数理解析研究所講究録 1472 巻 2006 年 203-210

欠陥を含む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, Kyoto University
Department of Physics, Kyoto University

1 Introduction

これまでに用いたばねー質点系のハミルトン系に基づく弾性体モデルは、巨視的な弾性体の斜め衝突の現象論 [1] や、衝突角度とはねかえり係数の関係の実験結果 [2] を定性的に再現することに成功している [3, 4, 5]。だが、モデル自体がエネルギー散逸のメカニズムを含まないハミルトンモデルのため、弾性体の接触理論が示すような接触力と変形の関係を再現することはできない。また、接触理論に基づく低速衝突の準静理論も、物体内部の散逸メカニズムを含まないため再現できない。

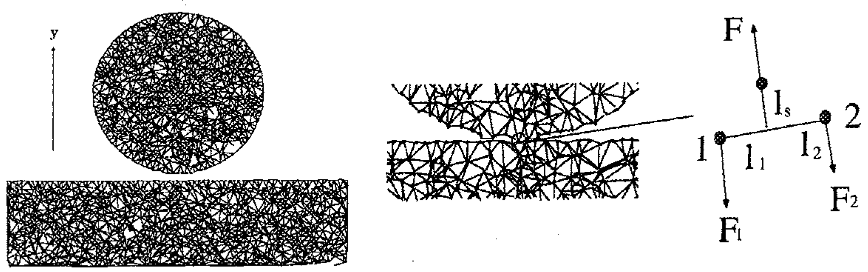
この講演では固体中の格子欠陥に相当するメカニズムをこれまでのモデルに導入し、エネルギー吸収壁に接触させたり低速で正面衝突させることにより、巨視的な弾性体が示すと考えられている理論を、ハミルトン系に基づいたモデルでも回復できることを示す。

2 数値モデル

我々の用いた弾性体モデルは多数の質点をランダムに配置し、デローニー三角分割のアルゴリズムを用いて最近接の粒子同士を接続することによって構成される (図 1(a))。円盤と壁を構成する質点数はそれぞれ 1099、1269 である。接続された粒子 i, j は次式のような非線形ばねによって相互作用する。

$$\mathbf{f}_{ij}(x) = -k_a \mathbf{x}_{ij} - k_b \mathbf{x}_{ij}^3. \tag{1}$$

ここで、$\mathbf{x}_{ij}$ はばねの自然長からの変位ベクトルである。ばね定数 k_b は $k_b = k_a \times 10^{-3}/R^2$ とすることで弱い非線形項を導入する。ここで R は円盤の半径を表している。k_a に関しては、円盤と壁の k_a をそれぞれ $k_a^{(d)}$、$k_a^{(w)}$ とすると、$k_a^{(d)} = 1.0 \times Mc^2/R^2$、$k_a^{(w)} = 1.0 \times 10^2 Mc^2/R^2$ という値を用いた。ここで M は円盤の質量、c は 1 次元音速を表している。



(a)　　　　　　　　　　(b)

図 1: (a) 欠陥を含む弾性円盤と弾性壁の２次元モデルと (b) 円盤と壁の相互作用の概略図。

円盤と壁との相互作用は次のように表される (図 1(b))。円盤の下の縁にある質点 i は、壁表面のばねのうち一番近くにあるばねから次のような力を受ける。

$$\mathbf{F}(l_s^{(i)}) = aV_0 \exp(-al_s^{(i)})\mathbf{n}_s^{(i)} \tag{2}$$

ここで $l_s^{(i)}$ は質点 i と最近接のばねまでの距離であり、$\mathbf{n}_s^{(i)}$ はばねに対して法線方向の単位ベクトルである。パラメータ値は $a = 500/R$、$V_0 = amc^2R/2$ という値を用いた。ばね両端の２粒子が受ける反作用はトルクが釣り合う条件から決定され、質点 i からばねに下ろした垂線の足からの距離 l_1、l_2 を用いて、$\mathbf{F}_1 = -\mathbf{F}(l_s^{(i)})/(1+l_1/l_2)$、$\mathbf{F}_2 = -\mathbf{F}(l_s^{(i)})/(1+l_2/l_1)$ となる。

これより質点 i の運動方程式は次のようになる。

$$m\frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_{j=1}^{N_i}\left\{-k_a\mathbf{x}_{ij} - k_b\mathbf{x}_{ij}^3\right\} + \Theta(l_{th} - l_s^{(i)})aV_0\exp(-al_s^{(i)})\mathbf{n}_s^{(i)} \tag{3}$$

