

A206 粒状材料に対するセルオートマトンモデル

Cellular Automaton Model for Granular Material

○ 阪口 秀 (オーストラリア CSIRO) 正 村上 章 (岡山大)
高須賀俊之 (北海道開発局)

Hide SAKAGUCHI, CSIRO Division of Exploration and Mining, Perth, WA, Australia
Akira MURAKAMI, Okayama University
Toshiyuki TAKASUKA, Hokkaidou Kaihatsukyoku

A brief review of the cellular automata models for granular materials is given, then we introduce a cellular automaton to model as a numerical particle method, Connected Lattice Cellular Automaton (CL-CA), which has been specially developed for the pattern formation analysis in granular flow. In the CL-CA model, polygon particles which consist of multiple connected lattices are considered. The dynamics of the motion of a CL-CA particle is described by CA rules in two way: passive rule and active rule. A simple flow test as an example is shown. The model gives results consistent with established observations.

Key Words : Cellular Automaton, Granular Material, Size, Shape, Granular Flow

1. は じ め に

砂や砂利といった地盤材料、穀物、顆粒状の薬品など人間の生産活動には、一つの粒は原子や分子と違って目に見える大きさの多量の粒子からなる物質を扱う場面が多い。このように大きな粒子からなる多粒子系（以下、これを粒状体と呼ぶ）は固体や流体のいずれにも範疇分けが中途半端であるため、その力学体系がきちんと整わないまま現在に至っている¹⁾。

したがって一般的に粒状体の工学的予測のための計算では固体力学や流体力学と同様、連続体仮説に基づいた手法が流用されることが多い²⁾。しかしながら、粒子1つの大きさが着目する系全体に対して有意なサイズである場合、粒状体内部の応力分布は決して連続的ではなく、大きな応力と小さな応力が隣接しながら網の目状の応力分布を呈することなどが知られている。また、粒状体の本質的な挙動である局所的な大変形や破断、分離、すべり、回転、流動といった固体的な性質から流体的な性質まで一連の性質を構成式で表現すること自体も難しく、連続体仮説に基づいた手法の粒状体への応用は幾つかの限界が存在する³⁾。

一方、材料工学における分子動力学のように粒子間に働く相互作用から第一原理に基づいて原子や分子の運動を逐次追跡するいわゆる数値粒子法は、計算機の大規模化、高速化に伴い、固体力学などの分野で多くの成果を収めてきた⁴⁾。数値粒子法の最も大きな利点は、大変形や破壊、破壊後の挙動などを一貫して同じ枠組みで取り扱えることである。

分子動力学と同じ原理の数値粒子法は個別要素法という名前で粒状体にも拡張され⁵⁾ 様々な分野で応用されている。原子や分子レベルでの粒子系と粒状体のような粒子系において粒子の振る舞いに関する決定的な違いは粒子間力の存在範囲と粒子の幾何学である。前者では粒子は常に離れていて粒子間の距離の関数で粒子間力が決ま

る。一方後者も厳密な意味では離れているのであるが、接触している粒子間でのみ力のやりとりが行われる。別の言葉で述べると、個々の粒子の形状や大きさと隣接粒子の配置によってきまる幾何学的情報と、隣接粒子間の相対移動によって生じる接触点での運動が現象を支配するのである。したがって、粒状体の数値粒子法である個別要素法では粒子の接触判定と接触点に発生する力の算定といった分子、原子レベルの分子動力学には無い計算が必要とされる⁶⁾。当然のことながら、多数の粒子に対するこれらの逐次計算量は膨大なものとなり、実用上問題となることが多い。

このような背景の下、筆者らは、分子動力学で中心的な位置を占める第一原理に基づいた粒子運動の逐次追跡ではなく、上述した粒状体に特有な緒量である個々の粒子の形状と大きさと隣接粒子との相対的な位置交換に関する情報だけに着目した粒状体のための新しい数値粒子法のモデルの開発を目指している。多数の粒子に対して、粒子の幾何学的情報と隣接粒子間の位置交換を簡単なルールで記述し、全体の時間発展を追うための計算にはセルオートマトン的な手法が適していると考えられる。

