DEMの概要と問題点

早川尚男

平成 13 年 7 月 2 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 年頃から物理学者にも再発見されて, 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, 流体力学やレオロジーとは全く異なる手法が必要とされていた. 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の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ぶ事によって新たな発見が日々あり、他分野の人にも研究をグラフィカルに紹介でき、その面白さ伝え得る様になった. その結果、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. 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

[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. 物理の分野では soft core の molecular dynamics と呼ぶ場合もある.

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．また本稿は茨城大の集中講義用に整理しているのであるが、更に静電気学会からの依頼原稿にも一部用いられる予定である．静電気との直接の対応は勿論ないが、粒子衝突によって仕事関数を越せば電磁波を取り出せる訳であるし、衝突によるエネルギーの授受によって物質側に自由電子の励起等も起こっておかしくはない．その辺りの解説は静電気学会の他の解説に譲るとして本稿ではDEMの概要と問題点を私的視点に基づきまとめる．

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．その際，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b及び接触領域の距離δ_nは接触粉体粒子の半径a, a'を用いて

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

で与えられる．ここで$D = \frac{3}{4}(\frac{1-\sigma_0^2}{E}+\frac{1-\sigma_0'^2}{E'})$であり，$\sigma_0, E$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．

[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．

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 b を用いて

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

で与えられる．$b \sim F_n^{1/3} \sim \delta_n^{1/2}$ 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．

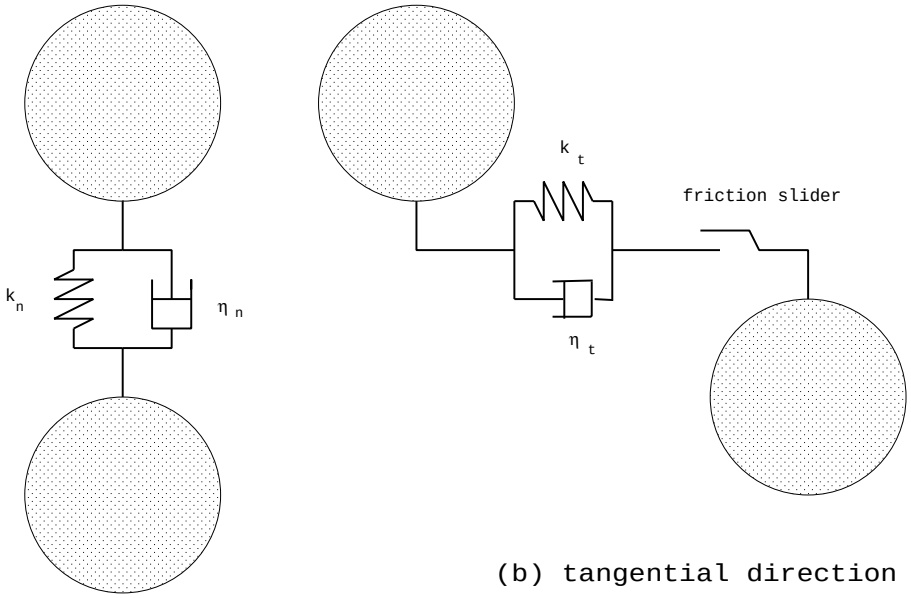

図 1: 粒子間相互作用を表す Voigt model

上記の弾性論の枠組の中で論じることが出来た弾性反発力 (図 1 のばね) の他に法線方向，接線方向に独立な粘性係数を持った散逸力 (図 1 のダッシュポット) が働く．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 friction slider) を用いる．ここの動摩擦係数の導入はある意味で「粉体」のマクロな物性を素子レベルにも持たせたことになっており，動摩擦の起源といった問題はここでも不問になる．いずれにしてもこの様な接触力のモデル化は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.

