粉体流シミュレーション： DEMの概要と問題点

早川尚男
京都大学大学院人間・環境学研究科, 606-8501 京都市左京区吉田二本松町

平成 13 年 12 月 8 日

1 はじめに

DEM((離散要素法) は Cundall[1] によって提唱された粉体の粒子シミュレーション法である.[1] 1990 年頃には物理学者に再発見されて, 今や粉体研究には欠かせない手法となった. DEM が急速に普及した背景には幾つかの要因が考えられる. まずはその汎用性である. Cundall 自身は岩盤力学の研究者であったが, 粉体そのものは薬学、土壌工学、土木、機械工学 (微粒子の輸送)、化学工学、天文 (小惑星や塵)、気象、農学等の広い分野で普遍的に現れる物質である. DEM の出現以前は実験以外では理想化された状況での解析的理論や有限要素法等の静的な連続体をベースにしたシミュレーションしか行われていなかった. 一方で粉体はそもそも滑べり、破壊、離合、集散を繰り返す物質であるだけに静的な性質はともかくとして動的な側面は従来の手法は無力であり, 流体力学や構成方程式に基づくレオロジーとは全く異なる手法が必要とされていた. 一方でコンピューターが普及し CPU パワーも急速に増大し, DEM の普及を後押しする形となった. DEM の出現によって従来、実験で観測する他なかった現象の様々をコンピューター上で再現でき、解析を進める事が出来る様になったのは粉体を扱う多彩な分野に属する人にとっては驚くべきことであり多くの研究論文を生むきっかけとなった. また実験に伴う塵芥の処理を離れてコンピューター上で遊びから思いがけない発見がもたらされることで、従来考えられなかった理論物理の研究者の大量の参入も促している. 数年前には DEM によってリアルスケールのシミュレーションが可能になり理論は一切不要になったと主張した研究者もいた程であった.

この様に粉体研究のおいて DEM の果たした役割は大きい. 粉体の理論研究において過去の最大の発見としても言いすぎではない. しかしながら同時に問題点も多い. まず DEM の立場が不明瞭である点が挙げられる. モデルに含まれる多種のパラメーターを決定する事ができないという意味ではミクロなモデルとはなり得ず, 一方でシミュレーションの結果の理論解析は出来ないという意味でマクロな現象論モデルの利点を失っている. また現

[1] Cundall は distinct element method と呼んだが, dicrete element method という呼び名の方が普及している. 場合によっては非連続体的手法の総称として discrete element method(離散要素法) を用い、Cundall によって導入されここで紹介するものを distinct element method(個別要素法) と区別する場合もある。ここでは distinct element method に離散要素法という訳語をつけて用いるという立場に立つ. 尚, 物理の分野では soft core の molecular dynamics と呼ぶ研究者が多い.

状では 10^6 個程度しかシミュレーションできないという粒子数の制約があり, 接触の機会が多ければ多い程計算スピードが遅くなるという問題点も指摘される様になった. こうした制約は産業界からの過度の期待と失望という形で現れた. 実際の工場等の制御には DEM はそのままでは使えないのである.

本稿はこうした DEM の概要と問題点をまとめる小文である. 基本的に筆者が過去に書いたもの [2, 3] と比べて新しい内容が付け加わっている訳ではない. 本稿での内容は静電気との直接の対応はなく、その辺りの解説は他の解説に譲り DEM の概要と問題点を私的視点に基づきまとめる. またやや詳しく 2 体衝突について解説したので併せて参考にされたい.

2 DEM の概略

物理学が通常の意味で要素還元論を指向するのであれば粉体のミクロなモデルというものを設定しなければならない．その場合どこまで遡って考えるかということについては基本的合意がない．最も単純に考えれば，粉体の構成要素はひとつひとつの粉体粒子であり，それらの集団が粉体ということになるが，粒子の散逸性や相互作用をきちんと議論しようとすると，よりミクロなレベルにまで遡った議論が必要となる．ところが，現在まで散逸の起源について研究は始まったばかりでその理解については混乱している．つまり並進と回転の自由度以外の内部振動に伴う自由度の分配や気体への熱伝導などについて何もわかっていない．このことが後述する様に散逸の強度を決める際の不定性をもたらす．今後，この方面の基礎的な研究が発展していくと思われるが，ここではひとまずそれはおいておいて，粉体要素の力学的基礎とされる事実をまとめ，その事実を巧みに採り入れた離散要素法について紹介しよう [4]．