本論文では、粒状体の挙動を表現したセルオートマトンモデルの研究のレビューを行い、さらに筆者らによって開発された粒状体のセルオートマトンモデルの一つである CL-CA(Connected Lattice Cellular Automata) 法⁷⁾ について説明し、いくつかの粒状体の問題に対する CL-CA 法の応用例を示す。

2. 粒状体のセルオートマトンモデルの研究

粒状体のセルオートマトンモデルの原型は、概念的なものとして Litwiniszyn の重力下で堆積した粒状体流動の確率モデルの研究に遡る⁸⁾。当時はまだ昨今のようにコンピュータも発展していなかったため、粒子の運動ルールを微分方程式で表現し所定の境界条件の下で解いたも

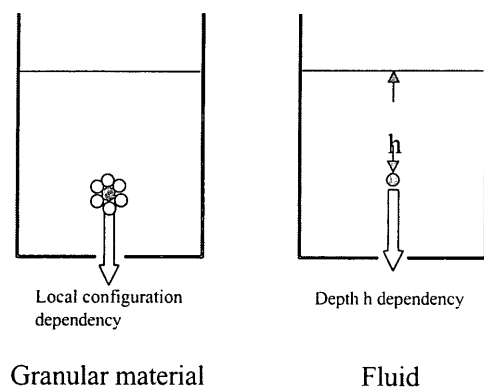


Fig. 1 Granular flow and fluid flow

のであるが、そのルールの与え方は後に Caram と Hong によって CA 化へと発展した⁹⁾。これらの研究に共通する点は、重力下での粒状体の流動は着目粒子の下方に移動スペースがあるか否かというローカルな条件だけでその運動を記述していることである。これは非常に簡略化された仮定ではあるが、水深に依存する容器の底から流出する水の運動とは全く異なるダイナミクスを表現していることになる (Fig. 1 参照)。

一方、流体の流れ場を解くために流体粒子を格子空間に配置し、衝突則と位置交換を CA ルールで表現した Lattice Gas Automaton モデル¹⁰⁾を粒状体に応用した研究も一時盛んに行われた。この中で、Baxter と Behringer は粒子の細長い粒子を意識したモデルで異方性の導入を試みた^{11), 12)}。また Savage は正三角形格子ではなく、正方形格子を用いたモデルで粒状体の流動を表現したり、粒度偏析などのシミュレーションを行った¹³⁾。しかしながら、いずれも 1 つの粒子は 1 つの格子状に表現されたもので、粒子自体に大きさを有しておらず、一つの特異な効果を出すために特別な CA ルールを準備しなければならないなど粒状体に普遍的なモデルとは呼びがたいものが多かった。

そこで Sakaguchi らは、幾つかの格子を連結して 1 つの粒子を表現することによって粒状体粒子に大きさと形を与える CL-CA (Connected Lattice Cellular Automata) 法⁷⁾を提案した。CL-CA 法によって、粒状体が有する粒子径効果の典型的な現象であるチェスナット効果 (大小の粒子が混在する粒状体を振動させたときに大きい粒子が上層部に浮遊する粒度偏析現象) を粒度偏析の CA ルールを準備することなく表現することに成功した。また、CL-CA 法を用いたシミュレーションで、古くから実際に観察される粒状体の振動による対流現象や斜面の形成¹⁴⁾なども再現された。

ここまでに紹介した粒状体の CA モデルは主として粒状体流動のダイナミクスを CA 化したもので、粒状体内に生じる応力の分布や伝播などを説明できるものではな

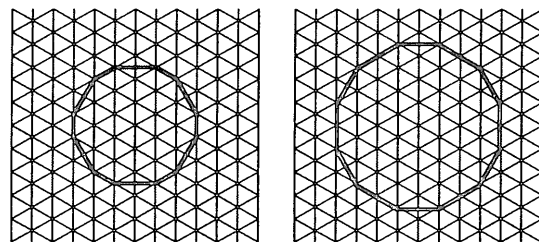


Fig. 2 Small particle

Fig. 3 Large particle

かった。そこで、Hemmingsson & Herrmann は Vectorial cellular automaton と呼ばれる CA を提唱し、重力下で安息角で安定状態にある粒状体の堆積層内部に生じる応力の分布の表現に応用した¹⁵⁾。この問題に対して、村上らも CL-CA 法を、粒状体層への板の落とし込みと押し込み問題を扱えるように拡張し、同時に個別要素法のように粒子の重なりを許すことによって、粒子間力分布の指標となる結果を得た¹⁶⁾。