[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．

通常，その他に粒子同士が互いに剛体回転をすることも仮定する．今までの記述では 2 体問題しか考えていなかったが，この 2 体力を多体問題に適用しようという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．離散要素法は，元来，地盤の準静的な挙動の解析に用いられ，更に流体工学，機械工学，化学工学の分野に徐々に浸透し，物理の分野では 1990 年以降に盛んに用いられるようになってきた．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

$$\begin{aligned} m\ddot{\mathbf{x}}_i &= \sum_{<i,j>} \theta(d-|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|)(\tilde{\mathbf{F}}_n^{ij}+\tilde{\mathbf{F}}_t^{ij}) \\ I\dot{\omega}_i &= \frac{d}{2}\sum_{i,j}\theta(d-|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|)(\mathbf{n}\times\tilde{\mathbf{F}}_t^{ij}) \end{aligned} \tag{3}$$

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

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{F}}_n^{ij} &= \mathbf{F}_n^{ij}-\eta_n\mathbf{n}\mathbf{n}\cdot(\dot{\mathbf{x}}_i-\dot{\mathbf{x}}_j) \\ \tilde{\mathbf{F}}_t^{ij} &= \begin{cases} \mathbf{F}_{t,nsl}^{ij} & (|{\mathbf{F}_{t,nsl}}^{ij}|<\mu\tilde{\mathbf{F}}_n^{ij}\text{ の場合 }) \\ \mu\tilde{\mathbf{F}}_n^{ij} & (\text{それ以外}) \end{cases} \\ \mathbf{F}_{t,nsl}^{ij} &= \mathbf{F}_t^{ij}-\eta_t\mathbf{t}[\mathbf{t}\cdot(\dot{\mathbf{x}}_i-\dot{\mathbf{x}}_j)+\frac{d}{2}(\omega_i+\omega_j)] \end{aligned} \tag{4}$$

で与えられる．ここで $\mathbf{F}_n^{ij},\mathbf{F}_t^{ij}$ は (1),(2) 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．

次にこのモデルの問題点を指摘しよう．既に述べてきた様に (4) 式に現れる粘性係数 η_n,η_t の決定に任意性が残る．法線方向に限って事情を説明しよう．多くの離散要素法 [8, 1] では 2 体問題として捉え (1) の 2 つの式から $F/\delta_n=b/D$ という関係式を利用し，形式的に線形方程式とみなし (実際には右辺が δ_n に依存する) 臨界減衰値，即ち，振動から減衰に変移する点を選んだ．勿論これは根拠のないことである．一方，田中ら [9] は粘性係数が反発係数 e と関係がつく条件を求めてその値を採用した．これまた根拠はない．即ち，反発係数が一意的に決定されなければならない理由は何もないからである．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 [12]．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．少なくとも粘性パラメータは衝突速度に依存する量であり, 現在標準的に用いられているモデルはその点で失格である. 他のパラメータの決定はもっと深刻である．

[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．

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ろう．湯ら [10] 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．また剛体回転をモデルの中で用いているが，それも実はおかしい．現実には接触物体の変形に基づき反発力を決めているので完全な剛体の式を使うのはまずい筈である．実際，剛体回転では粒子が転がり過ぎることが経験的に知られている. 現実の転がり摩擦では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 [13], 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ことが知られている [14]. 例えば粉体表面に平らな面があるとして計算を行う場合と完全な球形では全く様相が異なる.[16] 更に砂山を平らな面上に積み上げようとするならば回転摩擦を考慮しないといけないという報告もある.[17] 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倣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 [15] . 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．従って現象論であることは間違いない．しかしその一方で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 [11] . 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．その意味では非常によく出来たモデルと言える．また離散要素法を越える様なモデルも現在の所存在しない．この手法に含まれる個々のプロセスは物理的にははっきりしているし，パラメータの設定もある程度は可能である．従って，粉体素子を記述する一つの粒子モデルに過ぎないが現時点では他に優れたモデルはないために特権的な立場を保っている.

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.

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．従って普遍性を持った更にマクロな現象論的なモデル化を指向することが応用上も重要になる．

尚，離散要素法用の Fortran77 のプログラムは文献 [18] 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 [19] に見られる.

