

平均接触点数を実験で測定するための確率的手法

Laboratoire de Physique et Mécanique des Milieux Hétérogènes

(UMR 7636 CNRS-ESPCI-P6-P7), 10 rue Vauquelin, 75231 Paris Cedex 05, France

稲垣 紫緒¹, Évelyne KOLB, Philippe CLAUDIN

イントロダクション

粉粒体媒質の力学を理解し記述するうえで、粒子の接触角度分布 $P(\theta)$ は最も重要な巨視的物理量のひとつである。たとえば、粉体層を重力下で形成した場合、異なる供給方法で接触角度分布の違いが観察されている[1]。比較的大きな荷重を外力として与えた場合、粒子配置は崩壊と再形成がおき、接触ネットワークはこのような荷重に対して異なる応答を示す。ヤング率やポアソン比といった、巨視的物性として実効的な弾性率を測定するうえで、接触ネットワークを表現する量として接触角度分布は非常に重要である。接触角度分布と強く関係する、平均接触点数もまた、粉粒体力学の基本的物理量のひとつとしてとても重要である。

分子動力学法を用いた数値計算においては、平均接触点数の測定方法は素直に数えることで何の問題も起きない。しかし、実際の物理実験においては、撮影する映像の解像度や粒子の直径のわずかなばらつきから、平均接触点数を正確に測定するのに困難が生じる。そのため、愚直に考えれば、2つの粒子の中心間距離 l が粒子の半径の和より小さければ接触している、と判定することができるが、この方法では妥当な結果を得ることができない。Kolb らによる最近の結果[2]で、単分散の粒径の円盤媒質について以下のような方法が提案されている。まず、調節パラメータとして ε を導入し、単分散粒子の粒径を $\langle d \rangle$ としたときに、もし

$$l \leq (1 + \varepsilon) \langle d \rangle \quad \text{---(1)}$$

ならば 2 つの粒子は接触している、として平均接触点数を ε の関数 $Z(\varepsilon)$ 、として測定した。この条件から判定された、 j 個の接触点を持つ粒子の数を $N_j(\varepsilon)$ とする。彼らの実験は重力下で行われていたことから、粒子は必ず 2 つ以上接触点を持っていなければ不安定であるので、接触点が 0 個、もしくは 1 個持つ粒子の数が 0 になるという条件を満たす最小の ε を真の粒径を与える値、 ε_{true} であると考えた。したがって、

$$N_0(\varepsilon_{true}) = N_1(\varepsilon_{true}) = 0 \quad \text{---(2)}$$

であるような ε_{true} によって与えられる平均接触点をその媒質の平均接触点数 $Z_{true} = Z(\varepsilon_{true})$

とみなすこととした。類似した接触判定条件は Calvetti[3]らの実験においても用いられている。しかし、 ε の選び方は自明ではなく、たとえば、離散要素法を用いた数値計算で、

¹ E-mail: inagaki@pmmh.espci.fr

実際の粒子が持っている程度の非常に微小な粒径の分散を入れた系で同様の解析を行うと、

$Z_{true} = Z(\varepsilon_{true})$ として得られる平均接触点数は、離散要素法から正確に測定された平均接触

点数に比べて大きく見積もりすぎる傾向にあることが分かっており、新たな接触点数の測定するための解析手法をここで提案したい。さらに、離散要素法を用いた数値計算で、われわれの新しい解析手法の結果と、数値計算で実際正確に測定できる平均接触点数を比較して、われわれの手法の有効性について検証したい。

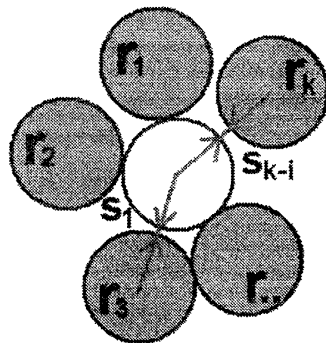
解析手法

まず、単分散粒径の二次元円盤媒質を想定し、粒子は平均半径が $\bar{r}$ で、半径に比べて充分微小な幅の分散があるとする。ここでは簡単のために粒子半径の分布 $P_r(r)$ は平均 $\bar{r}$ 、標準