次節以下、この CL-CA 法について詳しく述べる。

3. CL-CA 法の概要

CL-CA 法では計算時間の短縮と計算機の記憶容量の節約のために、2 次元の Lattice Gas Automaton 法と同じように粒子は正三角形の格子の上で最近接格子点間だけを運動するものとする。そこで、この格子上に大きさを有する粒子を考えるには、幾つかの格子点をまとめて 1 つの粒子と考えればよい。Fig. 2, Fig. 3 にその例を示す。図中の実線上と実線で囲まれる領域内部に存在するすべての格子点上に 1 つの粒子を構成する粒子点があり、すべての粒子点が同じ速度を持つものとする。しかし、実際に計算に必要な情報は、粒子の代表速度と実線上に存在する粒子点の位置だけで十分である。よって以下では、粒子とはある大きさを持った連結多格子粒子を意味し、粒子の速度とはその代表速度を意味することにする。

粒子は 1 ステップ間に最近接格子点だけに移動するか静止しているものとする。従って、単位時間ステップ内での粒子の速度はメッシュの方向性に大きく依存し、極めて自由度の低い運動しか表現できないように見えるが、時間ステップでの疎視化を図ることでこの不都合はある程度解消される。しかし、1 格子 1 粒子モデルにこの考えを当てはめると、常に個々の粒子自身の大きさだけ揺れながら運動することになってしまう。一方多数の格子点を連結して 1 つの粒子を構成すれば、この揺らぎは粒子自身の大きさよりも常に小さいことになり、離散化に伴う不都合の解消に役立つことが分かる。

次に粒子の移動に関する CL-CA ルールについて述べる。CL-CA では LGA と違って粒子が常に運動していて衝突を繰り返すものではない。これは流体粒子と粒状体粒子の本質的な違いでもある。CL-CA ルールの基本は、

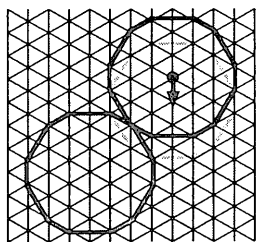


Fig. 4 Overlap

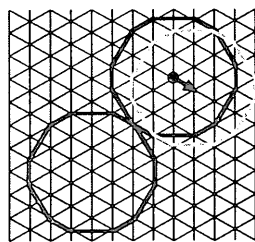


Fig. 5 Active rule

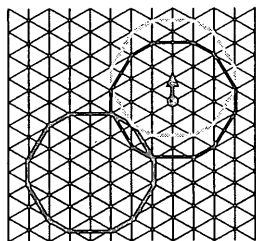


Fig. 6 Moving direction 1

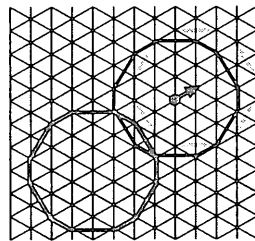


Fig. 7 Moving direction 2

「粒子は動ける空間があれば動く」である。

初期の CL-CA モデルでは、粒子運動のドライビングフォースに重力のような特定方向の物体力が想定され、粒子は重なりが生じない動ける空間を探しながら動くルールが適応された。例えば、Fig. 4 で右上の粒子が重力によって真下に動こうとすると左下の粒子と重なりを生じってしまう。このような場合は、Fig. 5 のように重なりを生じない他の方向に動かすルールである。以下ではこのルールを *active rule* と呼ぶ。

一方、村上らによって拡張された CL-CA ルール¹⁶⁾は、境界から押し込まれるような状況で粒子間に強制的に重なりが生じた場合にその重なりを解消する方向に粒子を動かすというもので、これを *passive rule* と呼ぶものとする。

Active rule と *passive rule* に共通して次のようなケースが生じるが、これについてもルールを決めておく必要がある。それは、

1. 1つの粒子に対して動ける方向が2つ以上ある。
2. 1つの動ける格子を2つ以上の粒子が共有する。の2点である。

1のケースは、Fig. 6, Fig. 7 に示すように重なりが解消される方向が2通り以上ある場合である。このような場合は、慣性力を反映させるために前ステップでの運動方向を優先させるなど、優先順位を決めておく。優先順位が同じものがさらに複数ある場合は乱数で決める。