ここで $\mathbf{r}_i$ は質点 i の位置ベクトル、t は時間である。$\Theta(x)$ はステップ関数で、$x \geq 0$ の時 1、$x < 0$ の時 0 という値をとる。l_{th} は相互作用のしきい値で、円盤のばねの自然長の平均で定義する。この運動方程式を解くために４次のシンプレクティック積分法を用い、時間刻み $dt = 10^{-3}R/c$ で数値積分を行なった。

ここで格子欠陥を模倣した欠陥粒子をモデルに導入する。欠陥粒子を導入するには、まずモデルを構成する質点のうち数個をランダムに選ぶ。次にその質点 i につながってる N_i 本のばねのうち、$N_i - 1$ 本のばねを切断する。これによって、質点 i は１本のばねだけで接続された状態になり、他の質点に比べてランダムな運動が可能になる。複数の欠陥粒子がランダムな運動をすることにより、モデル内部に生じた弾性波が散乱され、内部状態が速やかに平衡状態に達することが期待できる。このことはあたかも固体中の格子欠陥や転位が、固体内部のフォノンを散乱したり吸収することによって、速やかに内部の状態を熱平衡状態に達しやすくする現象に類似している。後に示すデータはほとんどが欠陥粒子を１０個ずつ弾性円盤と弾性壁両方に導入したものであるが、欠陥粒子数の接触シミュレーションの結果に対する依存性を後で議論する。

更に弾性壁は弾性円盤に対して十分大きな壁の部分系であると見做し、それに見合った境界条件を設定する。境界条件は壁の両サイドと底に自由境界条件を設定する。その時、壁の底の左右両端の粒子のみを固定する。この弾性壁が部分系であるためには、両サイドと底から弾性波が外側に逃げて、戻ってこないという状況を実現する必要がある。そこで、壁の両サイドと底にある粒子に関して、エネルギー流速 $\mathbf{J}$ を $\mathbf{J} = \sum_i \{(1/2)m\mathbf{v}_i^2 + \epsilon_i\}\mathbf{v}_i$ で定義する。ここで i は粒子のインデックスであり、$\mathbf{v}_i$ はその速度、ϵ_i は粒子 i が接続されているばねから受けるエネルギーの総和を表している。壁の境界面の外向きの法線ベクトルを $\mathbf{n}_b$ とし、$\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}_b > 0$ という状態を境界面で実現するためには、粒子の運動方程式を数値的に解く際に、各時間ステップにおいて $\mathbf{v}_i$ がモデル内部に向いていたら $\mathbf{v}_i$ を0にリセットする。するとエネルギー流速は常に正の値を取ると考えられ、各境界面において $\mathbf{J}\cdot\mathbf{n}_b > 0$ の状態を実現することができる。

3 接触のシミュレーション

まずはこの弾性円盤と弾性壁を用いた接触シミュレーションを行なう。ここでは弾性壁の高さを $4R$、幅を R に設定する。弾性円盤を外場 P において弾性壁と接触させて、振動が緩和した後に、外場 P と円盤の変形 δ の関係を調べる。従ってこの接触のシミュレーションの場合、質点の運動方程式は式(3)の右辺に $-(P/N)\hat{\mathbf{y}}$ を加えたものとなる。ここで N は、弾性円盤を構成する質点数 $N = 1099$ であり、$\hat{\mathbf{y}}$ は壁表面の単位法線ベクトルである。円盤が円の状態を初期状態として各質点の運動方程式を解くと、円盤の重心の振動は徐々に緩和していく。定常な振動に落ち着いたら円盤の重心から接触面までの距離 R_d を計測し、全体の変形 $\delta \equiv R - R_d$ を求める。この作業を $P = 5.77\times 10^{-3}\pi RE^*$ から $P = 1.27\times 10^{-3}\pi RE^*$ まで P を変化させて行い、$P/\pi RE^*$ と δ/R の関係を求める。ここで、E^* は有効ヤング率 $E^* = E/(1-\nu^2)$ であり、E はヤング率、ν はポアソン比を表している。

図2は $P/\pi RE^*$ と δ/R の関係を求めたものである。シミュレーションは質点の配置が異なる円盤を１０種類用意して、シミュレーションデータを平均した。×印がその平均値であり、エラーバーは標準偏差を表している。また、欠陥粒子の数を弾性円盤、弾性壁共に１０個ずつに設定したときのデータを示した。