3　2 次元シミュレーションの考え方

実際のシミュレーションは表示の問題や粒子数の問題等から 2 次元で行なわれる事が多い。 2 次元を 3 次元の球が 1 列に並んだ系と考えれば弾性論の議論はそのまま使えるが、球の粒子を 2 次元物体、即ち円筒と考えると弾性理論等は変更を受ける。例えば 2 体接触の Hertz 理論は等しい半径 r、弾性率 E、ポアソン比 σ_0 を持つ場合に

$$F_n = K_n(\delta_n)\delta_n : \quad K_n(\delta_n) = \frac{\pi E}{\ln(\frac{4\pi a E}{F_n}) - 1 - \sigma_0} \tag{5}$$

となることが知られている。但し接触域の長さ $2b$ は圧縮力 F_n を用いて

$$b^2 = \frac{4a(1-\sigma_0^2)}{\pi E} F_n \tag{6}$$

となる [6]。導出過程については文献 [20, 21] を参照のこと。また Mindlin 力についてはどうなるかは計算してみないとわからない。

2 次元をそのまま真面目に考えると上記の様に複雑になるが、(5) を線形弾性論に対数補正がついたと考えると話を単純化して捉えることが可能になる。つまり対数補正を無視して線形ばねで近似してもそれほど大きな違いがないという立場に立てるのである。線形弾性論を採用すると粒子の直径で長さをスケールするのが容易になり、 3 次元の場合の様に粒子半径毎に異なった現象になるという危惧をする必要がなくなるのも大きなメリットである。 2 次元の Mindlin 力も現時点ではパラメータとして扱ってもそれほど問題はないであろう。

3.1　粒子間の相対変位増分

ここでは下坂の説明 [18] にならって接触に伴う粒子の運動を追跡してみよう。いま図 2 のように粒子 i が時刻 t から $t + \Delta t$ の間に位置 A から位置 B に変位したとする。このときの変位増分の x 成分、y 成分をそれぞれ $\Delta u_i, \Delta v_i$ とし、回転変位増分を $\Delta\psi_i$ であるとする。

位置 $(x_i, y_i), (x_j, y_j)$ に中心を持つ粒子半径が r_i, r_j の 2 つの円粒子は

$$r_i + r_j \geq R_{ij} : \quad R_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \tag{7}$$

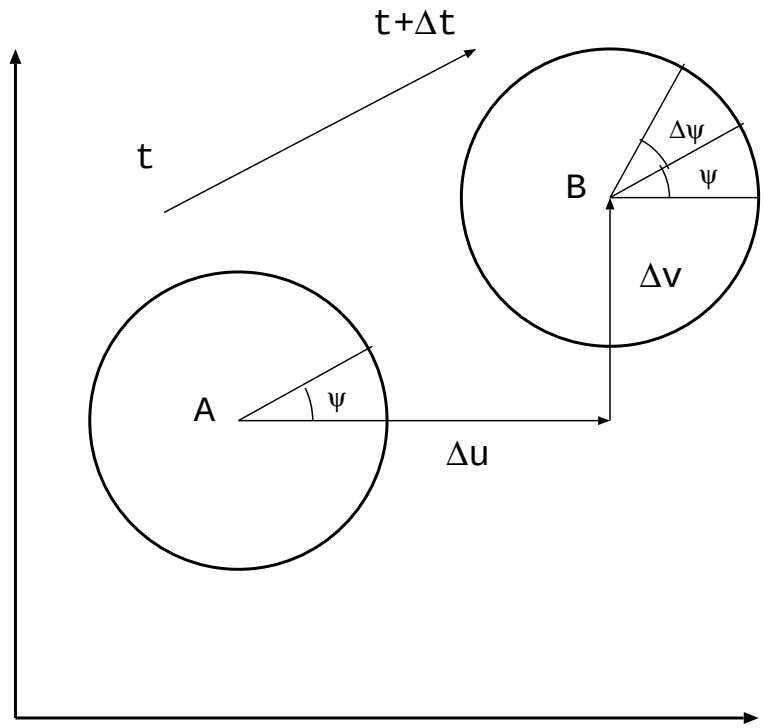

図 2: 着目粒子の変位増分. 粒子の添字 i は省略してある.