偏差 Δ の正規分布に従う。粒子 i と粒子 j の間の中心間距離を ℓ_{ij} とし、接触判定条件は、

$$\ell_{ij} \leq \left(\bar{r} + \frac{\varepsilon}{2}\right) + \left(\bar{r} + \frac{\varepsilon}{2}\right) \quad \cdots(3)$$

で与えられる。



(図 1) k の最近接粒子のうち、 i 個の粒子が接触していて、 $(k-i)$ 個の粒子が接触していない場合

いま、 k の最近接粒子のうち、 i 個の粒子が接触していて、 $(k-i)$ 個の粒子が接触していない状況を考える。 $(k+1)$ 個の半径と $(k-i)$ 個の粒子間距離 s をそれぞれの確率分布に従って選び、(3)式の接触判定条件から j 個接触点があるように見える確率は ε の関数として

定義され、 $P_{i \rightarrow j}^k(\varepsilon)$ とする。粒子の半径の確率分布は上に述べたように、今のところ正規

分布を仮定し、粒子間距離 s の確率分布については、Silbert らの数値計算[4]によってべき分布になることが示唆されていることからその確率分布の形を規格化のためのパラメータ λ を用いて以下のように仮定する。

$$P_s(s) = \frac{1}{\sqrt{\pi\lambda r s}} \exp\left(-\frac{s}{\lambda r}\right) \quad \cdots(4)$$

より厳密に $P_s(s)$ を計算したい場合には、粒子の中心間距離と粒子間距離の関係が

$$\ell = (r_i + r_j) + s \quad \cdots(5)$$

であり、 ℓ は動径分布関数 $g(r)$ を確率分布として得られる量であることから、粒子間距離 s の確率分布は動径分布関数 $g(r)$ と粒子半径の分布 $P_r(r)$ の畳み込みで厳密に計算することも可能である。動径分布関数は、粒子中心をよい精度で測定できる場合にはより簡単に得られる量であるので、実用上で不便はないが、粒子間距離の確率分布がべきになる、と言うのは経験上かなり普遍的であることが分かっているので、ここでは簡単のために(4)式を仮定した。

ある与えられた ε のときに、最近接粒子が k 個ある粒子に対して、本当は i 個接触点がある粒子の数を n_i^k 、また(4)式によって j 個接触点があるように見える粒子の数を $N_j^k(\varepsilon)$ とすると、本当は i 個接触点があるのに、 j 個接触点があるように見える確率が $P_{i \rightarrow j}^k(\varepsilon)$ であるから、

$$N_j^k(\varepsilon) = \sum_i P_{i \rightarrow j}^k(\varepsilon) n_i^k \quad \cdots(6)$$

という関係が成り立つ。 j 個接触点があるように見える粒子の数は、それぞれの ε について測定することが可能で、 $P_{i \rightarrow j}^k(\varepsilon)$ は粒子半径の確率分布と粒子間距離の確率分布から計算が可能であり、今求めたい量である、最近接粒子が k 個あり、かつ i 個の接触点を持つ粒子の数は

$$n_i^k = \sum_j [P_{i \rightarrow j}^k(\varepsilon)]^{-1} N_j^k(\varepsilon) \quad \cdots(7)$$

として求めることができる。ここで、 n_i^k は真に i 個の接触点を持つ粒子の数であるから、 ε によらない量として得られることが期待される。接触点を i 個持つ粒子の数を n_i とすると、平均接触点数 Z は、