このデータとHertzの接触理論[6]との整合性を調べてみる。２次元のHertzの接触理論によれば、圧縮力 P と歪 δ の関係は、次のように表される[7]。

$$\delta \simeq \frac{P}{\pi E^*}\left\{\ln\left(\frac{4\pi E^* R}{P}\right) - 1 - \nu\right\}. \tag{4}$$

実線は、式(4)を $\nu = 0.336$ でプロットしたものである[1]。この結果より、我々のシミュレーションデータはフィッティングパラメータなしで２次元のHertz理論を回

[1]モデルのポアソン比を求めるには、まずMathematica等を用いて円盤の全質点の座標を読み込み、等方圧縮や単純シアをかけることによりエネルギー密度を計算する。次にモデルの等方性を仮定すれば、ラメ係数が２つ決まるので、そこからポアソン比が求められる。

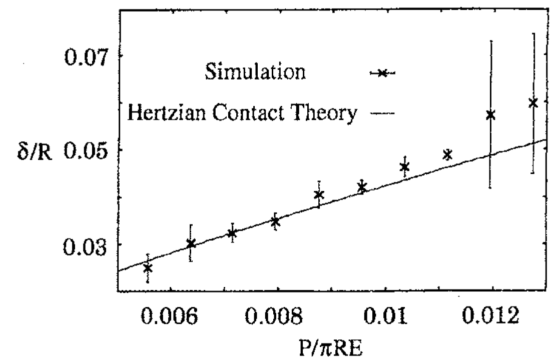


図 2: 圧縮力 $P/\pi RE^*$ と変形 δ/R の関係。×印は 10 サンプルの円盤を用いた シミュレーション結果の平均値であり、エラーバーはその標準偏差である。

復できていることがわかる。このことから、我々の弾性体モデルは接触理論が予言するような平衡状態を実現できると結論付けることができる。

更にモデルが平衡状態に至るプロセスを特徴付けるため、円盤を構成する質点の速度分布関数、及びそこから定義されるシャノンエントロピーの時間発展を調べた。速度分布関数は、質点の位置と速度に関する分布関数 $f(x,y,v_x,v_y,t)$ に対して、$f(v_x,v_y,t) \equiv \sum_x \sum_y f(x,y,v_x,v_y,t)$ で定義する。$f(x,y,v_x,v_y,t)$ は時刻 $t-6R/c$ から t までのデータを平均して求める。

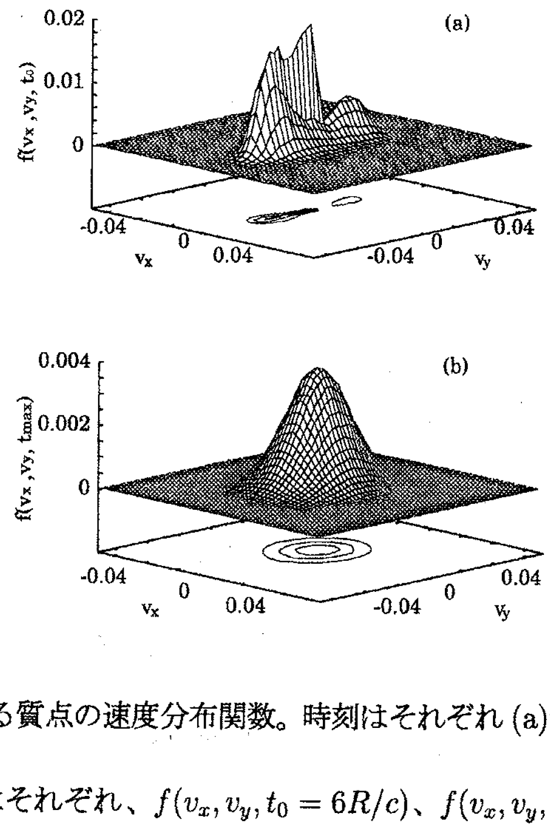


図 3: 円盤を構成する質点の速度分布関数。時刻はそれぞれ (a)$t=t_0$、(b)$t=t_{max}$。

図 3(a) 及び (b) はそれぞれ、$f(v_x,v_y,t_0=6R/c)$、$f(v_x,v_y,t_{max}=60R/c)$ をプ

ロットしたものである。図3(a)は接触初期のデータであるが、v_yが正と負の領域に大きなピークが一つずつ見られる。これは、壁方向に進行する質点群と、反射波として帰ってきた質点群の二つが混在しているためと考えられる。また、図3(b)は円盤重心の振動がほとんど緩和した状態の時の速度分布関数を表しているが、ここでは速度分布関数はガウシアン型になることがわかった。実際$f(v_x, 0, t_{max})$は分散0.02のガウシアンでフィットできることがわかっている。