現実の粉体の相互作用は複雑であるが，最も単純には接触した際に斥力のみが働くと考えればよい．準静的な粒子接触では弾性体と見做し得ると期待される，この際にどのような力が働くかについては前世紀から詳細な研究がある．最も有名なものはヘルツ (Hertz) [5] による固体接触の理論であり，大抵の弾性論の教科書には詳細に記述されてある [6]．ここで簡単にその結果を紹介しよう．まず 3 次元の球同士の接触を考える．両物体の圧縮力の合力を F_n とすると両物体は変形し，接触面は半径 b の円となる．その半径 a 及び接触領域の距離 δ_n は接触粉体粒子の半径 R, R' を用いて

$$a = F_n^{1/3}\left(D\frac{aa'}{R+R'}\right)^{1/3} : \quad \delta_n = F_n^{2/3}\left[D^2(\frac{1}{R}+\frac{1}{R'})\right]^{1/3} \tag{1}$$

で与えられる．ここで

$$D = \frac{3}{4}(\frac{1-\sigma_0^2}{E}+\frac{1-\sigma_0'^2}{E'}) \tag{2}$$

であり，σ_0, E はポアソン比，ヤング率と呼ばれる基本定数となっている[2] ．ここで注目すべきは変形 δ_n と力 F は $F \propto \delta_n^{3/2}$ という関係式で結ばれていることである．この関係は線

[2] ヤング率は単軸の引っ張りあるいは圧縮に対する応力と歪みの比例定数．ポアソン比は単軸の引っ張りを行なった場合の垂直変位 (縮み) と軸方向の延びの比．

形ばねによる変形と力の比例関係とは異なる．この結果は勿論次元に依存したものであり，２次元的な物体，即ち円筒であれば線形ばねの結果に対数補正の入った形になっている．

次に接線方向に働く弾性力についてもミンドリン (Mindlin)[7] によって詳しく論じられている．ここで δ_t を粉体が接触したときからの接線方向の変位とすると先に出てきた接触円の半径 a を用いて

$$F_t = 4a\delta_t\left(\frac{(2-\sigma_0)(1+\sigma_0)}{E} + \frac{(2-\sigma_0')(1+\sigma_0')}{E'}\right)^{-1} \tag{3}$$

で与えられる．(3) 式における $a \sim F_n^{1/3} \sim \delta_n^{1/2}$ という関係式から接線方向に働く力は $F_t \sim \delta_t\delta_n^{1/2}$ という関係を満たす．この力は接線方向のずりに対する復元力であるので静止摩擦の表現ともみなすことも可能である[3] ．しかし，「粉体」全体としてのマクロな静止摩擦には，こうした素子レベルの力の他に粒子相互の配置状態 (充填状態) が効いてくることを注意しておく．

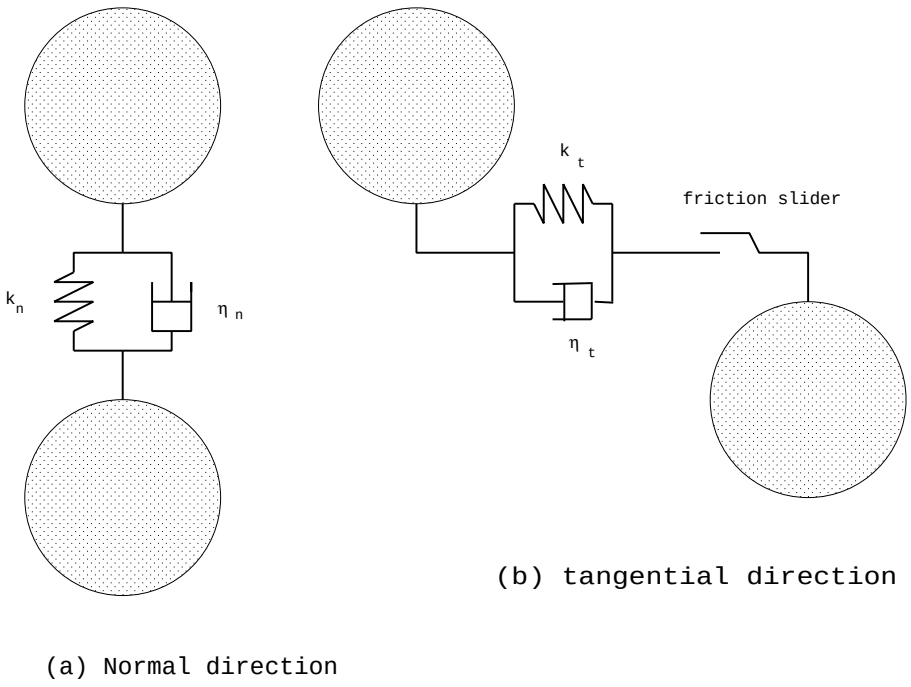

図 1: 粒子間相互作用を表す Voigt model

上記の弾性反発力 (図 1 のばね) だけであれば当然エネルギーは保存する. しかし粉体の特徴はその粒子内部にある巨視的自由度にあり、並進や回転等の観測可能な自由度以外のエネルギー自由度への分配である散逸がある. DEM ではその効果を採り入れるために図 1 のダッシュポットで特徴づけられる散逸力を導入する．この散逸力は法線方向には相対速度に比例する摩擦を用い，接線方向には低速時にはやはり相対速度に比例した摩擦，また高速時に動摩擦係数 μ に対して $F_t = \mu F_n$ に達するとスリップするというクーロン (Coulomb) 摩擦 (図 1 のスライダー) を用いる．ここの動摩擦係数や粘性係数の導入は「粉体」のマク