$$n_i = \sum_k n_i^k \quad \cdots(8)$$

$$Z = \frac{\sum_i i \cdot n_i}{\sum_i n_i} \quad \cdots(9)$$

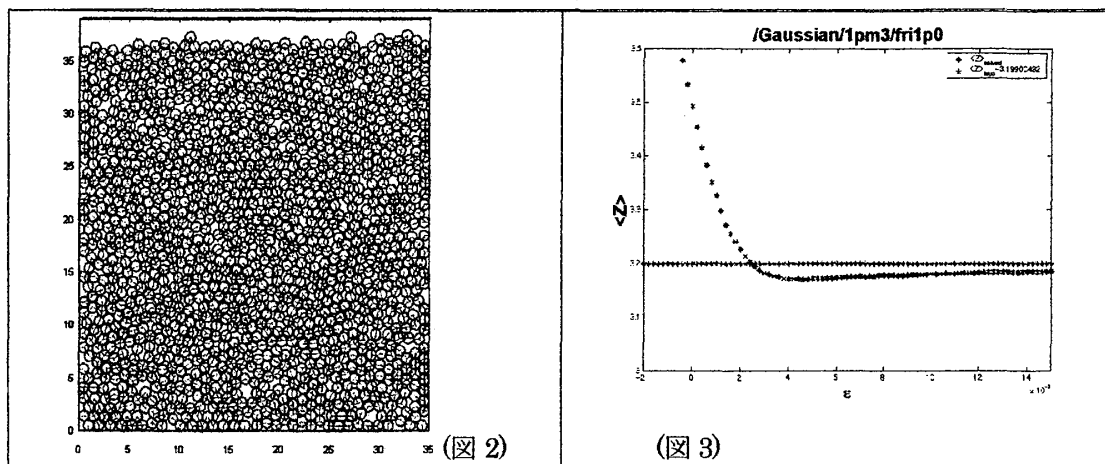
で得られる。

検証

離散要素法を用いた数値計算で実際に2次元円盤堆積層を重力下に形成し、上で述べた解析手法を用いて平均接触点数を測定する。数値計算で厳密に測定できる真の平均接触点数と比較して、われわれの手法の有効性について検証する。

数値計算では、図2にあるように、粒子数1300、システムサイズは高さ $\times$ 幅が $35 < d >$ 程度で行った。平均粒径 $\langle d \rangle = 1$ に対して、粒径分散の標準偏差 $\Delta = 10^{-3}$ とし、(3)式で定義されるようなパラメータ ε を用いて $N_j^k(\varepsilon)$ を測定した。 $P_{i \rightarrow j}^k(\varepsilon)$ は正規分布に従う粒径

分布と、(4)式に従う粒子間距離の確率分布を用いて数値的に計算し、(7)~(9)式を用いて平均接触点数を計算した。(図 3) は、赤線が数値計算で厳密に計算された真の平均接触点数で、青い曲線がわれわれの今回の解析手法によって計算された平均接触点数である。 ε が正の領域では、平均接触点数は期待されたとおり ε によらない量として得られる。また、その誤差は真の平均接触点数の 0.9 パーセント程度となっており、イントロダクションで紹介した従来の方法に比べて 10 倍ほどよい精度で計算することが可能になった。



議論

上に述べた検証をさまざまなパラメータの数値計算に対して行ってみた。摩擦係数を変えることによって、幅広い充填率と接触点数の円盤堆積層について解析してみると、摩擦係数が低く、結晶化を起こしやすいような状況では平均接触点数がよく見積もれないことが分かった。また、2 分散粒径の円盤媒質では、単分散媒質に比べて結晶化しづらいことから、本手法は比較的うまくことが分かっている。このように、本手法は未だ発展途上であり、数値計算で検証をしながら、うまくいく充填率と接触点数の領域や、分散の幅などをより詳しく調べていく必要がある。また、実際に物理実験では 2 分散の粒径の媒質を用いることが多く、接触判定の確率 $P_{i \rightarrow j}^k(\varepsilon)$ を 2 分散の系の場合に大きな粒子と小さな粒子の組み合わせをより厳密に定義して計算しなおすことによってより正確に平均接触点数を計算するよう改善する、などの課題も残っている。

謝辞 J.-C. Charmet, E. Clément, J. Treiner らとの有意義な議論に感謝する。また、この研究はフランス政府給費奨学金によって稲垣が支援を受けたことにも感謝する。

参考文献

- [1] Geng *et al*, Phys. Rev. E **64** (2001) 060301(R)
- [2] E. Kolb, C. Goldenberg, S. Inagaki and E. Clément, J. Stat. Mech., P07017 (2006).
- [3] F. Calvetti, G. Combe and J. Lanier, Mech. Coh. Frict. Materials **2**, 121 (1997).
- [4] L.E. Silbert, D. Ertacs, G.S. Grest, T.C. Hasley and D. Levine, Phys. Rev. E **65** 031304