更に求めた速度分布関数を用いてシャノンエントロピーの時間発展を計算する。シャノンエントロピー$S(t)$は$S(t) \equiv -\sum_x \sum_y \sum_{v_x} \sum_{v_y} f(x, y, v_x, v_y, t) \ln f(x, y, v_x, v_y, t)$で定義する。また、欠陥粒子の数を0個から15個まで変化させて、シャノンエントロピーの欠陥数依存性についても調べた。図4はシャノンエントロピーの時間発

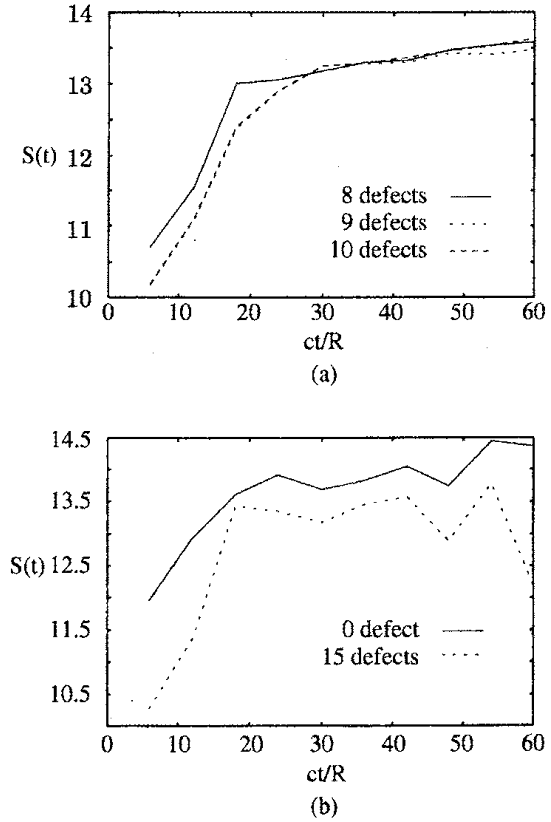


図4: シャノンエントロピーの時間発展。それぞれ導入した欠陥粒子の数が(a) 8から10個の場合と(b) 0個と15個の場合を示す。

展の様子を示している。図4(a)は欠陥粒子数が8個から10個のモデルを用いた場合であり、図4(b)は0個と15個の場合である。図4(a)によれば、欠陥粒子の数が8個から10個の場合のシャノンエントロピーは単調増加で、時刻$t = 30R/c$を過ぎるとほぼ同じ値13.5に近づく傾向が見られる。欠陥粒子の数がこれより少なかったり、多かったりするとシャノンエントロピーは単調増加の傾向を示さな

い。図 4(b) は欠陥粒子の数が０個及び１５個の場合のシャノンエントロピーを示している。欠陥粒子が０個の場合は、欠陥粒子による弾性波の散乱の効果がないためなかなか最大値に達せず、しかも単調増加の傾向を示さない。欠陥粒子が１５個の場合は、モデル自体の強度が弱くなってしまい、モデルの一部に生じた変形が元に戻らないままグローバルな振動を続けてしまい、内部は平衡状態になかなか到達しない。これより、このモデルのサイズでは、Hertz の接触理論が予言する接触の平衡状態を実現するためには、欠陥粒子を８個から１０個導入する必要があるということがわかる。

4 低速衝突のシミュレーション

最後に弾性円盤を低速で弾性壁に正面衝突させて、衝突速度とはねかえり係数の関係を調べる。この場合、式 (3) に初期速度 v を $v = 1.0\times10^{-3}c$ から $v = 1.0\times10^{-2}c$ の範囲で与えて、外場がない状態で運動方程式を解くことになる。このシミュレーションでは弾性壁のサイズを縦 R、幅 $4R$ に設定した。