[3] 通常の離散要素法においては，静止摩擦は省略されることも多く，この項が唯一静止摩擦に相当する役割を果たしている．

ロな物性を素子レベルにも持たせたことになっており，こうした散逸の起源は不問としている．この様な接触力のモデル化は連続体のレオロジーの分野ではよく知られており, 粉体のシミュレーションでは素子レベルにそのレオロジーモデルの一つであるフォークトモデル (Voigt model) を採用したことになる.

通常，粒子同士が衝突した際のトルクを考慮して回転の効果も採り入れる．今までの説明では 2 体問題しか考えていなかったが，この 2 体力を基にして多体問題のシミュレーションを行なったのが離散要素法である [1]．即ち，離散要素法では並進と回転の自由度のみを残し，残りの自由度を散逸等としてモデルのパラメータに押し込めてしまうのである．離散要素法では上記の弾性力，粘性力，回転をそれぞれ素子の持つばね，ダッシュポット，スライダー[4] というものに読み替え，個々の粒子をそれぞれの部品を持った機械のように扱うのである．全ての粒子の粒径が d, 質量 m, 慣性モーメントが I である場合に粒子の運動方程式は

$$\begin{aligned} m\ddot{\mathbf{x}}_i &= \sum_{<i,j>} \theta(d-|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|)(\tilde{\mathbf{F}}_n^{ij}+\tilde{\mathbf{F}}_t^{ij}) \\ I\dot{\omega}_i &= \frac{d}{2}\sum_{i,j}\theta(d-|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|)(\mathbf{n}\times\tilde{\mathbf{F}}_t^{ij}) \end{aligned} \tag{4}$$

ここで $\mathbf{x}_i$,ω_i は粒子 i の位置と角速度であり，和は接触粒子対に対して取り，$\theta(x)$ はステップ関数，即ち $x>0$ に対して $\theta(x)=1$，$x<0$ に対しては $\theta(x)=0$ であるとする．また $\mathbf{n}$, $\mathbf{t}$ をそれぞれ接触粒子対の中心を結ぶ線に対して法線方向の単位ベクトル，接線方向の単位ベクトルとし，$\tilde{\mathbf{F}}_n^{ij}, \tilde{\mathbf{F}}_t^{ij}$ はそれぞれ

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{F}}_n^{ij} &= \mathbf{F}_n^{ij} - \eta_n \mathbf{n}\mathbf{n}\cdot(\dot{\mathbf{x}}_i-\dot{\mathbf{x}}_j) \\ \tilde{\mathbf{F}}_t^{ij} &= \begin{cases} \mathbf{F}_{t,nsl}^{ij} & (|\mathbf{F}_{t,nsl}{}^{ij}| < \mu\tilde{\mathbf{F}}_n^{ij} \text{ の場合 }) \\ \mu\tilde{\mathbf{F}}_n^{ij} & (\text{それ以外}) \end{cases} \\ \mathbf{F}_{t,nsl}^{ij} &= \mathbf{F}_t^{ij} - \eta_t \mathbf{t}[\mathbf{t}\cdot(\dot{\mathbf{x}}_i-\dot{\mathbf{x}}_j)+\frac{d}{2}(\omega_i+\omega_j)] \end{aligned} \tag{5}$$

で与えられる．ここで $\mathbf{F}_n^{ij}, \mathbf{F}_t^{ij}$ は (1),(3) 式に現れる $\mathbf{F}_n, \mathbf{F}_t$ の接触粒子の i,j のペアに対するものである．こうして式が与えれれば原理的に粒子運動のシミュレーションが可能である.