の条件で接触する。いうまでもなく R_{ij} は中心間距離である。また i,j 間の共通法線と x 軸とのなす角を α_{ij} とすると

$$\sin\alpha_{ij} = \frac{y_j - y_i}{R_{ij}} : \quad \cos\alpha_{ij} = \frac{x_j - x_i}{R_{ij}} \tag{8}$$

という関係がある。

ついで接触する 2 粒子 i,j の時間刻み Δt の間の相対変位量増分を共通法線に対する法線方向と接線 (せん断) 方向に分割して考える必要がある。x 軸と共通法線のなす角がわかっているのでその分回転させて

$$\begin{pmatrix} \Delta u_n \\ \Delta u_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha_{ij} & \sin\alpha_{ij} \\ -\sin\alpha_{ij} & \cos\alpha_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta u_i - \Delta u_j \\ \Delta v_i - \Delta v_j \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ r_i\Delta\psi_i + r_j\Delta\psi_j \end{pmatrix} \tag{9}$$

となる。右辺の第 1 項は主軸の回転によって相対変位増分を法線、接線方向に変換したことを表す。第 2 項は接線方向の相対変位が回転によってその間に増加することを表している[5] 。ここで Δu_n 等は図 3 にあるように i から j に向かう方向を正に取っている。

3.2 運動方程式の差分近似

接触力そのものは (4) 式で与えられている。これは法線方向、接線方向なのでプログラム上では x, y 成分に直して格納する必要がある。前節のような状況で j 粒子の i 粒子から受

[5] 共通法線を x 軸としてそれぞれ円盤を固定して一方だけ回転させて考えるとよい。

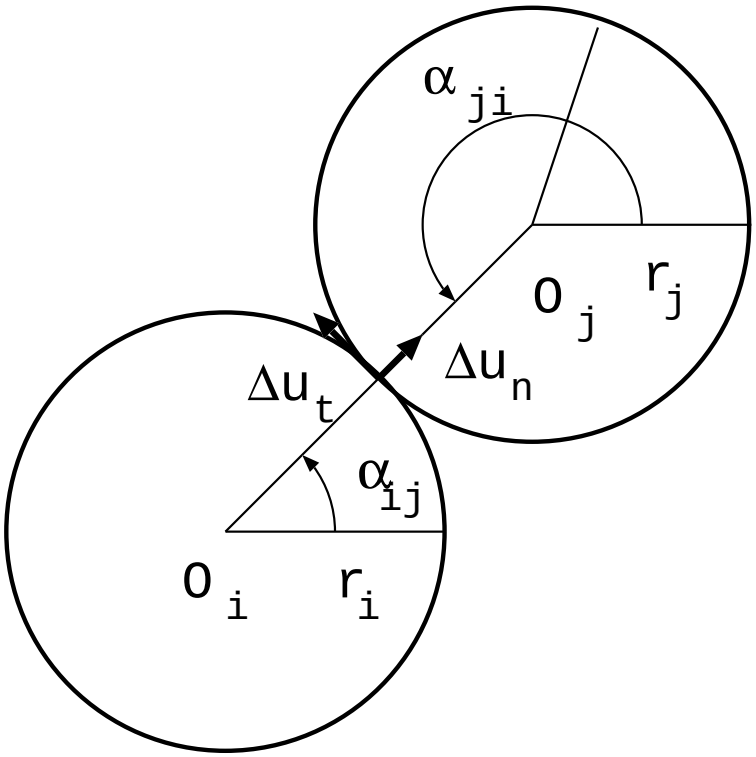

図 3: 2 粒子 i,j の接触. R_{ij} は O_i, O_j 間の距離. Δu_n, Δu_t はそれぞれ法線方向、接線方向の相対変位増分. $\alpha_{ji} = \alpha_{ij} + \pi$ に注意.

