

巨視的物体の非弾性衝突¹

中央大学 理工学部物理学科 國仲 寛人²

(2008年6月17日受理)

1 はじめに

我々の目に見える巨視的な物体の衝突現象は古くから物理学や工学等の分野に登場し、紀元前から現代に至るまで、様々なスケールで研究の対象となっている [1, 2, 3, 4]。このように衝突の問題が長い間研究の対象とされ、議論され続けているのは、我々の身の周りに衝突に絡んだ現象が溢れているからではないだろうか。例えば釘を打つ、楔を打ち込むといった行為はハンマーの衝突による撃力を利用したものであるし、野球やゴルフ等の球技はバットやクラブとボールとの衝突を利用したものである。更に我々の目の及ばない範囲においても、気体や液体等の流れはそれらを構成する原子・分子間の衝突が素過程となって引き起こされ、宇宙に無数に漂う小惑星は天体同士の衝突によって形成されたものと考えられている [5]。

また、近年ソフトマター物理の研究対象として盛んに研究されているものに、粉体 [6, 7, 8, 9, 10, 11, 12] がある。砂やガラスビーズ等の数 mm 程度のサイズの粒子集団を容器に入れて加振したり、傾けて流したり、垂直に立てた細いパイプ中に流すと液体等の他の流体とは異なった振る舞いを示すことが多くの実験やシミュレーションから知られている [13, 14, 15, 16]。そのような粉体の複雑な振る舞いも、局所的に見れば粉体粒子同士の衝突が連続して起こることで生み出されたものであると言える。

巨視的な物体同士の衝突は一般に「非弾性衝突」と呼ばれるが、それは衝突した2物体の運動エネルギーの和が衝突前の値と等しくならないということを意味している。衝突前後の運動エネルギーの差分は物体の変形や破壊、熱といった様々な形態で散逸するが、どのような散逸の形態が支配的になるかは物質の種類のみならず、衝突前の運動状態によっても大きく異なる。例えば同じ大きさを持つ2つの金属球同士を正面衝突させると、衝突速度が低速の時には球の内部摩擦が重要な散逸機構となるが、高速の時には塑性変形や破壊が主要な散逸機構となる。ではその中間の速度領域においてはどのような散逸機構が支配的になるかという、これは様々な散逸機構が混ざり合っていると考えられるので、どれが支配的かを特定することは難しい。この事が通常巨視的な物体の衝突後の運動状態の理論的予測を困難にする。

初等物理のテキストにおいては、こういった衝突時間中のエネルギー散逸の形態や過程を一切考えずに、「はねかえり係数」というパラメータでエネルギー散逸の度合いを表現する。例として、

¹本稿は、編集部の方から特にお願ひして執筆していただいた記事である。

²E-mail: kuninaka@phys.chuo-u.ac.jp

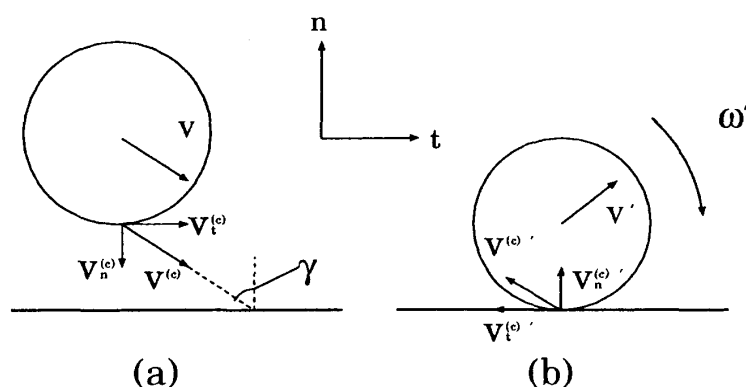


図 1: ボールが地面に斜め衝突する様子。(a) は衝突前、(b) は衝突が終わってボールと壁が離れる瞬間の様子を表している。

図 1 にボールが地面に斜めに衝突する様子を示した。簡単のため、衝突前後の速度ベクトル \mathbf{V} 、 \mathbf{V}' が地面に垂直な同一平面内にある場合を考えよう。地面の法線ベクトルを \mathbf{n} とすると、はねかえり係数はボールの衝突点の速度 $\mathbf{V}^{(c)}$ の衝突前後の法線成分 $V_n^{(c)}$ 、 $V_n^{(c)'}$ の比を用いて、

$$e_n = -\frac{V_n^{(c)'}}{V_n^{(c)}} \quad (1)$$

で定義される。後に導入する接線方向のはねかえり係数との対比から、 e_n を「法線方向のはねかえり係数」という名前でも呼ぶこともある。

多くの初等物理のテキストにおいてははねかえり係数は、「衝突速度等の衝突前の運動状態に依らず、物質の種類のみで決まる一定値である」として導入される [17]。だが、この記述は正しくはない。なぜなら、先に述べたようにエネルギー散逸の度合は、同じ物質でも衝突前の運動状態に強く依存して決まるものだからである。実際ほとんどの巨視的な物体同士が正面衝突した時のはねかえり係数は、衝突速度の上昇に対して単調に減少することが知られている [2, 3, 18, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30]。また、衝突角度によってもはねかえり係数は様々な値を取ることが知られており [31, 32, 33, 34]、初期回転に依存することも容易に想像できる³。

一方斜め衝突においては、法線方向のはねかえり係数だけでなく、接線方向のはねかえり係数も初期の運動状態に強く依存する物理量である。接線方向のはねかえり係数は、図 1 において、ボールの衝突点の速度 $\mathbf{V}^{(c)}$ の衝突前後の接線成分 $V_t^{(c)}$ 、 $V_t^{(c)'}$ の比を用いて、

$$e_t = -\frac{V_t^{(c)'}}{V_t^{(c)}} \quad (2)$$

で定義される。接線方向のはねかえり係数は衝突角度によって -1 から 1 の間で様々な値を取ることがわかっているが [35, 36, 37]、後に示すように衝突角度、法線方向のはねかえり係数、そして物体表面の摩擦係数を用いて現象論的に取り扱うことが可能である [38, 39, 40, 41, 42]。

³ ベーゴマで遊んだことがある人ならば、ベーゴマがごく短い接触時間の内に、回転自由度から並進自由度へエネルギーをやりとりする様子を何度も見ているはずである。

式(1)、(2)で定義した e_n や e_t のような非弾性衝突を特徴付ける物理パラメータの大きさは、衝突速度や衝突角度等の初期条件とどのような関係があるのだろうか？また、どのような散逸過程が支配的になって決まるのだろうか？この問いに対する答を模索する事は物理学や、物理教育にとっても重要であるが、工学の分野においても有用であると思われる。例えば、粉体工学や土木工学等の分野で土砂等の粒状物質のシミュレーション法として知られる離散要素法 (Distinct Element Method, DEM) [43, 44, 45] においては、はねかえり係数は現象論的なパラメータの関数として導入されるが、それは実験との整合性から経験的に決めるものであり、物理的な基礎付けはなされていない。また野球のバットやボール等のスポーツ用品の開発・研究においても、はねかえり係数はスポーツ用品の反発特性を示す指標として登場する [46]。はねかえり係数の決定要因を明らかにすることは、スポーツ用品の設計にも大いに役に立つことであろうし、工学におけるシミュレーション法の理論的基礎付けへの貢献も期待できるであろう。

本稿では、これまでに行なわれた巨視的物体の衝突に関する研究を紹介し、同時に筆者らがこれまでに行なってきた数値シミュレーションの結果やそれに関する現象論を紹介する。また弾性体の衝突だけでなく、弾性接触やナノスケールのクラスター衝突のシミュレーション結果も紹介する。本稿の構成は以下の通りである。まず次章ではこれまでの衝突研究の歴史を概観し、巨視的な衝突現象に関する理論的研究をいくつか紹介する。第3章では衝突研究における数値的方法について紹介し、特に筆者らがこれまでの研究の中で用いた、ばねと質点のネットワークに基づいた2次元弾性体モデルの詳しい導入を行う。第4章、第5章ではその2次元弾性体モデルを用いて得られた衝突研究の結果を紹介し、第6章は分子動力学法に基づいた微視的な系の衝突シミュレーションの結果を紹介する。最後に第7章における総括的な議論と今後の研究の発展に関する議論をもって本稿の結びとしたい。

2 衝突研究の歴史

紀元前4世紀のアリストテレス (Aristotle) の力学研究の中においては、くさびに圧力を加えるよりも少しの衝突を加えたときの方が大きな効果を与えるのはなぜかという問題が登場する [1]。この問題は後に17世紀になってガリレイ (G. Galilei) によって実験的に検証されることになる。力学現象を解析的に説明するという理論的研究のスタイルが確立するのは17世紀後半にニュートン (I. Newton) が『プリンキピア』 (*Philosophiae naturalis principia mathematica*) [47] を著す頃のことである。巨視的な物体の衝突現象が力学研究の中で中心的なトピックであったのはこの17世紀であり、この時期にガリレイやニュートンらによる理論的な考察が集中してなされた。ここでは特に17世紀以降の衝突研究を中心に紹介する。

2.1 17世紀の衝突研究

1638年にガリレイ (G. Galilei) は著書『新科学対話』 [48] の中で衝突の実験的研究を行ない、衝突に関する幾つかの経験則をまとめた。そこでガリレイは衝突する物体の持つ衝突力 (*forza della*

percossa) を測定する実験を行ない、衝突によって生じる力は静的な圧力に比して大きくなることや、またその力は速度や重量、衝突角度にも依存することについて述べている [3, 49, 50]。また、同時期にマルキ (M. Marci) も著書『運動の割合について』 [51] の中で衝突実験を取り上げ、1つは運動し、1つは静止している2つの相等しい弾性球が衝突すると、運動しているものは運動を止め、その失われた運動は静止したものに伝わるという実験結果を報告している [52]。

その後デカルト (R. Descartes) は二体衝突を衝突体の質量の違いや運動の方向等で場合分けし、幾つかの衝突則を導いたが、その中で衝突前後における運動量の保存則に気がついた。ただ、デカルトの衝突則は衝突体の弾性と非弾性の区別をしなかったために、正しいものと正しくないものが混在したものとなっている [3, 52]。

ガリレイやマルキらの衝突実験の結果や、デカルトの衝突則を受けて、非弾性衝突に関する理論的な考察が1670年前後にウォリス (J. Wallis)、レン (C. Wren)、ホイヘンス (C. Huyghens) らによって行なわれた。ウォリスは後の微積分法の先駆けとなる求積法の研究で知られるが、非弾性体の中心衝突に対してデカルトの運動量保存則に基づいて、衝突後の速度を与える式を提出した。レン⁴は、重さの違う振り子の実験を行い、後にホイヘンスが得たのと同様の弾性体衝突の定理を見出したが、理論的な考察は行なわなかった。ホイヘンスは、弾性球の中心衝突に関する幾つかの法則を証明なしで発表したが、その中で衝突前後の活力⁵の総和は変化しないという、重要な原理に到達した。これは現在でいう運動エネルギーの保存則に他ならない。

2.2 ニュートンによる反発係数の導入

ニュートンは1687年、著書『プリンキピア』を著し、有名な「運動の三法則」として知られる運動の一般則や、ケプラー (J. Kepler) が予測していた天体の運動に関する諸法則を万有引力を軸とする一般的法則から導出するといった、画期的な理論的業績を挙げる。その中で、ニュートンは巨視的な物体同士の衝突に関して、はねかえり係数という物理量を導入した。彼は『プリンキピア』の中で、作用・反作用の法則を実証するために振り子の衝突実験を行った。そこで彼は、弾性体の衝突においては衝突後の速度は衝突前の速度に対し比例関係にあること、またその比例係数は振り子の材質によって様々な値を取り、衝突速度に依存しないことを発見した。この一定の比例係数のことはその後にはねかえり係数と呼ばれ、衝突物体の反発を示す量として用いられるようになる。

その後様々な材質のはねかえり係数を計測するための実験が行なわれるが、その中で1834年のホジキンソン (E. Hodgkinson) の実験は『プリンキピア』のはねかえり係数に関する記述を検証するものであった [19]。彼はニュートンと同様の装置を用いて、様々な材質の振り子を用いた衝突実験を行い、はねかえり係数の計測を行った。その結果、どの材質の球においてもはねかえり係数は衝突速度によらずほぼ一定であると結論付けてはいるものの、衝突速度が大きくなるとはねかえり係数がわずかに減少するという観測結果も同時に指摘している。

⁴建築家としても有名であり、ロンドンのセントポール大聖堂 (St. Paul Cathedral) 等の設計で知られる。

⁵質量に速度の2乗をかけたもの。活力という用語はライプニッツ以降使われるようになったという [52]。

ニュートンとホジキンソンの実験の違いは、実験に用いた振り子の材質にある。ニュートンは、コルクや毛糸球のような弾性変形を起こすが塑性変形を起こしにくい材質を用いたのに対して、ホジキンソンは真鍮等の塑性変形を起こしやすい材質も用いて実験を行なった。その結果、彼は塑性変形を起こす材質の方が衝突速度の増加に対してはねかえり係数の減少する割合が大きいということにも気づいた。