(5) 式には多くのパラメーターが含まれているが、そのパラメータをうまく設定すれば驚くほど定量的に実験を再現できる．また本末転倒かもしれないが離散要素法に合わせた実験の設定というのも考えられる [8]．この場合の実験結果は定量的に離散要素法の結果と一致しており，離散要素法の正当性を支持した格好になっている．

例えばパラメータを更に減らしたモデル，例えば非弾性散乱をするハードコア剛体球などを使うともっとすっきりするのではという疑問も湧くであろう．実際，多くの物理学者はその単純性故に非弾性剛体球 (円盤) のシミュレーションを行なっているが，直ちにその計算が発散することに気がついた．即ち衝突の度に運動エネルギーを失い，遂には常に

[4] ダッシュポットというのは図にあるように空気鉄砲みたいなものである．これは速度に比例する摩擦を表す機械だと思って構わない．並列に結合しているということは力が加算的であることを意味する．スライダーはクーロン摩擦を意味する．クーロン摩擦が働いた状態では回路は切断されて他の力が働かずに滑べっていくことを表現している．慣れないとわかりにくい表記であるが，考えてみるとよく出来た表記である．

接触している状態になるのであるがハードコアモデルではそこで無限大の力が働くために発散が生じるのである．後述の様にこの発散を非弾性コラプス(inelastic collapse)として議論しようとしているが，むしろ接触力のモデル化が不適当なのである.

尚，離散要素法用の Fortran77 のプログラムは文献 [9] で公開されている．しかしながら印刷ミスなどが多く，説明も混乱しているのでわかりにくいであろう．また粘着力などを導入して離散要素法を拡張し，当初の目的通りに地震に伴う地盤の崩壊や土石流などのシミュレーションに適用した例が文献 [10] に見られる.

3 DEMの問題点

このように大きな成功を収めて来た DEM であるが, 現象論モデルであるが故の限界と問題点も数多く指摘されるようになってきた. 既に述べてきた様に (5) 式には含まれるパラメーター, 例えば粘性係数 η_n,η_t, の決定をどうすればいいのかよく分かっていない．先に紹介した阪口等 [8] のパラメーターチューニングは職人技であり一般性はない. 法線方向の接触力を例にしてこの事情を説明しよう．Cundall を始めとして多くの離散要素法 [1, 11] では (1) の 2 つの式において $F/\delta_n = a/D$ という関係式から a/D を定数と見做し (実際には右辺が δ_n に依存する), その線形化された方程式の臨界減衰値 (振動から減衰に変移する点) を選んだ．勿論これは計算の便宜のためであり根拠のないことである．実際，実験や理論から反発係数は粒子衝突の相対速度に依存するばかりでなく粒子の大きさや形状、表面の様子にも依存することが知られている [12, 13]．例えば Hertz の接触理論と整合するように準静的な接触を解析すると η_n は $\eta_n \sim \delta_n^{1/2}$ のように変形 δ_n に依存するということが期待されている.[14, 15, 16] しかしこうした効果を採り入れた DEM は殆んどなくまたそうした議論はどの程度信頼がおけるのか, 粒子集団における定量的な影響はどうかという研究は少ない. 今後この種の粘性パラメータはよりミクロな物理的考察から決められるであろう．他のパラメータの決定はもっと深刻である．動摩擦係数などはマクロな実験から推定して決めているのが現状である．例えば摩擦係数は内部摩擦角と関係しているが素子の内部摩擦角と実験で観測できるマクロな摩擦角の関係はよく分かっていない. 従って DEM 粒子のシミュレーションを行いながらパラメーターを決めていくことになるが多数のパラメーターのそれぞれの寄与がどのように結果に影響を与えるのかが分からないのでこの様な手法にどれだけの意味があるのかは分からない.

実際のところは弾性パラメーターですら本当に信頼していいのかどうかは分からない. 実際湯ら [17] は離散要素法でのヤング率などのパラメータ設定で物質から決まる値からずれた値 (ヤング率の場合は小さい値) を用いた方が現実的な振舞をすることを報告している．このずれは粉体粒子が教科書に出て来るような線形弾性体で構成された球から逸脱したものであることに由来している. また回転の運動方程式を (4) の第 2 式で記述できるとしているが，回転に伴う摩擦が考慮されておらず実際の粒子回転を特徴づけたものとはなっていない．実際，この回転モデルでは粒子が転がり過ぎる. 従って弾性ヒステリシス損失と呼ばれる弾性体の変形に伴う回転摩擦が重要であり [18], その効果を考慮した離散要素法のシミュレーションがより現実的な振舞をする [19]. 例えば砂山を平らな面上に積み上げようとするならば適正な回転摩擦を考慮しないといけないという指摘がされている.[20] また

局所的に平らな接触面を導入すると完全な球形とは全く異なった結果が出るという報告もある.[21] [5] 筆者自身の経験からしても接触力のモデル化は不十分であり, ちょっとしたパラメータの値を変更することで結果は大きく変わってしまう、という印象がある. 従って常に粒子同士が接触している問題に離散要素法を適用し、その結果を現実的なものと見做すのには問題がある. また現実の粒子をシミュレートしようとする場合には形状の問題が重要になってくる. 例えばやや細長い粒子をシミュレートするには楕円要素或はその 3 次元版を用いることはよく行なわれる [22] . しかし接触の判定が複雑になる上に楕円にしたところで表面の突起やラフネスは解決されていないことには注意しなければならない. またこうやってモデルを現実に近づけようとする程複雑なモデルとなり現状ではよくわかっていない接触弾性論や接触力学を研究する必要に迫られる.

