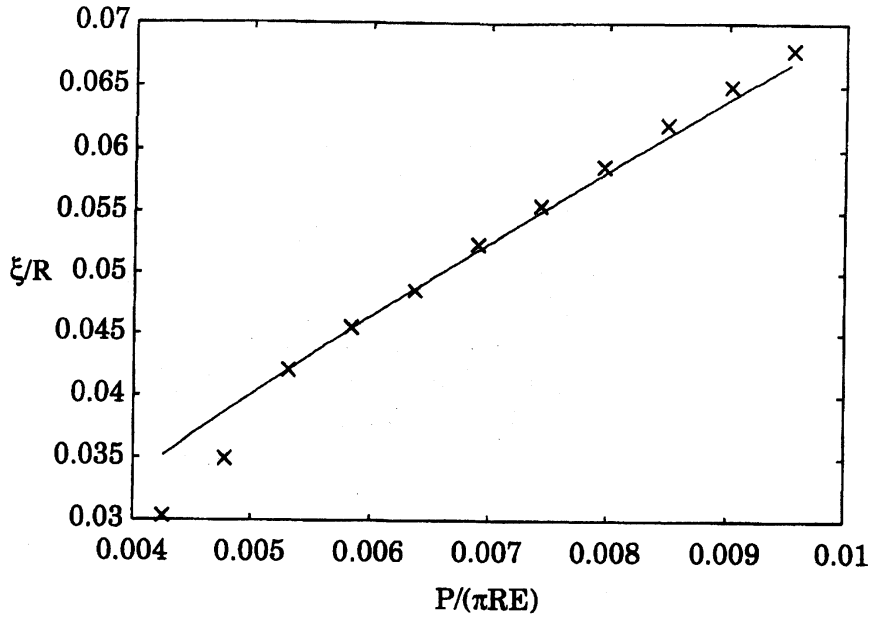


図 2: 圧縮力と歪みの関係。

4 低速衝突のシミュレーション

次に、円盤をポテンシャル壁に正面衝突させ、衝突速度とはねかえり係数の関係を調べる。一般に巨視的な物体同士が低速で正面衝突したときの衝突速度とはねかえり係数の関係は Hertz の接触理論を基にした準静理論 [4] で説明することができる。

準静理論ではまずはじめに衝突時間中に物体に生じる歪み ξ の時間発展方程式を以下の様に表す。

$$M \frac{d^2 \xi}{dt^2} = -\frac{\pi E_* \xi}{\ln(4R/\xi)} - \frac{\pi \tau_0 E_*}{\ln(4R/\xi)} \frac{d\xi}{dt} \quad (4)$$

ここで、 E_* は有効ヤング率であり、 $E_* = E/(1-\nu^2)$ で表される。また、 τ_0 は散逸の時間スケールである。右辺第一項は 2 次元の Hertz の接触理論から求められる弾性力である [2]。右辺第二項は物質の粘性に起因する散逸力であり、歪み速度に比例した形で導入する [4]。この方程式を初期条件 $\xi(0) = 0$ 、 $\dot{\xi}(0) = v$ で解き、 $\dot{\xi}(\tau)$ ($\tau = \pi(R/c)\sqrt{\ln(4c/v)}$: 接触時間 [5]) を求めることによって、はねかえり係数 $e \equiv -\dot{\xi}(\tau)/\dot{\xi}(0)$ を計算すると、

$$e \simeq d_1 \sqrt{1 - \frac{d_2}{\sqrt{\ln(4c/v)}}} \quad (5)$$

となる。ここで $d_1 = 1$ 、 $d_2 = 2\pi\tau_0 E_*/\rho Rc$ である。

シミュレーションは、次に示す各質点の運動方程式を数値的に解くことになる。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_{j=1}^{N_i} \{ -k_a \mathbf{x}_{ij} - k_b \mathbf{x}_{ij}^3 - \eta_{dis} (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j) \} + a V_0 \exp(-ay) \hat{\mathbf{y}}. \quad (6)$$

ここで初期条件は各質点の初速度を $3.0 \times 10^{-3} R/c$ から $5.0 \times 10^{-2} R/c$ の範囲で変化させて、各初速度に対するはねかえり係数を計測した。