ホジキンソンの実験結果を受けて19世紀末にヴィンセント (J. H. Vincent) は弾性変形及び塑性変形する球が大変形を起こすような衝突実験を行い、いろんな材質の球のはねかえり係数を計測した [20]。この実験では様々な材質の組み合わせによる球と壁の衝突実験が行なわれ、はねかえり係数が衝突速度に依存して、系統的に変化するということ事が明らかになった。

2.3 衝突の理論

この頃の弾性体の衝突に関する理論的アプローチの先駆けとして、19世紀後半にヘルツ (H. Hertz) によって発表された弾性接触理論 [53, 54] と、それに基づいた衝突理論を紹介しよう [55]。後者は弾性接触理論に基づいて、衝突時間中に弾性球に生じる変形の大きさの時間変化を追跡することで、衝突の接触時間を求めるというものである。

まず最初に弾性球の接触理論を簡単に紹介する。これは2つの弾性球を圧縮力 F_{el} で垂直に押し付けたときに生じる変形 h や接触域の半径 a との関係性を定めるものである (図2)。ヘルツの接触

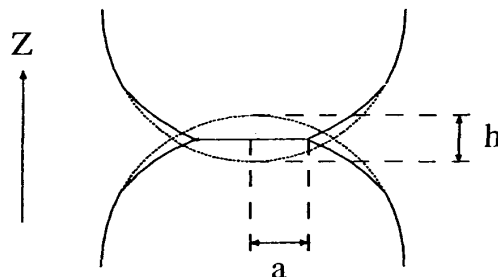


図2: 球同士の接触。

理論によれば、同質な2球同士の接触における圧縮力 F_{el} と、変形 h 及び接触半径 a の関係は、

$$h = F_{el}^{2/3} \left[D^2 \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{R'} \right) \right]^{1/3}, \quad (3)$$

$$a = F_{el}^{1/3} \left(D \frac{RR'}{R+R'} \right)^{1/3} \quad (4)$$

となる。ここで R 及び R' は2球の半径、 h は和 $R+R'$ と2球の中心間の距離との差、 D は2球のヤング率 E 、 E' とポアソン比 σ 、 σ' を用いて、 $D = \frac{3}{4} \left(\frac{1-\sigma^2}{E} + \frac{1-\sigma'^2}{E'} \right)$ で表される物性値である [54, 55]。これより3次元の場合は2球の変形 h が圧縮力 F_{el} の $2/3$ 乗に比例することがわ

國仲 寛人

かる。また、接触域の圧力分布は、2球の重心を結ぶ方向を z 軸とし、接触域は xy 平面にあるとすると、

$$P_z(x, y) = \frac{3F_{el}}{2\pi a^2} \sqrt{1 - \frac{x^2 + y^2}{a^2}} \quad (5)$$

となる。

逆に見ると、同質な2球同士を互いに圧した時に、球に働く弾性力は歪みの関数として表すことができる。そこで、2球が正面衝突した時に接触時間中に受ける力を上記の接触理論で求まる弾性力として、 h の時間発展方程式を構成してみる。以降の計算は、ランダウの弾性論の教科書[55]に準拠している。

2球の衝突時の相対速度を V として、衝突時の運動エネルギーが歪み速度で表される運動エネルギーと弾性力 F_{el} によるポテンシャルエネルギーの和と等しくなるとする。つまり、エネルギー保存則を仮定すれば、

$$\mu \left(\frac{dh}{dt} \right)^2 + kh^{5/2} = \mu V^2, \quad (6)$$

$$k = \frac{4}{5D} \sqrt{\frac{RR'}{R+R'}}$$

という微分方程式が得られる。 h は速度 dh/dt が0となる時に最大値 h_0 に達するので、式(6)より $h_0 = (\mu/k)^{2/5} V^{4/5}$ が得られる。よって、接触時間 τ は式(6)を h について0から h_0 まで積分したものを2倍することにより得られ、適当な変数変換を施した後に楕円積分を実行することによって、

$$\tau = 2 \int_0^{h_0} \frac{dh}{\sqrt{V^2 - \frac{k}{\mu} h^{5/2}}} \sim \left(\frac{\mu^2}{k^2 V} \right)^{1/5} \quad (7)$$

を得る。すなわち、接触時間は衝突速度の $-1/5$ 乗に比例することが示される[55]。文献[2]では、いくつかの金属球を用いて衝突速度と衝突時間の関係を実験的に調べているが、鉄や真鍮などの金属を用いた実験では、式(7)の妥当性が示されている。一方、はねかえり係数の方は、この解析においてはエネルギーが保存するために1にしかならない。

2.4 準静理論

1980年代後半になって、桑原(G. Kuwabara)と河野(K. Kono)は弾性体が低速で正面衝突する際の衝突速度とはねかえり係数の関係を理論的に考察し、ヘルツの理論に基づいた準静理論を提案した[25]。弾性体同士が正面衝突する際に、弾性体内部に生じた運動が無限小の速度で起こるなら、弾性体内部は平衡状態が保たれたまま運動が継続される。だが実際には、弾性体内部の運動は有限の速度で起こるので、衝突の瞬間に局所的な平衡状態からのずれが生じ、その結果全体的な平衡状態への緩和が起こる。つまり、衝突の瞬間に力学エネルギーから熱への不可逆的

な散逸が起こるわけである。もし弾性体内の運動の速度が極めて小さく、エネルギー散逸の度合いが微弱であるならば、速度の2次関数で表される散逸関数を導入し、その速度による一回微分で、内部散逸に起因する“散逸力”を定義することができる [55]。

そこで正面衝突する2つの弾性球が、ヘルツの接触理論で表される弾性力に加えて、弾性体の内部粘性に起因する散逸力を受けると仮定すれば、変形の時間発展方程式からはねかえり係数を計算することが可能になる。桑原と河野の計算によれば低速の正面衝突の場合、衝突速度とはねかえり係数の関係は、 $1 - e \propto v^{1/5}$ となることが示される。

ここで簡単に文献 [25] に基づいて準静理論を導出しよう。前述したように準静理論では、衝突時間中に2球間に働く力を弾性力と散逸力の和で表すが、前節のヘルツの接触理論で導入したように、弾性力 F_{el} は式 (3) から球の変形 h の3/2乗で表される。一方散逸力の方も、弾性力の計算と同様に基本的には圧力分布を接触域で積分する事で求めるが、弾性力と違うところは、そうやって求めた散逸力が歪みではなく、歪み速度に比例するという事を仮定するところである。そういう仮定の下で得られた散逸力は、

$$F_f = \frac{2}{D'} \left[\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right]^{1/2} h^{1/2} \dot{h} \quad (8)$$

で与えられる。ここで R_1, R_2 は接触する2球の半径で、 $\dot{\cdot}$ は時間微分を表している。また D' は、式 (3)、(4) の D に相当し、粘性係数で定義される量である。

さて、衝突時に粘弾性球に働く力 F を $F = F_{el} + F_f$ で表せば、球に生じる歪み h の時間発展を次のような微分方程式で表すことができるだろう。

$$\mu \frac{d^2 h}{dt^2} + \frac{5}{2} k' h^{1/2} \dot{h} + \frac{5}{4} k h^{3/2} = 0, \quad (9)$$

$$k = \frac{4}{5D} \left[\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right]^{1/2}, \quad (10)$$

$$k' = \frac{4}{5D'} \left[\frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \right]^{1/2}. \quad (11)$$

この微分方程式を無次元パラメータ $\chi = h/h_{max}$ 、 $\tau = tv/h_{max}$ で書き直すと、

$$\frac{d^2 \chi}{d\tau^2} + \gamma \chi^{1/2} \frac{d\chi}{d\tau} + \frac{5}{4} \chi^{3/2} = 0, \quad (12)$$

$$\gamma = \frac{5}{2} k' \left(\frac{v}{k^3 \mu^2} \right). \quad (13)$$

となる。ここで無次元化には内部摩擦がないときの歪みの最大値 h_{max} と衝突速度 v を用いた。

ここで式 (12) は、無次元化した初期速度 γ を与え、数的に解くことで衝突後の $d\chi/dt$ からのはねかえり係数を求めることができるが、 γ が小さいと仮定すれば解析的に解くことができる。式 (12) の両辺に $d\chi/dt$ を乗じて $\tau = 0$ から $\tau = \tau_c$ まで積分することによって、

$$\int_0^{\tau_c} d/d\tau \left[1/2 (d\chi/d\tau)^2 + (1/2) \chi^{5/2} \right] d\tau = -\gamma \int_0^{\tau_c} \chi^{1/2} (d\chi/d\tau)^2 d\tau \quad (14)$$

となる。

國仲 寛人

左辺は時刻 $\tau = 0, \tau_c$ において $\chi = 0$ であるという条件を課し、更に初期速度 $d\chi/d\tau|_{\tau=0} = 1$ ということに注意して反発速度 $d\chi/d\tau|_{\tau=\tau_c} = u$ とすれば、 $(1/2)(u^2 - 1)$ となる。

一方、右辺は $\tau = \tau_0$ で $\chi = 1$ となることを利用して、

$$-\gamma \int_0^{\tau_c} \chi^{1/2} (d\chi/d\tau)^2 d\tau = -2\gamma \int_0^1 \chi^{1/2} (d\chi/d\tau) d\chi \quad (15)$$

$$\simeq -2\gamma \int_0^1 [\chi(1 - \chi^{5/2})]^{1/2} d\chi \quad (16)$$

$$= -2\gamma(2/5)B(3/5, 3/2) \quad (17)$$

$$= -1.009\gamma \quad (18)$$

となる。ここで散逸が小さいと仮定し、無散逸の時のエネルギーバランスの式 (6) を無次元化することで $d\chi/d\tau \simeq (1 - \chi^{5/2})^{1/2}$ とした。また、 $B(p, q)$ はベータ関数である。

以上より、はねかえり係数 e は $e \equiv |u|$ で定義されることに注意すれば、

$$e = (1 - 2.018\gamma)^{1/2} \quad (19)$$

$$\simeq 1 - 1.009\gamma \quad (20)$$

となり、 $e \propto 1 - v^{1/5}$ が示される。

彼らは実際に様々な材質の振り子を用いた衝突実験を行い、この理論式の有効性を実証している⁶。その後、異なったアプローチによるいくつかの準静理論の構築がなされ [26, 27, 29]、準静理論は低速の正面衝突においては、有効な理論であると信じられている。

2.5 塑性変形を伴う高速衝突

桑原と河野の解析は、物体が十分小さい速度で衝突するという仮定に基づいてなされたものであるが、ジョンソン (K. L. Johnson) は、高速の正面衝突における衝突速度とはねかえり係数の関係を次元解析を基に見積もった [18]。ジョンソンの解析は、衝突時に起こる塑性変形のエネルギーを見積もることによって衝突後のエネルギーを計算し、衝突前のエネルギーとの比からはねかえり係数を計算するというものである。

ここで簡単にジョンソンの解析方法を紹介する。2つの球同士が、相対速度 V で互いに正面衝突し、相対速度 V' ではねかえる状況を考えよう。そして、衝突前に持っていた運動エネルギーは衝突によって2球に局所的に生じる弾塑性変形に吸収されると仮定しよう。すると、衝突によって球に生じる最大の変形を δ^* とし、接触面上に働く力を F とすれば、

$$\frac{1}{2}\mu V^2 = \int_0^{\delta^*} F(\delta) d\delta \quad (21)$$

⁶とはいえ、塑性変形を起こしやすい金属で、しかも降伏強度の小さい真鍮の振り子の実験結果は準静理論との一致はあまりよくない。

となる。ここで μ は 2 球の換算質量である。一方で、最大変形が起こった後に反発の運動エネルギーが、弾性回復によってなされる仕事に等しいとすれば、

$$\frac{1}{2}\mu V'^2 = \int_0^{\delta^*} F'(\delta')d\delta' \quad (22)$$

となる。ここで' (プライム) のついた量は反発後の量を示すものとする。従って、 $F(\delta)$ と $F'(\delta')$ がわかれば、 V' と V からはねかえり係数 $e = -V'/V$ が求められることになるが、圧縮力が弾性限界を超え、塑性変形が起こるようになると、平均の接触圧は $1.1Y$ から $3.0Y$ 程度の一定値を取る (Y は降伏応力)。ジョンソンの解析においては、変形 δ が接触面の半径 a と $\delta = a^2/2R$ の関係にあることと、平均の接触圧が $3.0Y$ に等しくなる事を仮定して、式 (21)、(22) から次元解析によりはねかえり係数と衝突速度の関係を導く。