ける力の x, y 成分 X_j, Y_j 及び i 粒子の中心の回りのモーメント M_j は α_{ij} だけ逆回転すればいいので

$$\begin{pmatrix} X_j \\ Y_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha_{ij} & -\sin\alpha_{ij} \\ \sin\alpha_{ij} & \cos\alpha_{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_n^{i\to j} \\ F_t^{i\to j} \end{pmatrix} \tag{10}$$

及び

$$M_j = -r_j F_t^{i\to j} \tag{11}$$

となる。但し接線力と粒子回転の向きの設定が反対であり、$i \to j$ という添字は i から j に働くということを明示している。ここで $\alpha_{ji} = \alpha_{ij} + \pi$ (図 3) を考慮して $(\cos\alpha_{ij} = -\cos\alpha_{ji}, \sin\alpha_{ij} = -\sin\alpha_{ji})$ 接触している粒子の影響を足し合わせると

$$\begin{pmatrix} X_j \\ Y_j \end{pmatrix} = \sum_i \begin{pmatrix} -\cos\alpha_{ji} & \sin\alpha_{ji} \\ -\sin\alpha_{ji} & -\cos\alpha_{ji} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_n^{i\to j} \\ F_t^{i\to j} \end{pmatrix} \tag{12}$$

及び

$$M_j = -r_j \sum_i F_t^{i\to j} \tag{13}$$

となる。ここで (少なくとも私が) 混乱しがちなのは右辺を加速度と見るか力と見るかである。すなわち 2 体の和でかけるとした際に換算質量で規格化された加速度を加算したい

誘惑に駆られる。しかし言うまでもないことであるが右辺は式 (12),(13) にある通り力を加算する。つまり運動方程式はあくまで

$$m_j \frac{d\mathbf{v}_j}{dt} = \mathbf{F}_j + \sum_{i \neq j} \mathbf{F}_{i \to j} \tag{14}$$

である。回転についても同様である。特に回転の場合は 2 体の問題の際も相対的に考えるよりも考えている粒子を固定させ、その固定軸に回りに第 2 粒子の接触によって接線力が働いたと考えるべきである。そうしないと個々の回転軸が固定されないために運動方程式は複雑なものになる。

変位等の時間発展は上記の力とモーメントが求まったために容易に決められる。ここではプログラムにならって Δt^2 の精度を持つスキームに基づき説明する。

まずプログラム中では速度の更新をしている。すなわち

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_j(t+\Delta t) &= \mathbf{v}_j(t) + \frac{\Delta t}{2m_j}(3\mathbf{F}_j(t) - \mathbf{F}_j(t-\Delta t)) \\ \omega_j(t+\Delta t) &= \omega_j(t) + \frac{\Delta t}{2I_j}(3M_j(t) - M_j(t-\Delta t)) \end{aligned} \tag{15}$$

となる。ここで $\mathbf{F}_j = (X_j, Y_j)$、$m_j$,$I_j(= m_j r_j^2/2)$は各質量と慣性モーメントである。$\omega_j$ は(回転)角速度。このスキームが 2 次精度を保証していることは例えば $\frac{\Delta t}{2m_j}(3\mathbf{F}_j(t) - \mathbf{F}_j(t-\Delta t)) \simeq \Delta t \mathbf{F}_j(t)/m_j + \Delta t^2 \dot{\mathbf{F}}_j(t)/(2m_j) + \cdots$ と展開できることで分かる。

次に同じループの中で位置の更新をしている。このとき注意すべきは既に速度の方が更新を完了している点である。従って

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_j(t+\Delta t) &= \mathbf{r}_j(t) + \frac{\Delta t}{2}(\mathbf{v}_j(t+\Delta t) + \mathbf{v}_j(t)) \\ \psi_j(t+\Delta t) &= \psi_j(t) + \frac{\Delta t}{2}(\omega_j(t+\Delta t) + \omega_j(t)) \end{aligned} \tag{16}$$