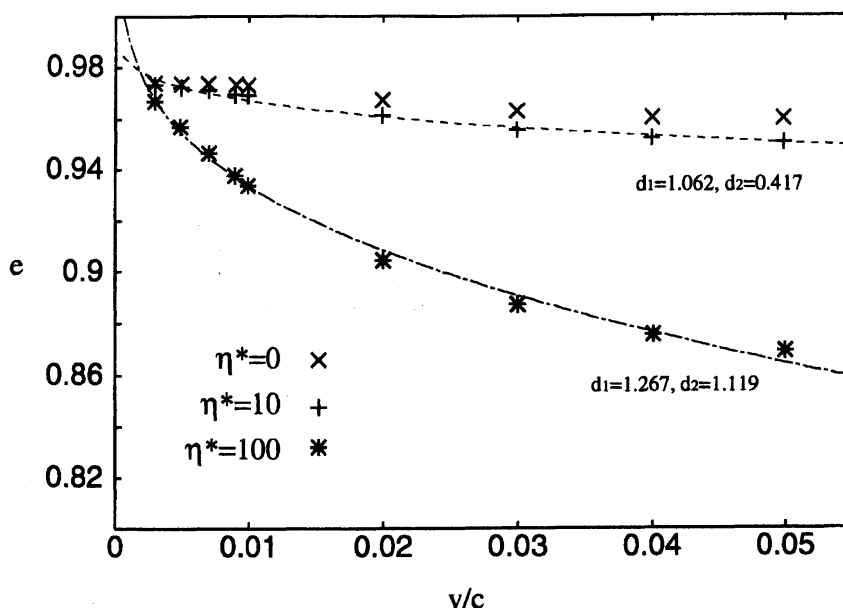


図 3: 衝突速度とはねかえり係数

図 3 は衝突速度とはねかえり係数の関係をプロットしたものである。ここで、 $\eta^* = \eta_{dis} \times R/mc$ と定義し、 $\eta^* = 0.0$ から $\eta^* = 1.0 \times 10^2$ まで変化させて各 η^* についてプロットした。 $\eta^* = 0.0$ の時は上に凸の曲線を描くため、下に凸の曲線になる式 (5) でフィットさせることはできないが、 η^* の値が大きくなるにつれ下に凸の曲線に移行し、 d_1 の値もほぼ 1 に近い値でフィットできることがわかった。

5 エネルギー吸収壁の導入

ばね相互作用に摩擦力を追加すれば我々のモデル計算の結果は、既存の接触理論や衝突理論とほぼ一致させることができることはわかった。最後に質点の相対速度に比例する摩擦力のようなローカルな散逸メカニズムを導入しなくても衝突理論を回復するようなハミルトンモデルの例を示す。円盤を構成する質点間相互作用は式 (1) において $\eta_{dis} = 0$ とし、完全な保存系とする。壁に円盤の衝突エネルギーが散逸する状況を実現するために、これまでの指数関数型の壁ポテンシャルの代わりに弾性壁を用意する。弾性壁は 1269 個の質点を長方形にランダムに配置させ、質点間相互作用は円盤と同様とする (図 4)。ばね定数は円盤、壁共に $k_a = 1.0 \times mc^2/R$ 、 $k_b = k_a \times 10^{-3}/R^2$ とし、 η_{dis} は共に 0 とした。壁の境界条件は、左右両端と底面の粒子のエネルギーを時間発展させるたびに 0 にリセットし、壁にエネルギーが吸収される状態を実現した。

また、円盤と壁の相互作用は次のように定義する。図 5 は円盤と壁の相互作用の模式図である。円盤の下端の粒子の真下にあるばねを常にサーチしておき、壁との距離 l_s がしきい値よりも小さくなると、円盤表面の粒子は真下のばねから距離 l_s を引数とする指数関数型のポテンシャル力 $F(l_s) = aV_0 \exp(-al_s)\mathbf{n}_s$ を受ける。ここで、 $a = 300/R$ 、 $V_0 = amc^2 R/2$ という値を用いた。また $\mathbf{n}_s$ はばねの法線ベクトルである。ばね両端の粒子は、トルクがつりあうように反作用を受けるとする。このようなルールで円盤と壁の相互作用をモデル化した。