以上の様に考えると離散要素法にはかなり問題があるのがわかる. この手法はある程度弾性論に基づく正当化はあるものの既に述べた様に多くの根本的問題を含んでいる .

モデルの基礎ばかりでなく , 離散要素法の適用限界についてもやはり認識しておく必要がある . 特に想定対象は必ずしも離散要素法で仮定されたような理想的な状況にはなく , また全ての状況に応じたシミュレーションは不可能であることを注意しておく . 即ち , 実験では粒子は通常 , 球ではなく粒径も分散しており , 空気や水などの介在物の影響や , 次元性や粒子数なども異なる場合があり必ずしも実験とシミュレーションの状況が対応しているとは言い難いからである . 特に粒子数の問題は実際の問題に応用するときは深刻である . 数万個の粒子ではせいぜいスプーン一杯の粉体であり , この小量の粒子の挙動から実際の工場などでの粉体粒子の挙動を予想することは難しい .

また経験上 DEM のシミュレーションが有効な場合とあまり有効でない場合があることが知られている. 大雑把に言って接触時間が短い状態で全体として粒子集団が流れているような場合のシミュレーションには DEM は有効だが, 殆んど静止し摩擦力, 接触力が重要になる現象では接触力の再モデル化が必要となり DEM を使用することに注意が必要である. また衝突や接触が極く稀にしか起こらない現象では DEM より効率のいい計算法は多々存在する. 例えばそれほど希薄でなくても同時の多体接触が問題にならない程度の濃度であれば非弾性 Boltzmann-Enskog 方程式の方が効率が良い事が知られている.[23] 非弾性の Boltzmann-Enskog 方程式は理論解析にも適しているので今後そちらの方向での発展が見込まれる. また更に希薄であれば Boltzmann 方程式の他にモンテカルロ的な手法も期待できる. 特に気体との混相系で希薄な高速流動層では田中等の直接モンテカルロ法が大きな成功を収めている.[24] 更にセルオートマトン等を用いたより高速なアルゴリズムも提唱されているが現状では格子モデルの欠点である速度変化をうまく記述できない点を解決していない様に思える.

このようにユーザーの立場では DEM を使う上での適用限界と同時に DEM の得意とするものを認識しておく必要がある. 一方 DEM を基礎づけようとする研究者の立場では DEM で導入された接触力の理論化の問題を解決しパラメーターを減らす必要がある. またマクロな粒子集団の特徴づけに興味がある理論指向の研究者の場合は非弾性 Boltzmann-Enskog 方程式等を用いた系統的な研究が必要となる. 新しいアルゴリズムの開発をする立場であ

[5] もともと Cundall は多角形のシミュレーションをしていたが接触判定の困難さから円形要素を導入し、それが普及した. 文献 [21] 等の研究は一種の先祖帰りであるが不可避的なものなのかもしれない.

れば汎用性を目指すよりも現象毎にモデルを作り分ける方が有効であろう.

4　2 体非弾性衝突について

ここで本稿を閉じてもいいのだが, DEM のモデル化と絡んでいる問題として 2 体の非弾性衝突と散逸の起源についてもう少し考察を加えてみよう.

高校の物理では必ず非弾性衝突や摩擦を学習する事になっている。非弾性衝突は、粒子衝突前の相対速度 v_i と衝突後の相対速度 v_r の比で定義されるはねかえり係数

$$e = -\frac{v_r}{v_i} \tag{6}$$

が物質定数であり、衝突速度に依らないと習う。[6] 一方、摩擦でも似たような状況であり、動摩擦は最大静止摩擦より小さく、移動速度に依存しないと習う。摩擦がそんな単純なものではない事は近年よく認識されるようになってきた。同様に非弾性衝突も一般には単純ではなく、とてもはねかえり係数一定という一言ではまとめられない。むしろ、はねかえり係数が衝突速度に依存するというのは常識として受け取られており [12, 25, 26, 27]、教育と実際の乖離が問題になる程である。

非弾性衝突は並進の運動エネルギーを内部の自由度への受渡しによって起こる。より詳しく言えば衝突に関連して並進の運動自由度が一旦内部運動の自由度に受け渡されて、その全てが再び並進自由度に戻りきらないという現象である。