となる。実際 $\frac{\Delta t}{2}(\mathbf{v}_j(t+\Delta t) + \mathbf{v}_j(t)) = \Delta t \mathbf{v}_j(t) + \frac{\Delta t^2}{2}\dot{\mathbf{v}}_j(t) + \cdots$ となっていることは容易に確かめられる。

4 実際のシミュレーション

4.1 スケーリング

前章で線形ばねモデルを採用したメリットの一つとしてスケーリングを使うことが出来る点を指摘した。即ち粒子直径等を 1 としてシミュレーションを行なえばスケール変換によって実際の状況に応じたシミュレーションに転換することは容易である。このことで粒子のサイズに応じた時間刻みを考える必要がなくなる。

実際には長さスケールは粒子直径 d (分散がある場合は例えば最大直径とみなす)、質量 m, 重力加速度 g を用いれば次元解析でどういうスケーリングを行なえば良いのかが分かる。例えば時間の次元は $\sqrt{d/g}$, 粘性パラメータ η_n, η_t は $\sqrt{g/d}$, (単位質量当たりの)ばね定数は g/d 等である。プログラム上ではこれらの量の比例定数、即ち無次元化された量しか現れない。

4.2 アルゴリズム

フローチャート (図 4.2) から計算の大筋が理解できるであろう. 図で initial と書いているのは初期設定一般である. そこでは初期粒子の位置設定, 物性値の設定, 接触力の初期化が必要となる.

図中の Main loop が実際に計算を実行する際の時間発展部分にあたる. そこではまず粒子のセルへの登録が必要となる. (無論、登録する前に登録情報を一旦クリアすることが必要となる.) 粒子間の接触判定の効率化のために粒子登録は欠かせず、そのサブルーチンの良否が計算スピードにそのままはねかえってくる. 著者は単純な正方セル法を用いており, 各セルに同時に 2 つの粒子中心が入らないセルサイズを選び各セルに格納された粒子番号を呼び出せる様にしておく. 一旦粒子登録が完了すると粒子と境界、或は粒子同士の接触判定は容易である. 実際各粒子に対して近傍粒子 (或は境界) は予め分かっているので相互の距離が接触距離より小さいかどうかだけを判定すればよい.

無論接触判定によって粒子間の接触があるとされた場合には実際に粒子に働く力を計算する必要がある. 粒子間の相互作用は作用・反作用の法則に従うことを利用して例えば粒子番号の大きい粒子についてのみ接触力の計算をすればよい. 更に粒子番号とは別に接触点番号を保存しておくと便利である. というのは各接触点毎に図 3 の様な状況を考えて接触力を考える必要があるからである.

より詳しい説明やプログラムソースに即した説明は文献 [3, 18] に譲りたい.

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，粉体のシミュレーションは簡単ではないにせよ可能であり，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，特に物理学者は理論のない，こうした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．従来の多体問題では桁違いの粒子数を議論しており，必然的に何らかの近似理論が必要になり，それに基づき物理的な諸概念が生じて来た．一方，粉体では粒子数も限られているので少なくとも実験を制御しようとする立場では概念は不必要であるとも言える．従って離散要素のモデル化に物理の入り込む余地はあっても後には物理は不必要であるとも言ってもよい．

粉体を物理の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シミュレーション法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