その解析によればはねかえり係数と衝突速度の関係は、 $e \propto V^{-1/4}$ となることが導かれる。実際にスチールの金属球を様々な種類の金属で出来た板に正面衝突させて衝突速度とはねかえり係数の関係を探った実験においては、材質の種類によらずはねかえり係数が衝突速度の $-1/4$ のべきで減少することが確認され、この解析の有効性が示されている [2, 18]。

2.6 斜め衝突

これまでに扱ったのは弾性体の正面衝突であるが、弾性体が斜め衝突した時の反発の挙動も様々な手法で調べられている。斜め衝突の反発を表すパラメータとして用いられるのは、式 (2) で導入した接線方向のはねかえり係数 e_t である。式 (2) において $V_t^{(c)'}$ は、衝突によって励起される回転の角速度 ω' を用いて、 $\mathbf{V}_t^{(c)'} = \mathbf{V}' - R\omega' \times \mathbf{n}$ と表すことができることから、 e_t は衝突によって励起される角速度 ω' によって決まることがわかる。

ウォルトン (O. R. Walton) は、シンプルな剛体球同士の衝突を考え、運動量保存則と角運動量保存則を仮定して接線方向のはねかえり係数と衝突角度の関係を導いた [38, 39]。ウォルトンの解析によれば衝突角度 γ と e_t の関係は、次のようになる。

$$e_t \simeq \begin{cases} -1 + \mu_0(1+e) \cot \gamma \left(1 + \frac{MR^2}{I}\right) & (\gamma \geq \gamma_0) \\ \beta_0 & (\gamma \leq \gamma_0), \end{cases} \quad (23)$$

ここで γ_0 、 M 、 R 、 μ_0 、 I は、それぞれ臨界角、質量、半径、摩擦係数、慣性モーメントを表す [38, 39]。この関係式によれば、衝突角度が臨界角 γ_0 よりも大きい時には、衝突中は摩擦係数 μ_0 でスリップが起きるが、小さいときにはスリップが起らずに衝突体に十分な回転が生じ、 e_t は正の最大値 β_0 という値を取るようになる。 e_t はこのように衝突角度によって様々に変化するパラメータであるが、その最大値 β_0 は材質の種類や表面の摩擦によって決まる値であり、物質の斜め衝突を特徴付ける量として実験によって様々な物質の β_0 の値が計測されている [35, 36, 37]。近年、斉藤 (K. Saitoh) と早川 (H. Hayakawa) は 2 つの円盤がお互いに斜め衝突した状況を考え、衝突中の接線方向の歪みに関する運動方程式を解析することで β_0 の値に理論的な説明を与えることに成功している [56]。

國仲 寛人

一方でモウ (N. Maw)、バーバー (J. R. Barber)、フオウセット (N. Fawcett) [40, 41] やストロンジ (W. J. Stronge) [3] は衝突角度を3つの領域に分割し、その各々の領域で衝突中の球は、(i) 壁と固着状態にある (スリップが起こらない)、(ii) スリップ状態と固着状態が共存する、(iii) 完全にスリップの状態を取ると仮定した。そして、法線方向と接線方向に働く力を計算することで、衝突が終わった後の衝突点の速度を計算し、そこから接線方向のはねかえり係数を計算した。この理論はウォルトンの剛体衝突の理論とは違って、弾性体の衝突のプロセスを考慮に入れた理論であるが、定式化がウォルトンの理論に比べて煩雑であるという欠点がある。

2.7 1を超えるはねかえり係数

斜め衝突の実験においてははねかえり係数と衝突角度の関係を調べると、興味深い現象が観測されることがある。はねかえり係数は1以上の値を取らないというのは、初等物理の教科書にも載っている常識だが、斜め衝突の場合には1以上の値を取り得ることが近年報告されている。

コーネル大のルージュ (M. Y. Louge) とアダムス (M. E. Adams) のグループによって近年行なわれた実験は、アルミニウム酸化物の球を斜めに傾けたポリカーボネートの板の上に自由落下させ、衝突角度とはねかえり係数の関係を調べたものである [31]。その結果、彼等のはねかえり係数が衝突角度の正接に対して線形に上昇し、衝突角度が74.9度に達すると1を超え始めるという一見奇妙な結果を得た。また彼等は板の角度を86.2度まで傾けて実験を行い、はねかえり係数は最大1.3にまで達することを報告している。彼らの用いた実験材料は、球に比べて壁の方が軟らかい材質であり、衝突時に壁表面に局所変形が生じることが確認されている。彼らはこの壁表面に生じる局所変形が球の軌道を上向きに変えることによって、このような現象が起こり得ると述べているが、実際にこの仮定に基づいた解析を5章で紹介する。

この実験以外にも、エアテーブル上に円盤を置いて、テーブルの端に取り付けた壁に斜め衝突させて、衝突角度とはねかえり係数の関係を調べた実験がある [32]。この場合はルージュとアダムスの実験結果のように、はねかえり係数は衝突角度に対して線形に変化はしないものの、ある衝突角度になると急に1を超えるという結果が得られた。この実験で用いられた実験材料は、ルージュとアダムスのそれとは逆に壁の方が円盤よりも硬い材質であり、この両者の硬さ比の違いが主に実験結果の違いを生じさせていると考えられる。

2.8 その他の研究

ここまでで紹介してきたのは固体同士の衝突であるが、近年それ以外にも様々な形状の物体や、高分子や液体等の衝突現象の研究も行われている。例えば「水切り」は、河原などで平たい石を川面に水平に投げて石の反跳回数を競う遊びであるが⁷、近年ボケ (L. Bocquet) のグループは回転する円盤を水表面に衝突させ、衝突時に円盤と水表面のなす角が20度の時に最も反跳の回数が多いという、興味深い実験事実を報告した [58]。その後、永弘 (S. Nagahiro) と早川 (Y. Hayakawa)

⁷現在 (2008年5月) の世界記録は、2007年7月に Russell Byars が達成した 51回 [57]。

によって、SPH法に基づいた円盤と液体の衝突シミュレーションが行われ、やはりこの20度という衝突角度が最も多い反跳回数を引き起こす「マジックナンバー」であることが示された [59]。更に彼らは円盤が水面と接触したときに円盤が水面から受ける力に基づいて円盤の運動を記述する微分方程式系を構築し、その解析により「マジックナンバー」に説明を与えることに成功している。

この他にも球や円柱の水面への衝突や [60, 61]、水滴と板の衝突 [62]、大変形を起こすようなゲル球の衝突 [63] 等の興味深い研究も行われており、惑星科学の分野では粉体層や多孔性物質に球体を様々な初期条件で衝突させて、天体表面のクレーター形成過程を調べる実験やシミュレーションが行われている [64, 65]。

3 数値モデル

この章では、衝突問題に対してどのような数値的手法が用いられるかを紹介する。車や携帯電話等の工学的な衝突問題の数値的解法としてよく知られているのは、おそらく有限要素法による解析ではないだろうか。有限要素法のソフトウェアは市販のパッケージ [66] も多く存在するので、データを入力するだけで手軽にシミュレーションを行なえるという利点があるが、物体の形状が複雑だとメッシュ分割に時間がかかり、また破壊の現象を扱うのが困難だという不利な点もある⁸。

様々な形状の固体の衝突や、それに伴う塑性変形・破壊を扱うためには、固体を粒の集合体と見做した粒子ベースのモデリングが直感的である。固体を粒子の集団で表す方法には後に紹介するばね一質点モデル [68] や粒子法 [69] 等の方法が知られている。また、粒子の集合で物体の形状を表現し、粒子間相互作用として離散要素法（第1章参照）で用いる相互作用に、水やモルタルなどの効果を模倣した間隙ばねを付加して、固体の破壊挙動をシミュレーションする方法もある [44]。

物理学の側から、弾性体のはねかえり係数と衝突速度の関係を調べた数値的な研究の例として、ゲール (F. Gerl) とジッペリウス (A. Zippelius) の2次元衝突シミュレーションの研究が挙げられる [30]。彼らの衝突モデルは開放端の境界条件を持つ弾性円盤のモード解析に基づいたものである。彼らのモデルは散逸を含まないハミルトンモデルであり、衝突後に内部に生じた弾性振動を散逸と見做し、衝突前後の並進速度の比からはねかえり係数が計算される。数値計算は弾性場と壁ポテンシャルとの相互作用を含めたハミルトン方程式を解くことによって、円盤の重心の時間発展を計算する。彼らの計算では、はねかえり係数は衝突速度が上がるに連れて単調減少すること、またその値は衝突物体のポアソン比に強く依存することが明らかになった。

ここで、筆者らが数値実験に用いたばね一質点モデルを紹介する。ばね一質点モデルとは多数のばねで連結された質点によって弾性体を表現するもので、主にコンピュータグラフィックスの分野でよく用いられている [68]。基本的には各質点が連結されているばねから受ける力を計算することによって位置や速度の時間発展を計算し、弾性体全体の運動の時間発展を求めることができる。このようにして弾性体をモデル化することには、次のようなメリットがある。

⁸メッシュ自体を破壊することで、物体の塑性変形や破壊を表現する有限要素スキームも開発されている [67]。

國仲 寛人

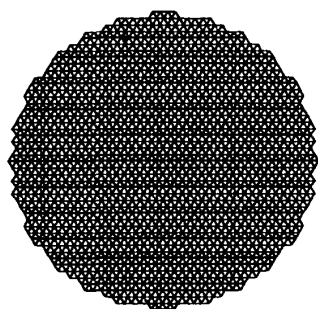


図 3: 三角格子モデル。

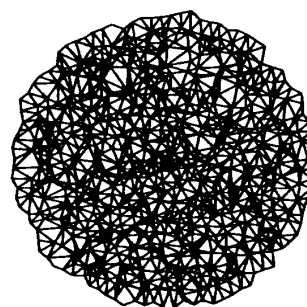


図 4: ランダム格子モデル。

1. モデリングが直感的で、アルゴリズムが簡単である。
2. 様々な形状の弾性体を表現することが出来る。
3. 破壊や塑性変形を表現することが出来る。
4. 温度分布や応力分布等を簡単に計算することが出来る。

またこのようなモデル化の欠点として、一部の質点が大きな外力を受けたときに格子が大きく変形し、変形が元に戻らなくなるという現象が起こることがある。これは、ばねに一定以上の力が働くとばねが切れるというルールを導入すれば解決することが可能である [68, 70, 71]。我々の研究ではばねを切断するルールを導入せず、変形が元に戻るようなパラメータ領域でのみシミュレーションを行なっている。

2次元のばね-質点モデルを構築するためには、まず質点をどのように初期配置させるかという問題があるが、その一つの方法として質点を三角格子状に配置する三角格子モデルが考えられる (図 3)。三角格子モデルを構成するためには、まず質点を円内に三角格子状に配置した後で近傍の質点同士をばね定数 κ の線形ばねで接続する。この時、モデルのヤング率は $E = 2\kappa/\sqrt{3}$ 、ポアソン比は $\nu = 1/3$ になることが分かっている [72]。各質点の運動方程式は次のように表される。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = -\kappa \sum_{j=1}^6 (d_0 - |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}.$$

ここで \mathbf{r}_i は質点 i の位置、 j は近接の粒子のサフィックス、 m は質点の質量である。この運動方程式を適当な初期条件の基で解いて質点の位置と速度の時間発展を求めることによって、弾性体の運動や変形を追うことが出来る。これまでの筆者らの研究においては、物体が壁に正面衝突した際の速度とはねかえり係数の関係を調べるために三角格子モデルを指数関数型のポテンシャル壁に正面衝突させるシミュレーションを行った [73, 74, 75, 76, 77, 78]。また、第 2 近接の相互作用まで取り入れた正方格子から成る弾性壁を構成し、三角格子モデルを正面衝突させた時ののはねかえり係数と弾性壁の厚さの関係も調べた [76, 79]。

一方、筆者らの斜め衝突のシミュレーションにおいては、質点をランダムに配置したランダム格子モデルを用いる (図 4)。これは、斜め衝突の時に三角格子や正方格子のような規則性のある格

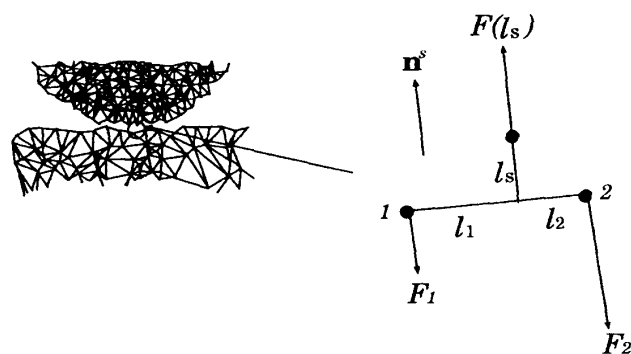


図 5: 弾性円盤と弾性壁の相互作用。

子を用いると、初期のモデルの配向によって結果のばらつきが大きくなるためである。格子をランダム格子にするとそのようなばらつきを抑えることができる。このモデルを構築するには、まず一様乱数を用いて質点を円内にランダムに配置する。その後、近傍の質点同士を連結するためにデローニー三角分割法 [80] を用いる。連結された質点間には次のような非線形ばねによる復元力が働くとする。

$$\mathbf{f}_{ij} = -k_a \mathbf{x} - k_b \mathbf{x}^3 \quad (24)$$

ここで、 \mathbf{x} はばねの自然長からの伸び、 k_a と k_b はばね定数である。非線形ばねを用いた理由は、モデルが大きく変形したときにばね両端の質点の位置が入れ替わり、モデル全体の変形が戻らなくなるのを防ぐためである。また、ここで扱うシミュレーションにおいてはモデルの全体的な変形が大きくないため、非線形項の効果によるモードのミキシングの効果はほとんどないと考えられる。