一般に衝突は非弾性である。低分子系でも内部自由度は様々存在し、衝突の痕跡を残さない事は考えられない。例えば 1 原子系でも電子状態が衝突によって励起されるという事はありがちである。そうした励起は化学反応を伴った状態変化を起こすことも珍しくない。また極端に高エネルギーであれば核反応も考えられる。しかしここで考えたいのはむしろ低エネルギー衝突であり、化学反応等もなく塑性変形もなるべく排除した系である。必然的に理想化された衝突は弾性体間の衝突となる。弾性体の衝突でも衝突に伴う音波放射は排除して考えよう。これは真空中の衝突を考えれば消去できる。

無視できないのは衝突に伴う弾性変形と熱の移動である。また高分子材料では内部運動に伴う摩擦は本質的に除去できない。準静的に起きた圧縮変形ば弾性体の接触が終ったときに残留歪みが残らないが、有限の速度で衝突及び圧縮変形が生じると全ての残留歪みは開放されない。一方、熱そのものが捉えがたい概念であるが弾性変形以外の諸々の変形要素を熱として表現することは必要である。そうでないと後述の様に接触を終えた弾性体の平衡状態への緩和はいつまでも起こらない。更に緩和メカニズムの欠如のせいか、弾性論そのものとの相性も良くない。いずれにしても現状で何が分かって何が解決すべきなのかをまとめるのも悪くない時期であると思われる。

これらのうちで最も簡単なものは弾性変形のストレステンソルと同じ形の粘性ストレステンソルが存在するとするものである.[6] その理論では局所変形速度 $\dot{\mathbf{u}}$ が弾性変形場 $\mathbf{u}_{el}$ と $\dot{\mathbf{u}} \simeq \dot{\xi}(\partial \mathbf{u}_{el}/\partial \xi)$ という関係で結ばれると仮定する. ここで ξ はマクロな変形であり例えば弾性球の変形に伴う中心間距離に対応する. Hertz の接触理論によれば弾性変形に伴う反発

[6] (6) でマイナスがついているのは衝突前後で相対運動の方向が変わる事を考慮している。

力は $\xi^{3/2}$ に比例するのであるから次元解析的にも $\sqrt{\xi}\dot{\xi}$ に比例する粘性力の存在が期待できる. 従って質量 m の等球の衝突では

$$m\ddot{\xi} + \frac{2E}{3(1-\sigma_0)}\left(\xi^{3/2} + A\sqrt{\xi}\dot{\xi}\right) = 0 \tag{7}$$

という運動方程式に従うことが期待される. ここで A はこの理論の枠内で決まらない定数である.[14, 15] (7) 式と教科書にあるように [6] 接触時間が無散逸でも衝突速度 v_i に対して $v_i^{1/5}$ に比例することを考慮するとはねかえり係数 e は衝突速度 v_i に対して $1-e \sim v_i^{1/5}$ という関係が成り立つことが予言されている [28]. これが準静的理論の概要である. やがて Morogado と Oppenheim[16] によっても等温環境中の Langevin 方程式から速く変化するモードを消去することでも同様の結果が得られている. この結果は前節での DEM モデルでの粘性係数 η_n が変形 $\xi^{1/2}$ に比例することを示唆している. こうした理論の結果はまだ DEM の中に採り入れられていない.

またより低速では内部摩擦の効果よりも熱拡散に伴う散逸の方がより大きな効果を持つことが指摘されている [29]. しかし熱拡散の効果を系統的に調べた研究はなく, 今後の研究の発展が待たれるところである.

より高速の衝突では準静的なものに含まれない効果を考慮する必要がある. 例えば Gerl と Zippelius[30] は衝突によって等温弾性体中で様々な変形モードが励起されるという描像に基づき変形する円盤の振動モードの時間発展を調べた. 彼らのモデルでは衝突が有限時間で終わるために不可逆的に振動モードへの分配が生じ、結果としてはねかえり係数が衝突速度に依存して変化する. より最近の研究ではこのモデルは低速極限の衝突では Hertz の接触理論に緩和しないことが指摘された [29]. つまり弾性波的な自由度への分配だけでは平衡状態へ緩和しない. 従ってある程度速い衝突にのみに有効なモデルとなっている. [7]

更に高速で衝突すると物質の内部に不可逆的な欠陥や変形が生じる. こうした変形を塑性変形と呼ぶ. 塑性変形が生じた際のはねかえり係数は簡単な次元解析から $e \sim v_i^{-1/4}$ となることが知られている.[13] この式は図に示す様に実験と極めて良く一致する式となっている.