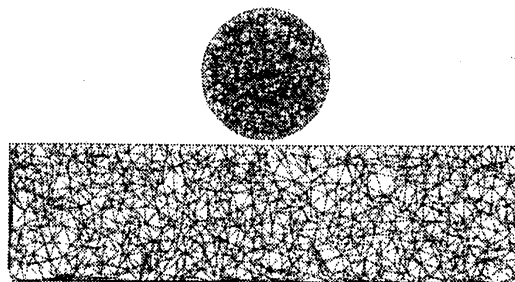


図 4: 円盤とエネルギー吸収壁。

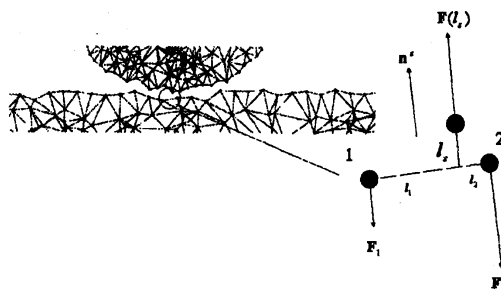


図 5: 円盤と壁の相互作用

図 6 に衝突速度とはねかえり係数の関係を示す。(5) 式の d_1, d_2 をフィッティングパラメータとし、 $d_1 = 0.973, d_2 = 0.119$ という値でシミュレーション結果をフィットした結果が図 6 の実線である。フィッティングパラメータ d_1 の値も 1 に近く、シミュレーションの結果は、準静理論から予想される関係とほぼ調和的であることがわかる。

6 まとめ

本講演では以下の項目を報告した。

1. 散逸メカニズムを導入したモデルで、接触及び低速正面衝突のシミュレーションを行った。
2. 接触に関して、圧縮力と歪みの関係のモデル計算の結果は 2 次元の Hertz の接触理論と良好な一致を示した。
3. 低速正面衝突に関して、衝突速度とはねかえり係数の関係は衝突の準静理論と良好な一致を示した。
4. 散逸メカニズムを導入しない、ハミルトン系のモデルでもエネルギーを吸収する壁を導入することで、衝突の準静理論とよい一致を示すことがわかった。

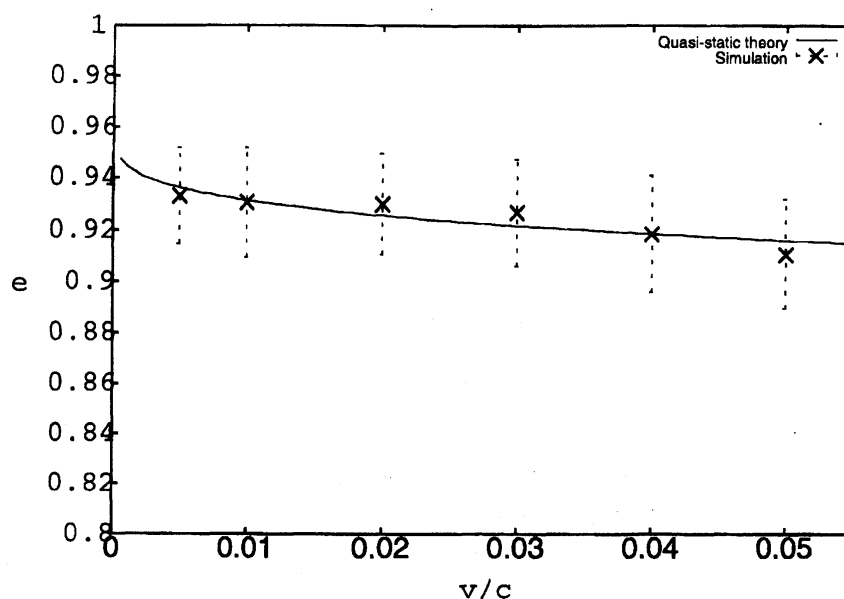


図 6: エネルギー吸収壁との正面衝突時の衝突速度とはねかえり係数。

参考文献

- [1] H. Hertz: J. Reine Angew. Math. **92**, 156 (1882); L. D. Landau and E. M. Lifshitz: Theory of Elasticity(2nd English ed.). Pergamon, 1960.
- [2] F. Gerl and A. Zippelius: Phys. Rev. E **59**, 2361 (1999).
- [3] H. Kuninaka and H. Hayakawa: J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 1655 (2003).
- [4] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J.-M. Hertzsch, and T. Pöschel: Phys. Rev. E **53**, 5382 (1996); G. Kuwabara and K. Kono: Jpn. J. Appl. Phys. **26**, 1230 (1987).
- [5] H. Hayakawa and H. Kuninaka: Chem. Eng. Sci. **57**, 239 (2002).