斜め衝突のシミュレーションでは、上記のようにして構成した弾性円盤の他に、同様にして作った弾性壁を用意する。これは質点を長方形内にランダムに配置すること以外は、弾性円盤と同様の方法で作成する。弾性円盤と弾性壁の相互作用は以下のように導入する (図 5)。まず円盤の下半分の縁に位置する全質点に関して、真下にある壁表面のばねとの距離を時間ステップ毎に計算しておき、もしその距離が閾値 l_{th} よりも小さければ次の反発力を受けるとする。

$$\mathbf{F}(l_s) = a_0 V_0 \exp(-a_0 l_s) \mathbf{n}^s \quad (25)$$

ここで、 \mathbf{n}^s はばねに垂直な方向の単位方向ベクトル、 l_s は質点からばねまでの距離、 a_0 は円盤の半径を R とすれば $300/R$ 、 V_0 は 1 次元音速を c として、 $a_0 m c^2 R/2$ という値を用いる (図 5 参照)。また閾値 l_{th} の値には円盤を構成する全てのばねの自然長の平均値を用いた。指数関数以外にも斥力のモデル化の方法として、例えばレナード・ジョーンズポテンシャルの斥力部分を用いることもできるが、ここでは物体同士の貫通を妨げる強い反発力のモデルとして指数関数を用いた。

質点からばねに下ろした垂線の足から、ばね両端の質点 1 と 2 までの距離を l_1 、 l_2 とすれば、ばね両端の質点 1 と 2 はそれぞれ $\mathbf{F}_1(l_s) = -\frac{\mathbf{F}l_s}{1 + l_1/l_2} \mathbf{n}^s$ 、 $\mathbf{F}_2(l_s) = -\frac{\mathbf{F}l_s}{1 + l_2/l_1} \mathbf{n}^s$ という反作用を受けるとする。これは垂線の足を中心にしたトルクの和がゼロとなるように決めたものである。

國仲 寛人

以上より、円盤下半分の縁上にある質点 i の運動方程式は次のように書ける。

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_{j=1}^{N_i} \{-k_a \mathbf{x}_{ij} - k_b \mathbf{x}_{ij}^3\} + \theta(l_{th} - l_s) \mathbf{F}(l_s). \quad (26)$$

ここで、 \mathbf{x}_{ij} は質点 ij 間の自然長からの変位であり、 $\theta(l_{th} - l_s)$ は以下のようなステップ関数である。

$$\theta(l_{th} - l_s) = \begin{cases} 1 & \text{if } l_s \leq l_{th} \\ 0 & \text{if } l_s > l_{th}. \end{cases}$$

また N_i は質点 i につながるばねの数である。

モデル表面のラフネスは物体間の摩擦力を生み出すために導入したものである。ランダム格子モデルによる斜め衝突のシミュレーションにおいて、表面のラフネスは重要な役割を果たしている。というのも、2.6節で述べたように現実の斜め衝突では、衝突物体間の摩擦力が衝突後の運動に影響を与えるからである。ラフネスはモデル表面の質点の位置を標準偏差 $3 \times 10^{-2} R$ の正規乱数を用いて元の位置から変位させ、導入している。

4 接触及び低速衝突のシミュレーション

ハミルトン系に基づくばね一質点系の弾性体モデルは、巨視的な弾性体の斜め衝突の現象論 [35, 38, 39] や、衝突角度とはねかえり係数の関係の実験結果 [31] を定性的に再現することに成功している [33, 42, 81]。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間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。この章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、ハミルトン系のモデルでも回復できることを示す [82]。

4.1 数値モデル

この章で用いる弾性体モデルは前章で導入したランダム格子モデルに基づいており、円盤と壁を構成する質点数はそれぞれ 1099、1269 である (図 6)。式 (24) で表される質点間相互作用に関して、円盤と壁の k_a をそれぞれ $k_a^{(d)}$ 、 $k_a^{(w)}$ とすると、 $k_a^{(d)} = 1.0 \times M c^2 / R^2$ 、 $k_a^{(w)} = 1.0 \times 10^2 M c^2 / R^2$ 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。また、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。式 (26) 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 につながっている 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可能になる。このことはあたかも固体中の格子欠陥や不純物が、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、エネルギー流束 \mathbf{J} を $\mathbf{J} = \sum_i \left\{ (1/2) m \mathbf{v}_i^2 + \epsilon_i \right\} \mathbf{v}_i$ 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束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。

4.2 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(26)の右辺に $-(P/N)\hat{y}$ 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{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 $P = 5.77 \times 10^{-3} \pi R E^*$ から $P = 1.27 \times 10^{-3} \pi R E^*$ まで P を変化させて行い、 $P/\pi R E^*$ 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。

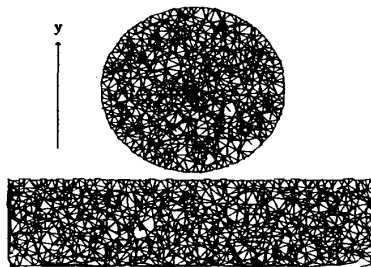


図 6: 欠陥を含む弾性円盤と弾性壁の2次元モデル [82]。

國仲 寛人

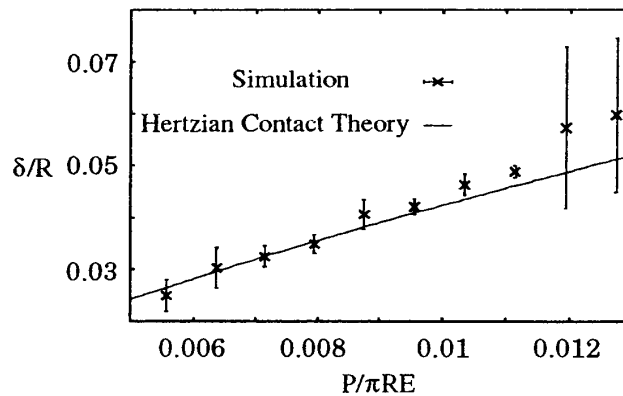


図 7: 圧縮力 $P/\pi RE^*$ と変形 δ/R の関係。×印は 10 サンプルの円盤を用いた シミュレーション結果の平均値であり、エラーバーはその標準偏差である。

図 7 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 [53] 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 [30]。

$$\delta \simeq \frac{P}{\pi E^*} \left\{ \ln \left(\frac{4\pi E^* R}{P} \right) - 1 - \nu \right\}. \quad (27)$$

実線は、式 (27) を $\nu = 0.336$ でプロットしたものである⁹。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 $\tilde{f}(x, y, v_x, v_y, t)$ に対して、 $f(v_x, v_y, t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \tilde{f}(x, y, v_x, v_y, t)$ で定義する。 $\tilde{f}(x, y, v_x, v_y, t)$ は時刻 $t - 6R/c$ から t までのデータを平均して求める。

図 8(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 8(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 8(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。

⁹ 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。

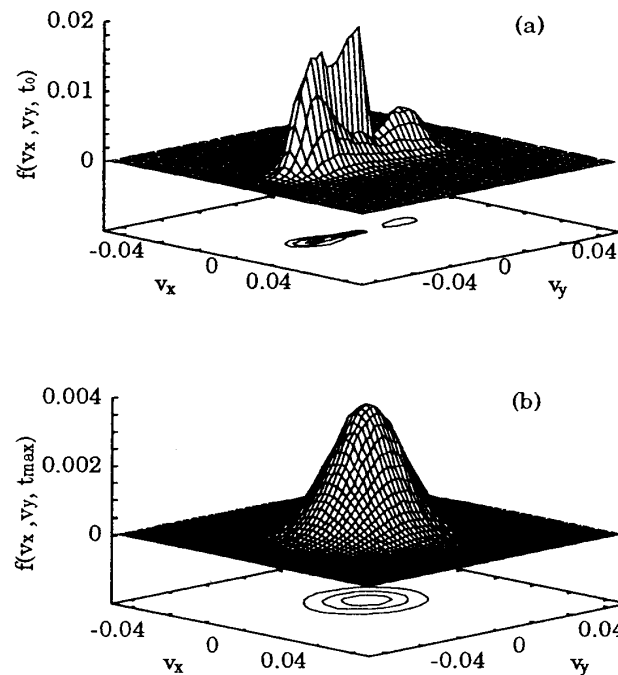


図 8: 円盤を構成する質点の速度分布関数。時刻はそれぞれ (a) $t = t_0$ 、(b) $t = t_{max}$ 。

更に求めた速度分布関数を用いてエントロピーの時間発展を計算する。エントロピー $S(t)$ は $S(t) \equiv - \int_{-\infty}^{\infty} dv_x \int_{-\infty}^{\infty} dv_y f(v_x, v_y, t) \ln f(v_x, v_y, t)$ 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、エントロピーの欠陥数依存性についても調べた。図 9 はエントロピーの時間発展の様子を示している。図 9(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 9(b) は 0 個と 15 個の場合である。図 9(a) によれば、欠陥粒子の数が 8 個から 10 個の場合の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、多かったりするとエントロピーは単調増加の傾向を示さない。図 9(b) は欠陥粒子の数が 0 個及び 15 個の場合の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。

4.3 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 (26) に初期速度 v を $v = 1.0 \times 10^{-3}c$ から $v = 1.0 \times 10^{-2}c$ 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

國仲 寛人

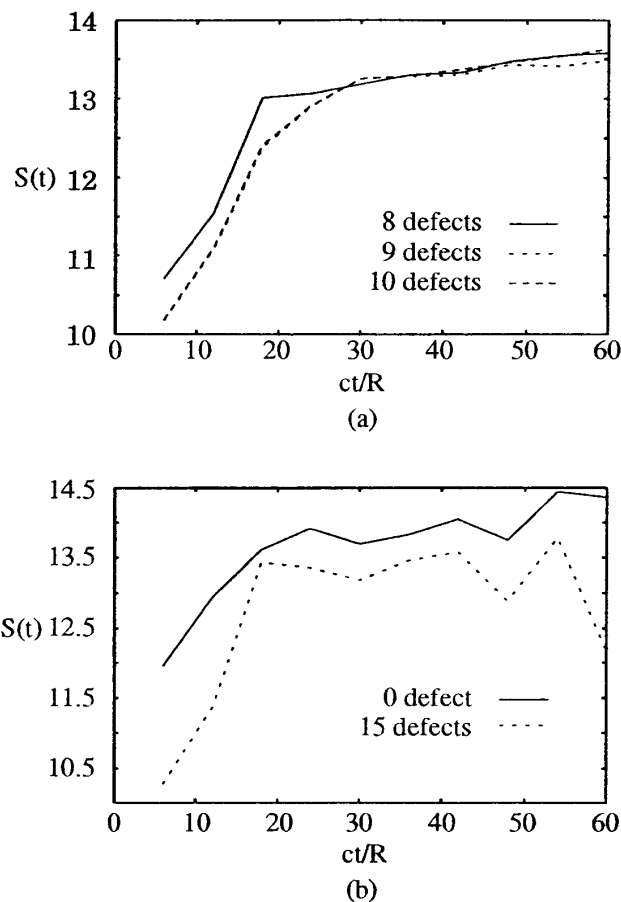


図 9: エントロピーの時間発展。それぞれ導入した欠陥粒子の数が (a) 8 から 10 個の場合と (b) 0 個と 15 個の場合を示す。

$4R$ に設定した。

図 10 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 $v/c = 7.0 \times 10^{-3}$ 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 [26, 27, 30] 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。

$$M \frac{d^2 \delta}{dt^2} = -P - \tau_0 \frac{dP}{d\delta} \frac{d\delta}{dt} \quad (28)$$