斜め衝突の場合にも接線方向にはねかえり係数を導入できる. 例えば板と弾性球の衝突では板への入射角が浅いと球と板の間に滑べりが生じ斜め衝突のはねかえり係数は接線速度と法線速度の比の 1 次関数で変化するが, 入射角がある程度大きいとほぼ一定の正の値を取る [31, 32]. この値がどうやって決まるかについては殆ど分かっていない. また板と球の衝突では鉛直衝突でも板の厚さに応じてはねかえり係数が変化することが知られている [33, 34]. これらの現象について現象論的解析はあるがミクロなモデルに基づき何がどのように作用することでこうした非弾性衝突の特性が決まって来るのかを考える時期に来ている. そうした基礎的研究がひいては DEM のパラメーターの決定という実利的な効果ももたらすのである.

[7] こうした問題は力学における可逆性と熱力学における不可逆性の関係を考えるいい例題となっている.

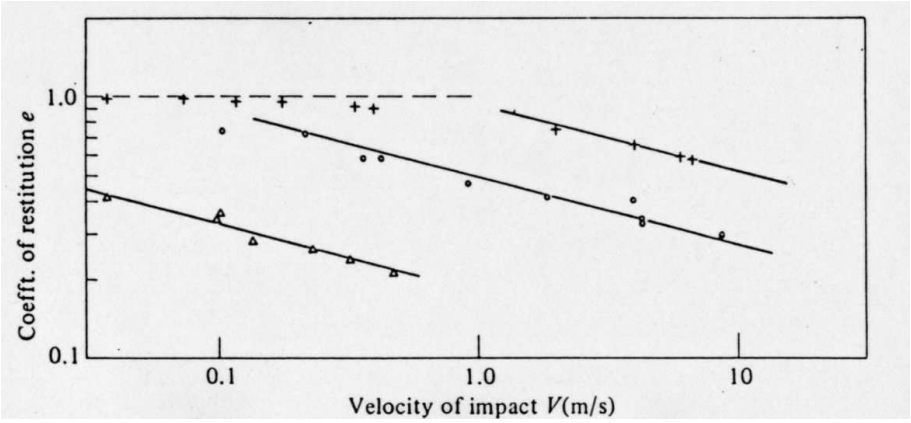

図 2: 3 次元系での塑性変形によるはねかえり係数の低下.[13] 直線は $e \sim v_i^{-1/4}$ を示す.

5 まとめ

既にここまでの解説で感じられたかもしれないが，DEM に基づく粉体のシミュレーションは半定量的にも実験と一致し得るレベルにある．従って工学的な問題ばかりでなく地球物理などにもある重要な題材をシミュレーションするという研究は一定の需要があり途絶えることはないであろう．しかし一方で，根拠の乏しいモデルに基づくシミュレーションの論文の洪水に飽きを感じているのも事実である．こうした状況は改善されるのだろうか．一方，粉体では粒子数も限られているのでここ 10 年程は少なくとも実験を制御しようとする立場では DEM があれべ理論は不必要であるという立場が前面に出たが果してそれでいいのであろうか．

物理学者の立場から粉体を多体問題として研究する場合に今後考えられる方向は大きく二分できる．一つは現象の多彩さをシミュレーションを通して追求しようとするものであり，もう一つは粉体をメタファーとして散逸系の動力学を研究しようとするものである．前者の立場は経験によって統一的に現れる現象と問題点が浮かび上がって来るので二つめの立場を取る場合にも簡単には切り捨てられない．また実際に地震や地盤の流動などの応用上非常に重要な問題の解析が不十分であり，発展も見込める．同時にスケールの異なるそうした現象が可能になるためには離散要素法を越える高速シミュレーターの開発も必要になる．例えば散逸の起源やその値の決定は未だにできていないことを思い出すべきである．また離散要素法を認めたとしても流体力学が絡んだ問題はまだ初歩的な扱いに留まっており方法論的な発展が見込める．散逸系の動力学のメタファーとして粉体物理を捉える場合には抽象的な議論に終始する危険性がある．この場合はおそらく非平衡定常状態の統計重率をどのように考えるべきかということ，線形非平衡の問題と同様に輸送係数などの法則をしっかり求めようということになるであろう．適切な問題設定に基づいたこうした研究はこれまでの所，殆んど見当たらない．従って充分に発展の見込める題材である．

工学の立場では離散要素法はある程度確立した手法であり, 粉体の動きを予測するのに

は必要な基礎教養となっている. このシミュレーション法は必ずしも高速のシミュレーターでなく、プログラミングも楽ではないので数値解析の立場ではより高速で、簡単なシミュレーターが必要とされるであろう. また何回となく強調していることであるが, 微視的に決定できないパラメータを決める処方箋が今後ますます必要になっていくに違いない. 特に原理的に決定可能なパラメータの最適値が必ずしも理論的な予測値と一致しない現状から接触力学の研究の成熟度が十分ではなく今後の発展が見込める事を示唆している.