また、2のケースは、すべての粒子の位置更新を同時に行うのではなく、位置更新を行う順序を与える優先順位を決めることによって、格子の共有つまり粒子の重なりを防ぐことができる。この位置更新の優先順位は、次のように決める。

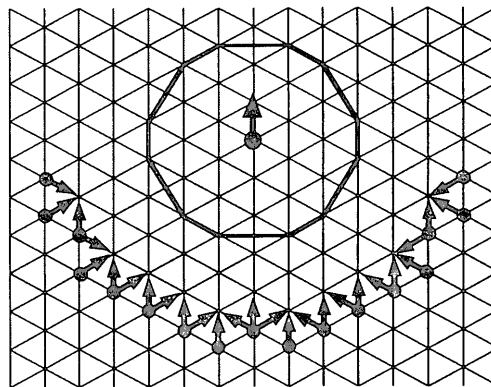


Fig. 8 Upward pushing

まず、すべての粒子についてローカルな位置関係だけから定まる移動方向を与え、これを仮移動方向とする。この仮移動方向に対して、静止、慣性、重力を考慮して優先順位を与え、1のケースと同様に同位のものに対しては乱数でその順位を決めてゆく。

以上が *active rule* と *passive rule* に共通なルールで、次に *active rule* と *passive rule* に固有なルールを簡単に説明する。

まず *active rule* の場合であるが、この場合は着目した粒子について移動できる6方向ないしは重力を意識した下向き3方向について移動後に重なりが生じないかチェックする。このとき、妨害となりうる相手の粒子の動きは考慮する必要はない。なぜなら、後に位置更新の優先順位が与えられるからである。

次に、境界からの押し込みなどによった粒子の重なりを解消する方向に粒子を移動させてゆく *passive rule* について説明する。まず、基本的に *passive rule* の場合も重力の存在など物体力を考慮する場合は *active rule* を踏襲する。その上で、さらに与えられた粒子の重なりを解消する方向を探す。これには着目粒子と、その着目粒子と重なりを生じせしめた原因粒子の動きを考える必要がある。Fig. 8 は、ある着目粒子を真上方向に動かすために必要な重なりを生じる原因粒子の存在位置と速度のすべてを矢印で示している。原因粒子の動きによって着目粒子の可能移動方向が決まる。複数の原因粒子がある場合は共通の可能移動方向をとるか静止させる。これと周辺の移動妨害の有無を調べることによって仮移動方向を決定し後は前述した方法に従う。

4. 例 題

前節までに説明した CL-CA ルールにしたがって粒状体の流動問題の計算例を示す。

混合比率 1 : 1 の大小の粒子 540 個を容器の中で重力パッキングし、安定したパッキングが得られてから側壁の一つをはずして流動させる。以下、Fig. 9, Fig. 10, Fig.