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

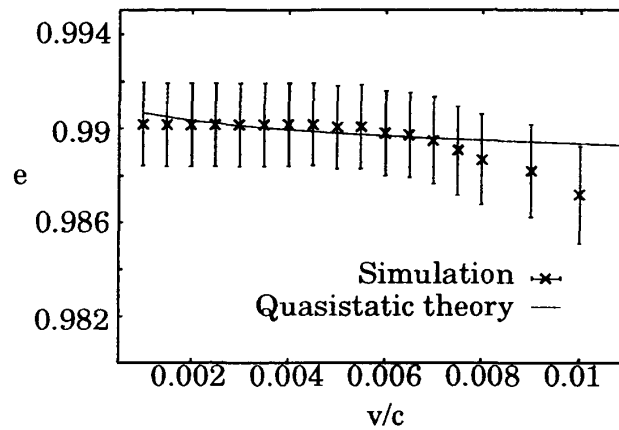


図 10: 衝突速度とはねかえり係数の関係。実線は準静理論による結果。

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 10 の実線は $\tau_0 = 0.011R/c$ の時に、式 (28) 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 $v/c = 7.0 \times 10^{-3}$ 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。

以上、この章では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。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エントロピーの時間発展を調べた結果、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できた。また欠陥粒子の数は、今のモデルのサイズの場合 8 個から 10 個の欠陥粒子が必要であることがわかった。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。

5 斜め衝突のシミュレーション

この章では、筆者らが行った弾性体の斜め衝突のシミュレーションとそれによって得られた衝突角度とはねかえり係数の関係についての解析結果を紹介する。2.7 章で、球と壁の斜め衝突においてはねかえり係数が衝突角度によって系統的に変化し、更に 1 以上の値を取り得ることを示したコーネル大のグループの実験を紹介したが [31]、ここではこの現象を 2次元の数値シミュレーションによって再現し、衝突角度とはねかえり係数の関係を決定するメカニズムについて考察する [33, 34, 81]。

國仲 寛人

5.1 数値モデル

筆者らの用いた弾性体モデルは質点とばねから構成される2次元のランダム格子モデルである [33, 81]。弾性体モデルは半径 R の円盤と高さ $2R$ 、幅 $8R$ の板から構成され、それらを構成する質

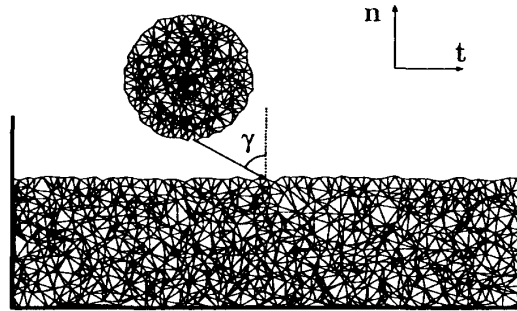


図 11: ランダム格子による円盤と板の衝突モデル。 γ を衝突角度とする。

点はそれぞれ同じ密度になるようにそれぞれ 800 個、4000 個をランダムに配置した (図 11)。質点はデローニー三角分割のアルゴリズムを用いて近接の 2 点同士を、次のようなポテンシャルで表される非線形ばねで接続する [83]:

$$V(x) = \frac{1}{2}k_a x^2 + \frac{1}{4}k_b x^4. \quad (29)$$

ここで x は自然長からの伸びである。ばね定数 k_a は円盤、板に対して各々 $k_a = 1.0 \times mc^2/R^2$ 、 $k_b = 1.0 \times 10^{-2}mc^2/R$ という値を用いた。また k_b に関しては円盤、板両方に対して $k_b = k_a/100$ という値を用いている (m は質点の質量、 c は 1 次元の音速)。壁の両端と底は固定境界である。また、このモデルのポアソン比は機械的に板を牽引して垂直及び平行方向の変位を測定することにより計算することができ、その値は $\nu = (7.50 \pm 0.11) \times 10^{-2}$ である¹⁰。

シミュレーションは初期速度を $|\mathbf{v}(0)| = 0.1c$ に固定して、衝突角度 γ の正接を $\tan \gamma = 1$ から $\tan \gamma = 7$ まで変化させて、それぞれの角度に対するはねかえり係数を測定した。また、質点の配置による結果のばらつきを取り除くために、質点の配置を変えた 100 種類の円盤を用意し、各衝突角度毎に 100 個のデータを平均した。数値計算は各質点の運動方程式を 4 次のシンプレクティック積分で時間刻み $dt = 10^{-3}R/c$ で解いた。

5.2 結果と考察

図 12 は、シミュレーションによって得られた $\Psi_1 = \tan \gamma$ と e の関係である。×印は各衝突角度における 100 種類の円盤によるデータの平均値、エラーバーはその標準偏差を表している。 e が 1

¹⁰弾性率の計算の時だけ、質点間に非線形ばねの相互作用に加え、ばね両端の相対速度に比例する摩擦力の相互作用を導入して振動緩和後の変位を測定する。

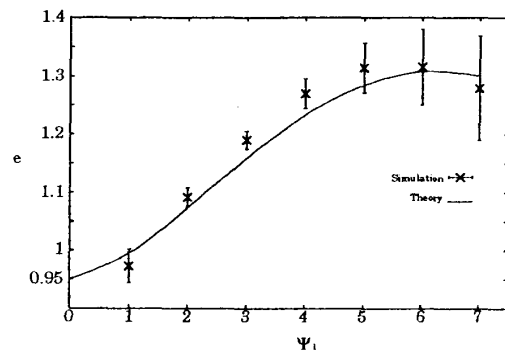


図 12: Ψ_1 とはねかえり係数 e の関係。×印はシミュレーション結果、エラーバーは標準偏差。実線は式 (30) で、 $e_\alpha = 0.95$ の時の e をプロットしたものである。

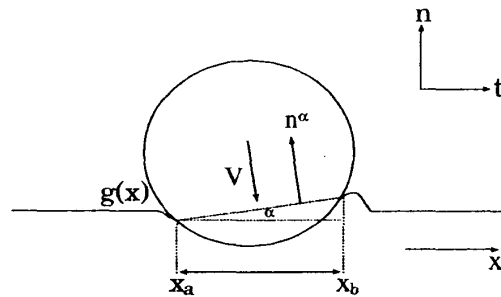


図 13: 円盤がやわらかい壁に衝突している様子。

を越え始める角度や、 $\Psi_1 = 6.0$ あたりでピークが出る傾向があるという違いがあるものの、 e が $\tan \gamma$ の増加につれて上昇し 1 を越え始めるというコーネル大のグループの実験と似た傾向が確認された。

コーネル大のルーージュとアダムスは彼らの実験結果を説明するために、壁表面に生じた局所変形が球の軌道を上向きに変え、その効果によりはねかえり係数が増加し 1 を超えるようになるのではないかと推測した [31]¹¹。そこで衝突で壁表面に生じる局所変形がはねかえり係数に与える影響を考えてみよう。

図 13 に、円盤がやわらかい壁に衝突し、壁表面に最大の局所変形が生じている様子を示した。壁表面の法線方向の単位ベクトル \mathbf{n} が、衝突によって生じた局所変形によって円盤に向かって角度 α だけ回転し、接触面上では \mathbf{n}^α になるとする。ここで、衝突時間を τ_c として、衝突後の速度を $\mathbf{v}(\tau_c)$ として、 \mathbf{n} と \mathbf{n}^α で定義した 2 つのはねかえり係数、 $e = -(\mathbf{v}(\tau_c) \cdot \mathbf{n}) / (\mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{n})$ と $e_\alpha = -(\mathbf{v}(\tau_c) \cdot \mathbf{n}^\alpha) / (\mathbf{v}(0) \cdot \mathbf{n}^\alpha)$ を導入する。この 2 つのはねかえり係数の関係は、

$$e = \frac{e_\alpha + \Psi_2^\alpha \tan \alpha}{1 - \Psi_1^\alpha \tan \alpha} \quad (30)$$

となる。 Ψ_1^α と Ψ_2^α はそれぞれ $\Psi_1^\alpha = (\Psi_1 - \tan \alpha) / (1 + \Psi_1 \tan \alpha)$ と $\Psi_2^\alpha = (\Psi_1 - \tan \alpha) / (1 +$

¹¹実際、壁の局所変形が物体の反射角を変え、はねかえり係数に影響するという実験結果がある [84]。

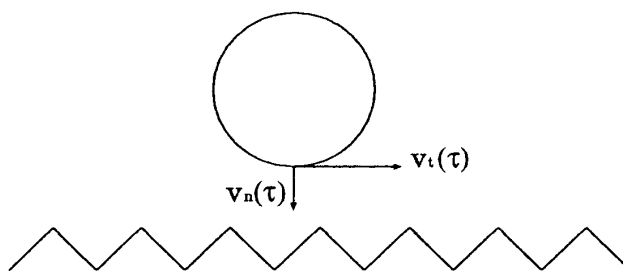


図 14: 円盤と壁表面の模式図。

$\Psi_1 \tan \alpha) - 3(1 + e_\alpha)(\mu + \tan \alpha)/(1 - \mu \tan \alpha)$ で表される。ここで Ψ_2 の表式を導くときにウォルトンらの剛体円盤の斜め衝突理論を用いている [38, 39]。 $\tan \alpha$ を求めるためには、円盤の表面を何らかの関数形で表現する必要があるが、ここでは板が円盤よりもずっと軟らかいので剛体円盤が軟らかい表面と摩擦力を受けて接触していると仮定し、接触面を $g(x) = (x - x_c)^2/2R - y_c$ という二次関数で表すことにする。接触面の両端の x 座標を x_a, x_b とおいて $\tan \alpha = (g(x_b) - g(x_a))/(x_b - x_a)$ と定義すれば、弾性論の教科書 [85] によると α の正接は、 $\tan \alpha = |x_c - x_a| \frac{1 - 2\varepsilon}{R(2 - 2\varepsilon)}$ 及び $\varepsilon = (1/\pi) \arctan(1 - 2\nu)/(\mu(2 - 2\nu))$ で表すことができる (μ は表面の摩擦係数)。 $|x_c - x_a|$ の値及び各衝突角度に対する μ の値は、シミュレーションの結果から求め、 $|x_c - x_a|$ は $0.55R$ という一定値を用いた。また μ は衝撃を $\mathbf{J} = m(\mathbf{v}(\tau_c) - \mathbf{v}(0))$ で定義し、水平及び垂直成分をそれぞれ J_t, J_n とすると、 $\mu = |J_t|/|J_n|$ で定義される。図 15 の \times 印はこの定義によって計算した衝突角度と μ の関係である。これから各 Ψ_1 における $\tan \alpha$ を計算できることになり、結果的にはねかえり係数と衝突角度の関係を得ることができる。

図 12 の実線は式 (30) を $e_\alpha = 0.95$ という値を用いて描いたものである。式 (30) はシミュレーション結果をうまくフィットできることがわかる。このように斜め衝突のはねかえり係数には、衝突角度と摩擦係数の関係が影響する。

最後に衝突角度と摩擦係数の関係を簡単なモデルで考察する。壁表面にラフネスに相当する同じ大きさの突起が密度 ρ で等間隔に並んでおり、衝突時に円盤が突起に接触すると円盤の持っているエネルギーの一部が突起に散逸するとすれば、接触した突起の数で衝突後の速度が決定される (図 14)。ここでパラメータ η を導入して、 i 番目の突起に接触する時の接線方向の速度 $v_t^{(i)}$ は $v_t^{(i)} = (1 - \eta)v_t^{(i-1)}$ で表されると仮定しよう。もし衝突時間中に N 個の突起と接触するならば、衝突後の接線方向の速度は $v_t(\tau_c) = v_t^N = (1 - \eta)^N v_t(0)$ となる。 η は以下の通りに決める。円盤の接線方向の衝突速度が十分に大きい時には表面の突起が押しつぶされるという効果により、 η は小さくなると仮定する。そこで、 η の関数形として、

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + \beta v_t^2(0)/v_n^2(0)} = \frac{\eta_0}{1 + \beta \Psi_1^2} \quad (31)$$

という形を仮定する。新たに導入した無次元パラメータ η_0 と β は後にフィッティングパラメータとして扱う。

更に N を決定するために、円盤と壁の衝突時間中に壁表面をすべる長さ l_{sl} を見積もる。衝

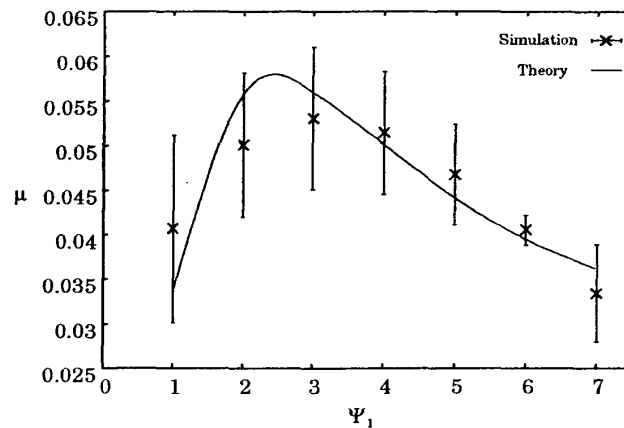


図 15: Ψ_1 と摩擦係数 μ の関係。

突時間 τ_c は、円盤が壁に正面衝突したときの衝突時間 [74] にほぼ等しいと仮定すると、 l_{sl} は、 $l_{sl} = v_t(0)\tau_c = \pi(R/c)\sqrt{\ln[4c/v_n(0)]}$ となる。よって接線方向の衝撃 $J_t \equiv \mathbf{J} \cdot \mathbf{t}$ は、

$$J_t = M\{(1 - \eta)^{\rho l_{sl}}\}v_t(0) \simeq -\eta M \rho l_{sl} v_t(0) \quad (32)$$