参考文献

[1] P. A. Cundall & O. D. L. Strack, Geotechnique, **29**, 47 (1979). 元々は多角形に対して P.A. Cundall, Proc. Symp. Int. Soc. Rock Mech., Nancy **2**, No.8 中で離散シミュレーション法を発表している.

[2] 早川尚男、那須野悟、「粉体の物理」現代物理最前線 1 (共立出版, 2000) pp.49-115.

[3] 早川尚男, 「離散要素法について」 http://ace.phys.h.kyoto-u.ac.jp/ hisao/jpapers/dem.ps.gz.

[4] 田口善弘，物性研究 **61**, 1 (1993) がよくまとまっている.

[5] H. Hertz, J. Reine Angew. Math. **92**, 156 (1881).

[6] 例えば ランダウ = リフシッツ，弾性理論（佐藤常三訳，東京図書 1972(原著 1965)).

[7] R. D. Minlin, J. Appl.Mech. Trans. ASME **16**, 259 (1949): R. D. Minlin & H. Deresiewicz, J. Appl.Mech. Trans. ASME **20**, 327 (1953).

[8] 例えば，阪口 秀 他,1993 年度秋期研究発表会講演要旨集 p110; 湯 晋一, 林昭久，脇昌裕，梅景俊彦， 粉体工学会誌 **34**, 212 (1997).

[9] 粉体工学会編， 粉体シミュレーション入門 第 3 章 (産業図書 1998): 第 2 版ではプログラムの誤りが訂正されていると期待される.

[10] 泊野元彦，破壊のシミュレーションー拡張個別要素法で破壊を追うー (森北 1997).

[11] 粉体工学会編： 粉体シミュレーション入門 (産業図書 1998). 近々第 2 版が出る予定.

[12] W. Goldsmith, Impact: The Theory and Physical Behavior of Colliding Solids (Edward Arnold Publ. London, 1960)

[13] K. L. Johnson, Contact Mechanics. (Cambridge University Press, Cambridge, 1985).

[14] G. Kuwabara and K. Kono, Jpn. J. Appl. Phys. **26**, 1230 (1987).

[15] N. Brilliantov, F. Sphan, J.-M. Hertzsch and T. Pöschel, Phys. Rev. E **53**, 5382 (1996).

[16] W. A. Morgado and I. Oppenheim, Phys. Rev. E **55**, 1940 (1997).

[17] S. Yuu, T. Abe, T. Saitoh & T. Umekage, Advanced Powder Technol. **6**, No.4, 259 (1995).

[18] D. G. Flom and A. M. Bueche, *J. Appl. Phys.* **30**, 1723 (1959).

[19] 松本啓和, 下坂厚子, 日高重助, 1997 年度粉体工学会春季研究発表会講演論文集, 39 (1997).

[20] Y. Zhou, B. Wright, R. Yang, B. Xu, amd A. Yu, Physica A **269**, 536 (2001).

[21] H.-G. Matuttis, Granular Matter **1**, 83 (1998): A. Schinner, H.-G. Matuttis, T. Akiyama, J. Aoki, S. Takahashi, K. M. Aoki adn K.Kassner, in Powders and Grains 2001 edited by Y. Kishino (A.A. Balkema Publ., Lisse, 2001).

[22] 例えば坂口栄一郎, 川上昭太郎, 田村聡, 飛田布美子, 農業機械学会誌, **58** (4) 9 (1996)

[23] L. Popken and P. Cleary, J. Compt. Phys. **155**, 1(1999).

[24] 田中敏嗣, 混相流 **8**, 41, 140, 315 (1994) and references therein.

[25] See, for example, R. Sondergaard, K. Chaney, and C. E. Brennen, Transaction of the ASME, Journal of Applied Mechanics **57**, 694 (1990); K. D. Supulver, F. G. Bridges, and D. N. C. Lin, ICARUS **113**, 188 (1995).

[26] F. G. Bridges, A. Hatzes, and D.N.C. Lin, Nature **309**, 333 (1984).

[27] R. K. Adair, The Physics of Baseball 2nd Ed.(Happercollins Publ., 1994): R. アデア、中村和幸訳：ベースボールの物理学 (紀伊国屋書店, 1996).

[28] T. Schwager and T. Pöschel, Phys. Rev. E **57**, 650 (1998).

[29] H. Hayakawa and H. Kuninaka, Chem. Eng. Sci. (to be published). see http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/0106145.

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

[31] O. R. Walton, R. L. Braun: J. Rheol. **30**, 949(1986).

[32] L. Labous, A. D. Rosato, and R. N. Dave: Phys. Rev. E **56**, 5717 (1997).

[33] C. Zener, Phys. Rev. **59**, 669 (1941).

[34] R. Sondergaard, K. Chaney, and C. E. Brennen: J. of Appl. Mech., Trans. ASME **57**, 694 (1990).