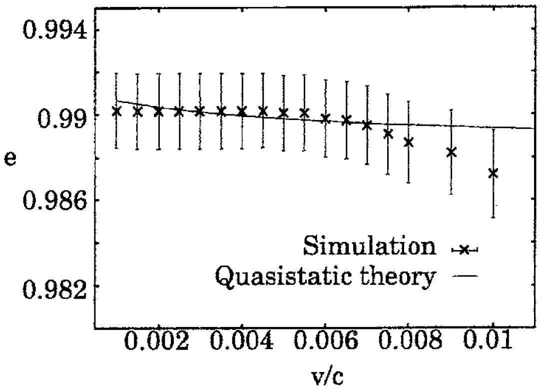


図 5: 衝突速度とはねかえり係数の関係。実線は準静理論による結果。

図 5 は、１次元音速 c でスケールした衝突速度 v/c とはねかえり係数 e の関係を示している。このシミュレーションにおいても、質点の配置を変えた１０種類の円盤を用いて得られたデータを平均しており、×印は平均値、エラーバーは標準偏差を表している。この図からわかるように、はねかえり係数 e は衝突速度 $v/c = 7.0\times10^{-3}$ 程度までの範囲ではわずかに減少するのみだが、それ以上の速度範囲では急に減少し始めることがわかる。

このシミュレーションデータを低速衝突の準静理論 [7, 8] の２次元版と比較してみる。これは衝突時間中に弾性体が受ける力を Hertz の接触理論由来の弾性力と、内部粘性由来の散逸力の和で表現し、弾性体の歪みの時間発展方程式を解くことにより、はねかえり係数を計算するというものである。２次元準静理論によれば、

円盤の歪みの時間発展方程式は次のようになる。

$$M\frac{d^2\delta}{dt^2} = -P - \tau_0 \frac{dP}{d\delta}\frac{d\delta}{dt}. \tag{5}$$

右辺第一項が弾性力で、第二項が散逸力である。第二項の τ_0 は散逸の時間スケールを表しており、フィッティングパラメータとして導入する。初期条件 $\delta = 0$、$d\delta/dt = v$ でこの方程式を解くと δ の時間変化を追うことができ、円盤の受ける力が 0 になる時の $d\delta/dt$ と v との比からはねかえり係数を計算することができる。

図 5 の実線は $\tau_0 = 0.011R/c$ の時に、式 (5) を解いて、v/c と e の関係を求めたものである。これより、適当なフィッティングパラメータを設定すれば、シミュレーションデータとの一致はかなりよいことがわかる。ただし、衝突速度が $v/c = 7.0\times10^{-3}$ よりも大きくなると、もはや準静理論とは一致しなくなる。高速衝突時に励起される様々な内部モードがこのような不一致を生じさせると考えられる。

5 まとめ

この講演では次のことを報告した。

1. 欠陥粒子を導入したばね一質点系の弾性体モデルを用いて、Hertz の接触理論に整合するようなハミルトンモデルを構築した。
2. 接触の平衡状態に至るまでのプロセスを特徴付けるために速度分布関数に基づいたシャノンエントロピーの時間発展を調べた。その結果、適当な数の欠陥粒子を導入することで、平衡状態に至るプロセスを確認することが可能であり、今のモデルサイズの場合は、８個から１０個の欠陥粒子が必要である。
3. 低速衝突における衝突速度とはねかえり係数の関係は、２次元の準静理論と良好な一致を見せるが、内部散逸の時間スケールをフィッティングパラメータとして導入することが必要であり、その値の起源はまだわかっていない。

参考文献

[1] O. R. Walton and R. L. Braun: J. Rheol. **30**, 949 (1986); L. Labous, A. D. Rosato, and R. N. Dave: Phys. Rev. E. **56**, 5717 (1997).

[2] M. Y. Louge and M. E. Adams: Phys. Rev. E. **65**, 343 (2003).

[3] H. Kuninaka and H. Hayakawa: J. Phys. Soc. Jpn. **72**, 1655 (2003).

[4] H. Kuninaka and H. Hayakawa: Phys. Rev. Lett. **93**, 154301(2004); see also Phys. Rev. Focus **14** (Oct 8, 2004) (http://focus.aps.org/story/v14/st14).

[5] H. Hayakawa and H. Kuninaka: Phase Transit. **77**, 889(2004).

[6] H. Hertz: J. Reine Angew. Math. **92**, 156 (1882); L. D. Landau and E. M. Lifshitz: Theory of Elasticity(2nd English ed.). Pergamon, 1960.

[7] F. Gerl and A. Zippelius: Phys. Rev. E **59**, 2361 (1999).

[8] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J.-M. Hertzsch, and T. Pöshel: Phys. Rev. E **53**, 5382 (1996);G. Kuwabara and K. Kono: Jpn. J. Appl. Phys. **26**, 1230 (1987).