と計算される。ここで η は小さい量であると仮定した。また法線方向の衝撃 $J_n \equiv \mathbf{J} \cdot \mathbf{n}$ ははねかえり係数 e を用いて $J_n = -M(e + 1)v_n(0)$ と計算される。

さて法線方向及び接線方向の衝撃から定義 $\mu = J_t/J_n$ に従って摩擦係数 μ を計算すれば、

$$\mu = \frac{\pi\eta_0\rho R}{1+e} \frac{\Psi_1}{1+\beta\Psi_1^2} \sqrt{\frac{\Psi_1^2}{1+\Psi_1^2} \ln\left(40\sqrt{1+\Psi_1^2}\right)} \frac{|v(0)|}{c} \quad (33)$$

という形になる。ここで、 $\cos\gamma = \sqrt{1/(1+\Psi_1^2)}$ 、及び $\sin\gamma = \sqrt{\Psi_1^2/(1+\Psi_1^2)}$ という関係を用いた。この式において、はねかえり係数 e はシミュレーションの結果 (図 12 の×印)、 $|v(0)|/c$ は 0.1 という値を用いる。フィッティングパラメータとして、 $\beta = 0.21$ 、 $\eta_0\rho R = 0.18$ という値を用いると、図 15 の実線を描くことができる。このように我々の単純化した摩擦のモデルでシミュレーション結果を再現することができる。

以上、この章で紹介した筆者らの研究結果は以下のようにまとめられる。

1. はねかえり係数が衝突角度によって上昇し、1 をなめらかに越えるためには壁の局所的な変形が必要であり、その変形量を理論的に見積もることによって、衝突角度とはねかえり係数の関係を得ることができた。
2. 衝突角度とはねかえり係数の関係には壁表面の摩擦係数が関係しており、衝突角度と摩擦係数の関係も簡単なモデルで説明できる。

特にはねかえり係数と衝突角度の関係に関しては、静弾性理論に基づいた解析を行なったが、壁表面に生じる局所変形の時間的変化が円盤の反発挙動にどう影響するのかを理論的に考察するのは興味深い試みである。

6 小さな系の3次元衝突

ここまでの議論で、巨視的な物体の衝突現象に対する先行研究の紹介と2次元の弾性体モデルを用いた筆者らの解析を紹介したが、この章では微視的な系の衝突現象を扱う。

数個から数百個程度の原子や分子の集合体はクラスターと呼ばれ、その液体とも固体とも異なる中間的な物質の物理的・化学的性質が、実験や数値シミュレーションで調べられている。例えば、ナノスケール程度のサイズを持つクラスター同士の凝集やシリコン等の基板上への蒸着は、ナノスケールの電子デバイスの開発過程においても重要なプロセスであり、分子動力学法等の数値的手法を用いてそれらの衝突ダイナミクスが調べられている [86]。

ナノスケール程度のサイズを持つ微小な系の衝突現象は、巨視的な系の衝突現象と違って、そのダイナミクスが熱揺らぎに大きく影響されるという特徴がある。また分子間力等の相互作用に起因するクラスター同士の吸着が起りやすくなるのもその特徴の一つと言える。そのような系が示す衝突現象において、自由度間のエネルギーの受け渡しがどのように変化し、巨視的な物質の衝突現象と違った衝突モードが出現するかということを探ることは、物理学の見地から見ても面白い問題だと思われる。

一般的な物体同士の衝突においては、衝突前の運動エネルギーの一部が衝突時間中に物体の内部自由度に分配され、一旦内部自由度に分配されたエネルギーは物体の並進自由度には戻ってこない。このような衝突の事を私達は非弾性衝突と呼んでいる。非弾性衝突を、並進自由度からそれ以外の自由度への不可逆的なエネルギー移動現象であると見なせば、非弾性衝突は熱力学第二法則と密接に関係していることがわかる。温度 T を持つ2つの物体を相対速度 V で互いに正面衝突させる状況を考えよう。この時、熱力学第二法則は次のように書くことができるだろう。

$$\frac{1}{2}\mu V^2 + O(T) \geq \frac{1}{2}\mu V'^2. \quad (34)$$

ここで μ は2物体の換算質量であり、 V' は衝突後の相対速度である。巨視的な物体の衝突の場合、式 (34) の左辺第2項の影響は小さく、熱力学第二法則という制約があるために衝突後の速度は衝突前の速度よりも必ず小さくなる。したがって巨視的な物体の反発係数を計測すれば必ず1よりも小さな値を取るようになる。

しかし、もし物体のサイズがナノスケールで、熱揺らぎがダイナミクスに大きく影響するようになると、式 (34) の左辺第2項の影響は無視できなくなるだろう。その時、熱力学第二法則は確率的な制約になる。言い換えると、内部自由度から並進自由度へのエネルギーのフィードバックが有限の確率で起りうるものであり、その時にはねかえり係数が1以上の値を取る様な「異常反発」とでも呼べるような現象が観測されることになる。

筆者らは分子動力学法に基づくナノクラスターの衝突シミュレーションを行い、衝突速度や温度等の初期条件やクラスター間の相互作用によって、反発を特徴付ける量がどのように変わるのかを調べている。また近年、熱揺らぎが支配的となるような小さな系の振る舞いにおいて、負のエントロピー生成率が出現する確率を定量する「揺らぎの定理」が非平衡物理における重要な成

果の一つとなっているが [87]、この章では非弾性衝突における揺らぎの定理と我々のシミュレーション結果との比較についても紹介したい [88]。

6.1 モデル

ここで我々の衝突モデルを紹介する。我々の用いたシミュレーションモデルは図 16 に示すようなレナード・ジョーンズ粒子から構成される、同質な 2 つのクラスターである。座標軸は 2 つのクラスターの重心を結ぶ方向を Z 軸とする。1 つのクラスターを構成する 682 個の「原子」は面心立方の初期配置を取り、「原子」同士はレナード・ジョーンズポテンシャル、

$$U(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (35)$$

で結合している。ここで、 r_{ij} はクラスターを構成する粒子 i, j 間の距離、 ϵ は結合エネルギー、 σ は原子直径を表している。

2 つのクラスター間の相互作用は以下のようにモデル化する。上部クラスター C^u の下表面上の粒子 k と下部クラスター C^l の上表面上の粒子 l の間には、次のような粒子間距離 r_{kl} に依存する相互作用が働くとする。

$$R(r_{kl}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{kl}} \right)^{12} - C \left(\frac{\sigma}{r_{kl}} \right)^6 \right] \quad (36)$$

すなわち、通常のレナード・ジョーンズ相互作用に吸着パラメータ C を導入し、クラスター間に働く吸着をコントロールできるようにクラスター間相互作用をモデル化した。

このモデルを用いた基本的なシミュレーションのセットアップは次の通りである。まず 2 つのクラスターを $Z = 0$ 面に対して鏡面对称に配置する。そしてクラスターを構成する各粒子に、マックスウェル-ボルツマン分布に従う乱数による初期速度を与え、その分散に相当する初期温度を与える。そして速度スケールリング法 [89, 90] で熱平衡化した後に、並進速度を与え 2 つのクラスターを互いに正面衝突させる。2 つのクラスターが反発して並進速度が一定になった時に、衝突前後のクラスター重心の相対速度の z 成分の比から反発係数を計算する。

計算はクラスターの構成粒子の運動方程式を、速度ベルレ法を用いて時間刻み $dt = 1.0 \times 10^{-2} \sqrt{\sigma^2 m / \epsilon}$ で解いた。また計算時間の短縮のため、レナード・ジョーンズ相互作用のカットオフを $\sigma_c = 2.5\sigma$ で入れた。データのサンプル平均は、初期温度として与えるマックスウェル-ボルツマン分布に従う、全粒子の初期速度の組を変えることで複数のサンプルを取り、その平均を計算することで取った。長さ、質量、及び時間はそれぞれ σ 、一粒子の質量 m 、及び $\sqrt{\sigma^2 m / \epsilon}$ で無次元化し、パラメータの値はアルゴンの値と比較して¹² シミュレーションを行った。

6.2 シミュレーション結果

ここでは前章で導入したクラスターモデルによる衝突シミュレーションの結果を紹介するが、まずはクラスター間の相互作用である式 (36) において、 $C = 0.0$ とした時 (つまり斥力相互作用の

¹²アルゴンの場合 $\sigma = 3.4 \times 10^{-10}$ [m], $m = 6.69 \times 10^{-26}$ [kg], $\epsilon = 1.65 \times 10^{-21}$ [J].

國仲 寛人

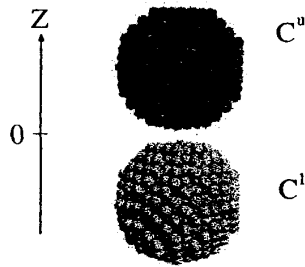


図 16: レナード・ジョーンズ粒子から構成されるクラスターモデル。各クラスターは 682 個の構成粒子から成る。

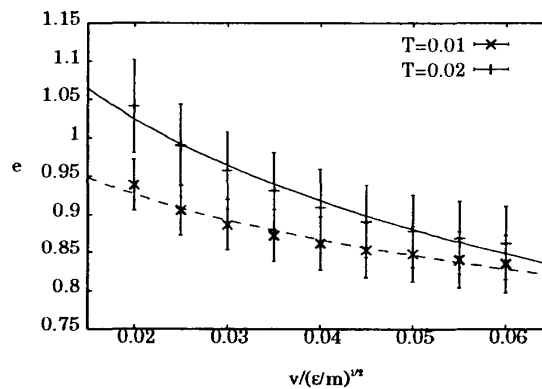


図 17: クラスターの衝突速度と反発係数の関係. $C = 0.0$, 初期温度 $T = 0.01\epsilon$, 及び $T = 0.02\epsilon$ の場合.

みが働く時)の結果を示す。

6.2.1 斥力相互作用のみの場合の衝突

図 17 に示すのは衝突速度と反発係数の関係である。反発係数は衝突前後の相対速度の Z 成分の比を用いて、 $e = -V'_z/V_z$ で定義する。また図 17 には、クラスターの初期温度として $T = 0.01\epsilon$ と $T = 0.02\epsilon$ の二つの場合を示した。サンプル平均は、各速度に対して粒子に温度として与える初期速度の組を 100 通り変化させ、100 サンプルのデータを平均した。これよりクラスター間に斥力のみ相互作用が働く時に、はねかえり係数は衝突速度に対して単調に減少する傾向が見られることがわかる。これは巨視的な物体同士の衝突でも見られる傾向である。

シミュレーションで得られた衝突速度とはねかえり係数の関係を、低速衝突の準静理論 [25] の結果と比較した。これは巨視的な物体同士が互いに正面衝突した時に、物体が衝突時に受ける力を、Hertz 理論に基づく弾性力と、内部粘性に由来する散逸力の和で表せると仮定し、それによって物体に生じる歪の時間発展から、衝突後の速度を求めるものである。それによると、衝突速度 V と

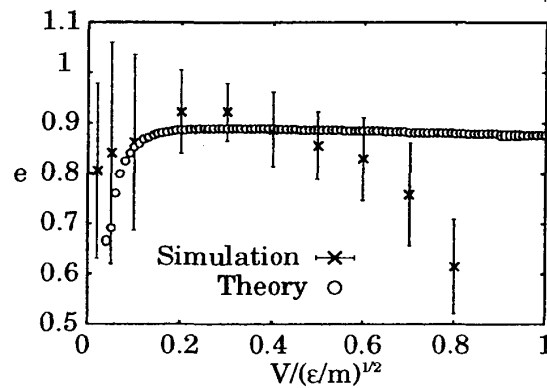


図 18: クラスターの衝突速度と反発係数の関係。 $C = 0.2$ 、初期温度 $T = 0.02\epsilon$ の場合。

反発係数 e の関係は、

$$e \simeq \alpha_1 - \alpha_2 \left(V / \sqrt{\epsilon/m} \right)^{1/5} \quad (37)$$

と表すことができる。ここで α_1 は通常 $\alpha_1 = 1$ であり、 α_2 は物性値で決まる定数である。ここでは、 α_1, α_2 をフィッティングパラメータとしてデータのフィットを行った。