11 に流動の遷移を示すスナップショットを与える。

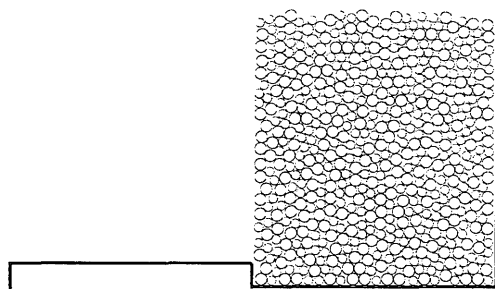


Fig. 9 Flow problem—initial

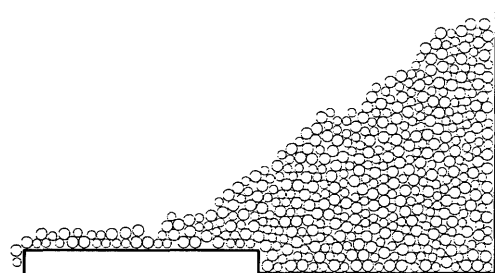


Fig. 10 Flow problem—stage 1

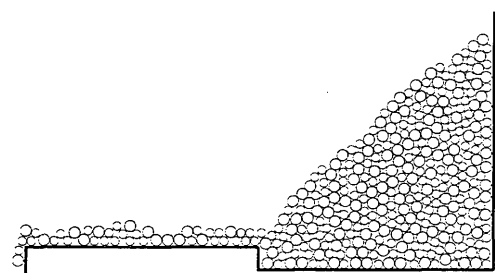


Fig. 11 Flow problem—stage 2

この流動パターンはアルミ棒を用いて計算とまったく同じ条件で行われた実験と酷似した流動パターンを示した。

5. お わ り に

粒状材料に対するセルオートマトンモデルを幾つか紹介し、特に CA-CL 法の手法とその特徴について述べ、いくつかの実例を示した。その結果、分子動力学や個別要素法のように個々の粒子に対する運動方程式を解かないでも、粒状体の流動パターンについては CL-CA 法で追跡できることが明らかになった。これは、粒状体の運動は個々の粒子の形状と大きさとその組み合わせが支配的であることを物語っている。

しかしながら、これだけからでは、単に粒状体の流動に良く似たパターンがコンピュータ上に発生しただけ、どこまで粒状体の本質をつかんでいるのか分からない。事実、ここで紹介したモデルは、粒子の回転を全く許さな

いものである。しかし、それでも実現象と類似したパターンが生じるのは、実際の粒状体も粒子回転があまりないのか、他の粒子間スリップなどとキャンセルして結果として合っているだけなのか明確にしてゆかなければならない。

文 献

- (1) Mehta, A. (ed.), *Granular Matter: An Inter-disciplinary Approach*, Springer-Verlag, 1994.
- (2) Zienkiewicz, O.C. and Taylor, R.L.: *The finite element method: Solid and fluid mechanics and non-linearity*, London, McGraw-Hill, 1991.
- (3) Wieckowski, Z. and Klisinski, M.: Finite Deformation Analysis of Motion of Granular Material in Silo, *Archives of Mechanics*, 47, pp.617–633, 1995.
- (4) Rapaport, D.C.: *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press, 1995.
- (5) Cundall, P.A. and Strack, O.D.L.: A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, 29, pp.47–65, 1979.
- (6) Ristow, G.H.: Granular dynamics: a review about recent molecular dynamics simulations of granular materials, *Annual Reviews of Computational Physics*, 1, pp.275–308, 1994.
- (7) Sakaguchi, H., Murakami, A., Hasegawa, T. and Shirai, A.: Connected lattice cellular-automaton particles: A model for pattern formation in vibrating granular media, *Soils and Foundations*, 36, 1, pp.105–110, 1996.
- (8) Litwiniszyn, J.: Application of the equation of stochastic processes to mechanics of loose bodies, *Mechaniki Stosowanej Bd.*, VIII, Heft 4, pp. 393–411, 1956.
- (9) Caram, H. and Hong, D.C.: Random-walk approach to granular flows, *Phys. Rev. Lett.*, 67, pp.828–831, 1991.
- (10) Frisch, U., Hasslacher, B. and Pomeau, Y.: Lattice-gas automata for the Navier-Stokes equation, *Phys. Rev. Lett.*, 56, pp.1505–1508, 1986.
- (11) Baxter, G.W. and Behringer, R.P.: Cellular automata models of granular flow, *Phys. Rev. A*, 42, pp.1017–1020, 1990.
- (12) Baxter, G.W., Behringer, R.P., Fagert, T. and Johnson : Pattern formation and time-dependence in flowing sand, *Two Phase Flows and Waves* (Joseph, D.D. & Schaeffer D.G., eds.), pp.1–29, 1990.
- (13) Savage, S.B.: Disorder, diffusion and structure formation in granular flows, *Disorder and Granular Media*, Bideau, D. and Hansen, A. (eds.), Amsterdam, North-Holland, pp.255–285, 1993.
- (14) Rajchenbach, J., Clément, E. and Duran, J.: Experimental study of bidimensional models of sand, *Int. J. Mod. Phys.*, B7, pp.1949–1963, 1993.
- (15) Hemmingsson, J., Herrmann, H.J. and Roux, S.: Vectorial cellular automaton for the stress in granular media, *J. Phys. I France*, 7, pp.291–302, 1997.
- (16) 村上 章, 松岡明日香, 青山成康, 阪口 秀: 連結格子セルオートマトン (CL-CA) による粒状体挙動解析と接触力分布, *農業土木学会論文集*, 208, pp.137–143, 2000.
- (17) 高須賀俊之: 連結格子セルオートマトンによる粒状体の挙動解析, 修士論文, 岡山大学, 2000.