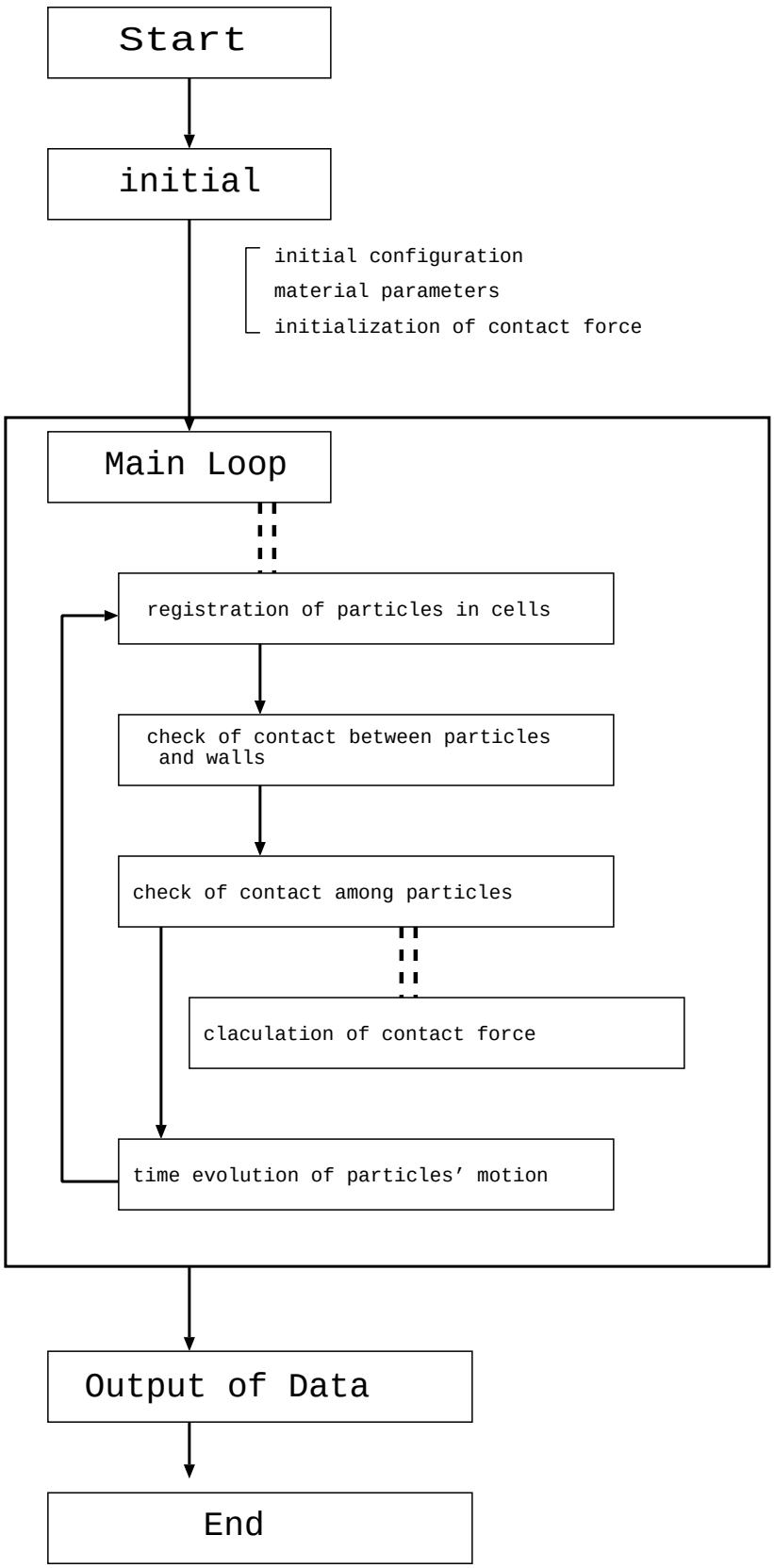

図 4: DEM 計算のフローチャート

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] ここでの記述は田口善弘，物性研究 **61**, 1 (1993).

[5] H. Hertz, J. Math. (Crelle J) **92**, (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)) の第 1 章§ 9.

[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] 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.

[9] 田中敏嗣，石井俊哉，辻裕，日本機械学会論文集 **57**, 456 (1991).

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

[11] 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).

[12] W.A. M. Morgado & I.Oppenheim, Physica A **246**, 547 (1997): see also S. Thomas and T. Pöschel,, Phys. Rev. E **57**, 650 (1998).

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

[14] 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)

[15] 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)

[16] 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).

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

[18] 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.

[19] 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)

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

[21] K. L. Johnson, Contact Mechanics (Cambridge Univ. Press, 1985).