図 17 の実線と破線は、それぞれ $(\alpha_1, \alpha_2) = (1.744, 1.572), (1.323, 0.869)$ で式 (37) をプロットしたものである。これからわかるように式 (37) によるデータのフィットはよいが、 α_1 の値は 1 よりも大きな値になる。これは低速の衝突において、反発係数の平均値が 1 以上になることを表している。実際に初期温度 $T = 0.02\epsilon$ の時、衝突速度 $V = 0.02\sqrt{\epsilon/m}$ の時はねかえり係数の平均値は 1.04 となった。

6.2.2 引力相互作用がある場合の衝突

では、式 (36) において $C > 0.0$ となる時に衝突速度とはねかえり係数の関係はどうなるであろうか？我々は $C = 0.2$ [86] という弱いクラスター間引力が働く場合について同様のシミュレーションを行い、その関係を探った [91]。

図 18 は初期温度 $T = 0.02\epsilon$ の場合について行ったシミュレーションの結果である。これよりクラスター間に引力が働く場合には、はねかえり係数と衝突速度の関係はある衝突速度においてピークが見られることがわかる。これは衝突速度が小さい時には、衝突時において凝着力の影響が大きいため反発時の速度が大きく減少するが、衝突速度が大きくなるにつれて凝着力によるエネルギーよりも初期の運動エネルギーが勝るようになるためである。

図 18 内の白丸は、ブリリアントフ (N. V. Brilliantov) らによる引力相互作用を考慮した衝突理論による結果である [92]。これは巨視的な物体同士の衝突に関して、衝突中の物体に Hertz の接触理論に基づく弾性力と内部粘性由来の散逸力に加えて、JKR (Johnson-Kendall-Roberts) 理論 [93] に基づいた凝着力が働くとして、やはり変形の時間発展¹³からはねかえり係数を見積もるといふものである。この時、衝突物体の表面張力と粘性係数が必要になるが、表面張力はクラスター

¹³実際には接触半径の時間変化を求め、そこから全体の変形を計算する。

國仲 寛人

間の引力相互作用から見積もった $\gamma \simeq 0.026\epsilon/(m\sigma)$ という値を用い [94]、粘性係数はフィッティングパラメータとした。

図 18 内の白丸は粘性係数をフィッティングパラメータとしてフィットした結果であるが、特に衝突速度が大きくなるとはねかえり係数の衝突速度依存性はかなり小さくなり、データとの一致はよくない。表面張力の見積もりや、系のサイズによる表面の多角形の形状の効果などがその原因として考えられるが、その影響を探る事は今後の課題である。

6.3 揺らぎの定理との比較

ここで、 $C = 0.0$ の場合に関して反発係数の出現確率について定量的な議論を試みる。熱揺らぎの影響が無視できないような小さな系においては、有限の確率でエントロピーが減少する現象が観測されることが知られており、それを定量するのがゆらぎの定理 [87] である。これを非弾性衝突に適用したものは、次のようになる [95]。

$$\exp(\beta W) P(X_0 \rightarrow X_1) = \bar{P}(\bar{X}_1 \rightarrow \bar{X}_0). \quad (38)$$

ここで、 β は逆温度を表している。 X_0, X_1 はそれぞれ重心自由度の初期状態と終状態を表しており、 $P(X_0 \rightarrow X_1)$ は初期状態 X_0 から終状態 X_1 に遷移する確率分布である。また、 $\bar{P}(\bar{X}_1 \rightarrow \bar{X}_0)$ は、衝突を時間反転した時に、終状態から初期状態に戻る確率分布を表す。 W は衝突により重心自由度が失う (または内部自由度が獲得する) エネルギーを表し、

$$W = \frac{1}{2} MV^2(1 - e^2) \quad (39)$$

で表される。このように W は $1 - e^2$ の関数で表すことができるので、 $1 - e^2$ の出現確率分布 $P(1 - e^2)$ と、衝突を時間反転した時の $\bar{P}(1 - e^2)$ とを求めて、式 (38) の成立を確かめる。

シミュレーションは初期温度 $T = 0.02\epsilon$ 、 $T = 0.03\epsilon$ のそれぞれの場合について行った。衝突速度 $V = 0.02(\epsilon/m)^{1/2}$ で衝突させ、初期の高さにクラスタが戻ってきたら e を測定し、もう一度熱平衡化した後に重心速度を反転させて、反発係数 \bar{e} を測定する。これを 1 サンプルとし、初期の各粒子に与えるマックスウェル-ボルツマン分布に従う初期速度のセットを 3000 サンプル用意し、更に初期配向を $\theta = 0, \pi/8, \pi/4$ と変え、計 9000 サンプルのデータを平均した。図 19、20 にそれぞれ初期温度 $T = 0.02\epsilon$ 、 $T = 0.03\epsilon$ の時の結果を示す。横軸に $1 - e^2$ 、縦軸に $\ln \bar{P}/P$ を取った。実線は各温度に対して、 $1 - e^2$ と W の関係をプロットしたものである。これを見ると両端の領域では一致は悪いものの、中間領域の一致は悪くないことがわかる。ただしシミュレーション初期の速度スケールによる熱平衡化の際にクラスタに励起される回転が反発に大きく影響するため、データの直線からのずれに影響することがわかっている。また、式 (39) の W の計算において、重心自由度のエネルギーに加えて重心まわりの回転自由度のエネルギーとクラスタ間の相互作用のエネルギーの項を入れて式 (38) の成立を確かめた [88]。この時は図 19 や 20 に示したデータよりは直線的なデータが得られたが、式 (38) との一致はあまりよくはなかった。この事は用いた系において重心自由度と内部自由度がうまく分離できていない事に起因している可能性もあり、サイズ依存性や粒子間の相互作用依存性等を含めて更に調べる必要がある。

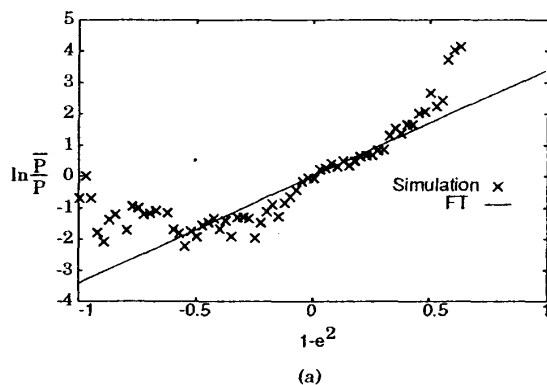


図 19: ゆらぎの定理との比較。 $T = 0.02\epsilon$ の場合。

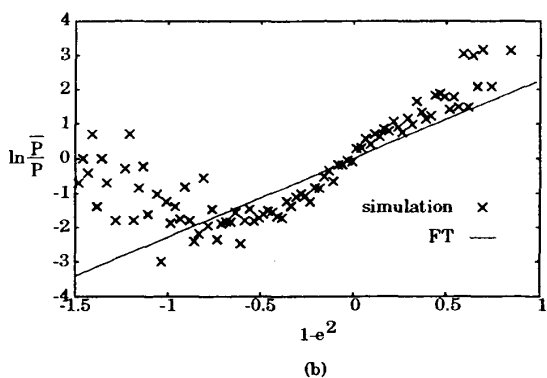


図 20: ゆらぎの定理との比較。 $T = 0.03\epsilon$ の場合。

7 議論と今後の展望

本稿では、衝突研究の歴史的経過と筆者らの近年の研究成果を紹介した。第4章、第5章では第3章で導入したばね-質点モデルに基づく2次元弾性体モデルを用いた衝突シミュレーションの結果を紹介したが、本稿のモデルは2次元モデルのため3次元の実験結果とは定量的な比較ができないという欠点がある。物体の次元が上がることによって、エネルギー散逸の割合が大きく変わることは容易に想像でき、実験結果との比較を試みるのであれば、3次元のモデルを構成した上でシミュレーションを行うことが必要である。第3章で紹介した拡張個別要素法や粒子法、有限要素法等に基づいた3次元の弾性衝突シミュレーションを行うことが必要であろう。ただし粒子ベースのモデリングで3次元物体を構築すると、2次元よりも粒子数が増え、計算により長い時間を要するという問題があるため、それを克服するには、計算上の工夫が必要になる。

第4章、第5章における我々のシミュレーションにおいては、初期回転がない状態で衝突速度や衝突角度のはねかえり係数への依存性を探った。だが、第1章でも触れたように初期回転が反発に与える影響を調べることは興味深い。初期の回転自由度のエネルギーと並進自由度のエネルギーの割合が法線方向や接線方向のはねかえり係数にどう影響するのか、また自由度間のエネル

國仲 寛人

ギー遷移はどうなっているのかということを実験やシミュレーションで探ることは面白い試みであると思う。

また、これまで均質な物質の衝突のみを考えてきたが、内部構造のある物体の衝突現象に対する理論的な考察も面白い研究テーマとなるだろう。2003年6月、米メジャーリーグの試合において当時シカゴ・カブスのサミー・ソーサは芯にコルクをつめた違法バットを試合で用いて退場処分を受けたが、コルクをつめたバットは選手の間ではボールを遠くへ飛ばすバットだと信じられており、それが何故か？という問いかけはスポーツ科学や物理学の研究者の関心を惹いた [96]¹⁴。コルクバットやゴルフのツーピースボールのような層状の構造を持つ物体が衝突した時に、内部に生じる弾性波動の伝わり方が衝突後の運動にどう影響するかという問題は、弾性学のテーマとしても面白い問題であると思う。

第6章では2つの同質なレナード・ジョーンズクラスターの衝突シミュレーションを行い、クラスター間の相互作用が、クラスターの衝突速度とはねかえり係数の関係に及ぼす影響について紹介した。更にクラスター間に斥力相互作用のみが働いたときの反発係数の出現確率に基づいて、非弾性衝突のゆらぎの定理とシミュレーション結果との比較を試みた。クラスター間の相互作用が斥力相互作用のみの場合、低速の衝突速度領域において反発係数が1以上になるサンプルを観測することがわかったが、そのような衝突が起こったときにクラスター内部のストレス場の変化やどのような振動モードが励起されているのかを微視的に調べることは今後の課題である。また凝着力が働く場合の衝突に関して、第6章では $C = 0.2$ の場合の結果のみを報告した。観測しうる衝突モードが、 C が様々な値を取ったときにどのように変化するかを調べ [91]、更にその変化が衝突速度や温度にどのように依存するかを調べる事は興味深く、更なるシミュレーションによる解析も今後の課題として残されている。

謝辞

本稿に多数の有益なコメントをしていただいた共同研究者の早川尚男教授（京都大学基礎物理学研究所）と、野坂京子氏（物性研究刊行会）に謝意を表したい。

参考文献

- [1] 安田徳太郎訳・編. 新訳ダンネマン大自然科学史1. 三省堂, 東京, 1978.
- [2] W. Goldsmith. *Impact: The Theory and Physical Behavior of Colliding Solids*. Edward Arnold Publ., London, 1960.
- [3] W. J. Stronge. *Impact Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [4] Sir H. マッセイ. 原子・分子の衝突. 共立出版, 東京, 1981.

¹⁴様々な理由付けが考えられているが、単純にバットの先端部分に異物を詰める事によってバット全体の重さが軽くなり、且つ重心の位置がグリップの方向に移動するため慣性モーメントが小さくなって、バットを振ったときにヘッドスピードが大きくなるからという説明もある [97]。

- [5] 岡村定矩他編. 人類の住む宇宙 (シリーズ現代の天文学 I) . 日本評論社, 東京, 2007.
- [6] L. P. Kadanoff. Built upon sand: Theoretical ideas inspired by granular flows. *Rev. Mod. Phys.*, 71:435–444, 1999.
- [7] P. G. de Gennes. Granular matter: a tentative view. *Rev. Mod. Phys.*, 71:S374–S382, 1999.
- [8] H. M. Jaeger, S. R. Nagel, and R. P. Behringer. Granular solids, liquids, and gases. *Rev. Mod. Phys.*, 68:1259–1273, 1996.
- [9] 田口善弘. 砂時計の七不思議 - 粉粒体の動力学. 中央公論社, 東京, 1995.
- [10] 早川尚男・那須野悟. 現代物理最前線 1 (大槻義彦編) . 共立出版, 東京, 2000.
- [11] 早川尚男. 散逸粒子系の力学. 岩波書店, 東京, 2003.
- [12] J. デュラン (中西秀・奥村剛訳) . 粉粒体の物理学. 吉岡書店, 京都, 2002.
- [13] P. B. Umbanhowar, F. Melo, and H. L. Swinney. Localized excitations in a vertically vibrated granular layer. *Nature*, 382:793–796, 1996.
- [14] A. Daerr and S. Douady. Two types of avalanche behaviour in granular media. *Nature*, 399:241–243, 1999.
- [15] O. Moriyama, N. Kuroiwa, M. Matsushita, and H. Hayakawa. 4/3 law of granular particles flowing through a vertical pipe. *Phys. Rev. Lett.*, 80:2833–2836, 1998.
- [16] Y. Yamazaki, S. Tateda, A. Awazu, T. Arai, O. Moriyama, and M. Matsushita. Dynamics of granular flow through a vertical pipe under the control of inflow rate. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 71:2859–2862, 2002.
- [17] 編集委員会編. 物理学大辞典. 丸善株式会社, 東京, 1995.
- [18] K. L. Johnson. *Contact Mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [19] E. Hodgkinson. On the collision of imperfectly elastic bodies. *Brit. Assoc. Report*, 4:534–543, 1834.
- [20] J. H. Vincent. Experiments on impact. *Proc. Cambridge, Phil. Soc.*, 10:332–357, 1900.
- [21] C. V. Raman. The photographic study of impact at minimal velocities. *Phys. Rev.*, 12:442–448, 1918.
- [22] F. G. Bridges, A. Hatzes, and D.N.C. Lin. Structure, stability and evolution of saturn’s rings. *Nature*, 309:333–335, 1984.

國仲 寛人

- [23] K. D. Supulver, F. G. Bridges, and D. N. C. Lin. The coefficient of restitution of ice particles in glancing collisions: Experimental results for unfrosted surfaces. *ICARUS*, 113:188–199, 1995.
- [24] R. Sondergaard, K. Chaney, and C. E. Brennen. Measurements of solid spheres bouncing off flat plates. *Trans. of the ASME, J. Appl. Mech.*, 57:694–699, 1990.
- [25] G. Kuwabara and K. Kono. Restitution coefficient in a collision between two spheres. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 26:1230–1233, 1987.
- [26] N. V. Brilliantov, F. Spahn, J.-M. Hertzsch, and T. Pöschel. Model for collisions in granular gases. *Phys. Rev. E*, 53:5382–5392, 1996.
- [27] W. A. M. Morgado and I. Oppenheim. Energy dissipation for quasielastic granular particle collisions. *Phys. Rev. E*, 55:1940–1945, 1997.
- [28] T. Schwager and T. Pöschel. Coefficient of normal restitution of viscous particles and cooling rate of granular gases. *Phys. Rev. E*, 57:650–654, 1998.
- [29] R. Ramírez, T. Pöschel, N. V. Brilliantov, and T. Schwager. Coefficient of restitution of cooling viscoelastic spheres. *Phys. Rev. E*, 60:4465–4472, 1999.
- [30] F. Gerl and A. Zippelius. Coefficient of restitution for elastic disks. *Phys. Rev. E*, 59:2361–2372, 1999.
- [31] M. Y. Louge and M. E. Adams. Anomalous behavior of normal kinematic restitution in the oblique impacts of a hard sphere on an elastoplastic plate. *Phys. Rev. E*, 65:021303–1–021303–6, 2002.
- [32] J. Calsamiglia, S. W. Kennedy, A. Chatterjee, A. Ruina, and J. T. Jenkins. Anomalous frictional behavior in collisions of thin disks. *J. of Appl. Mech.*, 66:146–152, 1997.
- [33] H. Kuninaka and H. Hayakawa. Anomalous behavior of the coefficient of normal restitution in oblique impact. *Phys. Rev. Lett.*, 93:154301–1–4, 2004. see also *Phys. Rev. Focus* 14, 14 (2004); *Nature*, 431 (2004) 1051.
- [34] Linley Erin Hall, editor. *The Laws of Motion: An Anthology Of Current Thought (Contemporary Discourse in the Field of Physics)*. Rosen Pub. Group, New York, 2005.
- [35] L. Labous, A. D. Rosato, and R. N. Dave. Measurements of collisional properties of spheres using high-speed video analysis. *Phys. Rev. E*, 56:5717–5725, 1997.
- [36] A. Lorentz, C. Tuozzolo, and M. Y. Louge. Measurements of impact properties of small nearly spherical particles. *Exp. Mech.*, 37:292–298, 1997.

- [37] S. F. Foerster, M. Y. Louge, H. Chang, and K. Allia. Measurements of the collision properties of small spheres. *Phys. Fluids*, 6:1108–1115, 1994.
- [38] O. R. Walton and R. L. Braun. Viscosity, granular-temperature, and stress calculations for shearing assemblies of inelastic, frictional disks. *J. Rheol.*, 30:949–980, 1986.
- [39] O. R. Walton. Numerical simulation of inelastic, frictional particle-particle interactions. In M. C. Roco, editor, *Particulate Two Phase Flow*, pages 884–907, Boston, 1992. Butterworth-Heinemann.
- [40] N. Maw, J. R. Barber, and J. N. Fawcett. The oblique impact of elastic spheres. *Wear*, 38:101–114, 1976.
- [41] N. Maw, J. R. Barber, and J. N. Fawcett. The role of elastic tangential compliance in oblique impact. *J. Lub. Tech.*, 103:74–80, 1981.
- [42] H. Kuninaka and H. Hayakawa. Simulation for the oblique impact of a lattice system. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 72:1655–1663, 2003.
- [43] P. A. Cundall and O. D. L. Strack. A discrete numerical model for granular assemblies. *Géotechnique*, 29:47–65, 1979.
- [44] 伯野元彦. 破壊のシミュレーション-拡張個別要素法で破壊を追う-. 森北出版株式会社, 東京, 1997.
- [45] 粉体工学会編. 粉体シミュレーション入門. 産業図書, 東京, 1998.
- [46] ロバート・アデア (中村和幸訳). ベースボールの物理学. 紀伊国屋書店, 東京, 1996.
- [47] I. Newton. *Philosophiae naturalis Principia mathematica*. W. Dawson and Sons, London, 1962.
- [48] ガリレオ・ガリレイ著 (今野武雄・日田節次訳). 新科学対話. 岩波書店, 東京, 1960.
- [49] エルンスト・マッハ. マッハ力学史. 筑摩書房, 東京, 2006.
- [50] 安田徳太郎訳・編. 新訳ダンネマン大自然科学史 4. 三省堂, 東京, 1978.
- [51] M. Marci. *De Proportione Motus*. Prague, 1639.
- [52] 安田徳太郎訳・編. 新訳ダンネマン大自然科学史 5. 三省堂, 東京, 1978.
- [53] H. Hertz. Über die berührung fester elastische körper. *J. Reine Angew. Math.*, 92:156–171, 1882.

國仲 寛人

- [54] A. E. H. Love. *A Treatise on the Mathematical Theory of Elasticity*. Cambridge Univ. Press, 1927.
- [55] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Theory of Elasticity (2nd English ed.)*. Pergamon, 1960.
- [56] K. Saitoh and H. Hayakawa. Rheology of a granular gas under a plane shear. *Phys. Rev. E*, 75:021302-1-021302-11, 2007.
- [57] <http://news.bbc.co.uk/1/hi/magazine/7022464.stm>.
- [58] C. Clanet, F. Hersen, and L. Bocquet. Secrets of successful stone-skipping. *Nature*, 427:29-29, 2004.
- [59] S. Nagahiro and Y. Hayakawa. Theoretical and numerical approach to magic angle of stone skipping. *Phys. Rev. Lett*, 94:174501-1-174501-4, 2005.
- [60] G. Kuwabara, H. Tanaka, and K. Kono. Splash produced by a smooth sphere od circular cylinder striking a liquid surface. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 56:2733-2743, 1987.
- [61] 永弘進一郎. 物体と流体表面の衝突過程の数値的および理論的研究. PhD thesis, 東北大学, 2004.
- [62] P. Aussillous and D. Quéré. Liquid marbles. *Nature*, 411:924-927, 2001.
- [63] Y. Tanaka, Y. Yamazaki, and K. Okumura. Bouncing gel balls: impact of soft gels onto rigid surface. *Europhys. Lett.*, 63(1):146-152, 2003.
- [64] S. Yamamoto, K. Wada, N. Okabe, and T. Matsui. Transient crater growth in granular targets: An experimental study of low velocity impacts into glass sphere targets. *Icarus*, 183:215-224, 2006.
- [65] K. Wada, H. Senshu, and T. Matsui. Numerical simulation of impact cratering on granular material. *Icarus*, 180:528-545, 2006.
- [66] <http://ls-dyna.jri-sol.co.jp/>.
- [67] G. R. Johnson and R. A. Stryk. Conversion of 3d distorted elements into meshless particles during dynamic deformation. *Int. J. Impact Eng.*, 28:947-966, 2003.
- [68] A. Norton, G. Turk, B. Bacon, J. Gerth, and P. Sweeney. Animation of fracture by physical modeling. *Visual Computer*, 7:210-219, 1991.
- [69] 塚越誠一. 粒子法 (計算力学レクチャーシリーズ5). 丸善株式会社, 東京, 2005. 日本計算工学会編.

- [70] Y. Hayakawa. Numerical study of oscillatory crack propagation through a two-dimensional crystal. *Phys. Rev. E*, 49:R1804–R1807, 1994.
- [71] Y. Hayakawa. Pattern selection of multicrack propagation in quenched crystals. *Phys. Rev. E*, 50:R1748–R1751, 1994.
- [72] W. G. Hoover. *Computational Statistical Mechanics*. Elsevier Science, Amsterdam, 1991.
- [73] H. Kuninaka and H. Hayakawa. The impact of two-dimensional elastic disk. *J. of Phys. Soc. Jpn.*, 70:2220–2221, 2001.
- [74] H. Hayakawa and H. Kuninaka. Simulation and theory of the impact of two-dimensional elastic disks. *Chem. Eng. Sci.*, 57:239–252, 2002.
- [75] H. Kuninaka. The analysis of the coefficient of restitution for the two-dimensional elastic disk. Master's thesis, Kyoto University, 2000.
- [76] H. Kuninaka. *Theoretical and Numerical Studies of Inelastic Impacts of Elastic Materials*. PhD thesis, Kyoto University, 2004.
- [77] H. Hayakawa and H. Kuninaka. Coefficient of restitution of elastic disks. In Y. Kishino, editor, *The proceedings of powders and grains 2001*, pages 561–564. Rotterdam: Balkema, 2001.
- [78] H. Hayakawa and H. Kuninaka. Simulation of the impact of two-dimensional elastic disks. In *The proceedings of the ninth nisshin engineering particle technology international symposium*, pages 82–95, 2001.
- [79] H. Kuninaka and H. Hayakawa. Simulation of the impact of two-dimensional elastic disks. In M. Fukui, Y. Sugiyama, M. Schreckenberg, and D. E. Wolf, editors, *The proceedings of Traffic and Granular Flow 2001*, pages 467–472, Berlin, 2003. Springer.
- [80] 杉原厚吉. データ構造とアルゴリズム. 共立出版, 東京, 2001.
- [81] H. Hayakawa and H. Kuninaka. Theory of inelastic impact of elastic materials. *Phase Trans.*, 77:889–909, 2004.
- [82] H. Kuninaka and H. Hayakawa. Contact and quasi-static impact of hamilton system. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 75:074001–1–074001–5, 2006.
- [83] K. Sugihara. *Data Structure and Algorithms(in Japanese)*. Kyoritsu, Japan, 2001.
- [84] G. Sundararajan. The energy absorbed during the oblique impact of a hard ball against ductile target materials. *Int. J. Impact Engng*, 9:343–358, 1990.

國仲 寛人

- [85] L. A. Galin. *Contact problems in the theory of elasticity*. Gostekhizdat, Moskow, 1953.
- [86] A. Awasthi, S. C. Hendy, P. Zootjens, S. A. Brown, and F. Natali. Molecular dynamics simulations of reflection and adhesion behavior in lennard-jones cluster deposition. *Phys. Rev. B*, 76:115437-1-115437-11, 2007.
- [87] D. J. Evans and D. J. Searles. The fluctuation theorem. *Adv. Phys.*, 51:1529-1585, 2002.
- [88] H. Kuninaka and H. Hayakawa. arXiv:0707.0533.
- [89] L. V. Woodcock. Isothermal molecular dynamics calculations for liquid salts. *Chem. Phys. Lett.*, 10:257-261, 1971.
- [90] S. Nosé. Constant temperature molecular dynamics methods. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, (103):1-46, 1991.
- [91] H. Hayakawa and H. Kuninaka. arXiv:0805.0176.
- [92] N. V. Brilliantov, N. Albers, F. Spahn, and T. Pöschel. Collision dynamics of granular particles with adhesion. *Phys. Rev. E*, 76:051302-1-051302-12, 2007.
- [93] K. L. Johnson, K. Kendall, and A. D. Roberts. Surface energy and the contact of elastic solids. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 324:301-313, 1971.
- [94] J. N. イスラエルアチヴィリ. 分子間力と表面力. 朝倉書店, 東京, 1996.
- [95] H. Tasaki. Fluctuation relation, jarzynski-type equality, and the second law for general collision problems. In *RIMS workshop: Micro-macro duality in quantum calculus*, number 1507, pages 102-117, Kyoto, 2006. RIMS, Kyoto Univ.
- [96] <http://wiredvision.jp/archives/200306/2003060602.html>.
- [97] <http://webusers.npl.uiuc.edu/~a-nathan/pob/>.