

粉体振動モデルの粒子シミュレーション解析*

3C-7

○内藤 涉 志田晃一郎 藤川 英司 山田 新一†

武蔵工業大学‡

1. はじめに

私たちの研究の成果の価値を大きく左右するシミュレーション表現は、近年特に物理・化学分野で進歩が著しく、現象の視覚化が可能となってきた。本研究は「粉体への微小振動付加による層パターン形成」をわかりやすくシミュレートする方法の考察及び同現象の解析を目的とする。

2. 理論

モデルである粉体問題の研究は多量粉体に微小振動を付加すると、表面にスロープ状の層を形成し安定するか、相転移をおこし不安定になるかなど様々な挙動の解析を行うものである。19世紀のFaradayから150年あまり研究されているが、衝突効果のみでシミュレーションを成功させた例の報告は今出されていない。場の仮定など直接的に導けない条件の導入は、シミュレーション利用を複雑にする1つの要因となる。

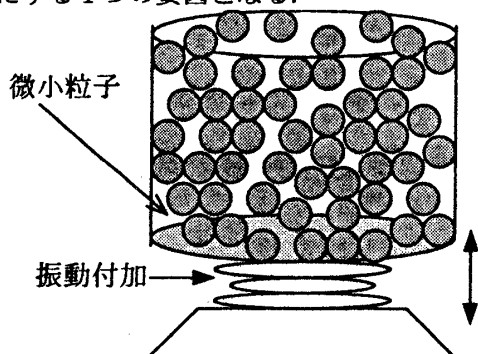


図1 粉体振動の基本モデル

図1のようにコップ状容器内に重い粒子、軽い粒子2種類を多数混入する。下方から微小振動を断続的に与え続けると、振動の程度、容器内粒子の初期状態に大きく依存するが、適当な条件に対して重質量粒子層が軽質量粒子層の上位に形成される場合が見られることがある。つまり粒子は振動の度、個々の粒子の衝突により粒子は自由な投げ上げ、落下運動を行う。本来は2体衝突で重量粒子が下方へ落下する場合は確率的に多く、したがって下方に重い粒子、上方に軽い粒子が分布するのが当然に思われることに矛盾する。

3. 解析

一般に粒子の衝突は高校物理レベルの衝突を示す運動方程式を核とする。またシミュレーションに用いる多体衝突の式は以下の通りである。

$$\sum_i m_i \frac{\vec{v}_i}{|\vec{r}_i|^3} \vec{r}_i + \vec{F}_{gi} = \sum_i m_i \vec{a}_i$$

(m_i : 粒子の質量, \vec{r}_i : 粒子の位置ベクトル,

\vec{a}_i : 加速度 \vec{v}_i : 粒子の質量, \vec{F}_{gi} : 重力)

多くの粒子挙動では粒子全体にマクロな場を仮定する。本研究では単純に衝突の影響のみでシミュレーションできるかどうかの可能性を確認することを内容の1つとしている。そのため場の支配方程式は仮定しない。

後述の条件を仮定しシミュレーションを行った。しかしデバッグ、プログラムの修正をしても計算が収束せず暴走する。原因は粒子がある程度接近すると各粒子が同一計算時間内で無限回数の衝突を繰り返すからである。

現在までは粒子の個数を減らし挙動の細かい分

* Analysis of Molecular Dynamics Simulation with the Powder

† Wataru Naito, Koichiro Shida, Hideji Fujikawa,

Shin-ichi Yamada

‡ Musashi Institute of Technology

析をおこない、粒子の位置によって挙動は大きく3つに大別する。

・振動付加

底面に粒子が衝突すると底面と運動量・エネルギーを授受するが、底面の状態により粒子に付加される速度は大いに異なってくる。

・容器壁面, 粒子どうしの衝突

容器壁面に粒子が衝突すると容器の安定性により粒子は単純に反対方向へはねかえると仮定する。粒子どうしの衝突は粒子の共通接線境界に法線方向での衝突が起こると仮定する。

・自由運動

粒子は容器上面で自由投げ上げを行う。研究当初は位相のずれが生じ容器内に影響を与えるとしていたが、影響の大きさが小さいと判断し、隣接粒子の束縛のない粒子が重力により自由落下をすることを想定する。

4. シミュレーション

粒子を減らしたシミュレーションを私は2種類を行った。1つは1粒子を単体で振動させるもの(図2)、もう1つは1次元系列で直列的衝突のもの(図3)である。シミュレーションのアルゴリズムは共通項を取ると以下の通りである。

1. 底面にある粒子に初期速度を付加
 2. 粒子の存在位置を把握
 3. 状況に応じて次の挙動を指示
- 1~3を短いタイムステップで確認する

その結果は以下の通りである。

まず前者に関しては挙動に大きく3パターンあることがわかった。1つは同一振幅の定常的状态, 1つは挙動収束または発散, また不規則のように見える規則的挙動である。私はこの挙動をカオス的挙動の一種と考え、空間軌道に軌跡を構成するようにデータ処理したところ、周期性を含みながらも時間的に不安定な挙動を観測した。これはカオスを裏付けるローレンツアトラクタと比較し、カオス挙動の一種と判断できる。

後者に関しては粒子を等間隔に高さ方向に配置して最下位にある粒子に振動を付加したところ、粒子が上方で接近することは事前に想定できたが、結果として粒子が結合してしまいスタッキングを起こす。粒子の衝突が無限回起きているために、

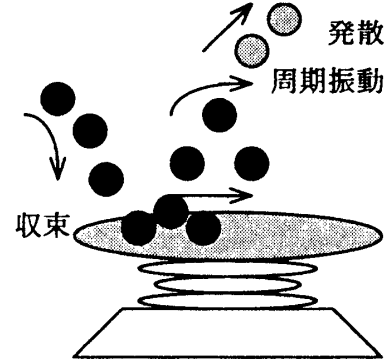


図2 1粒子の台上での挙動

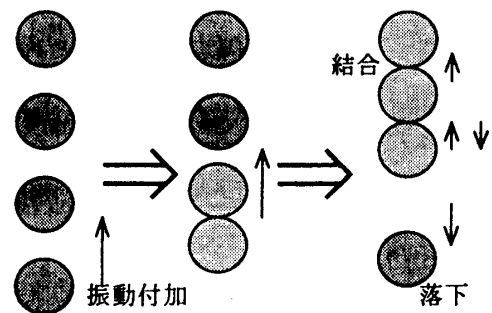


図3 1次元列の粒子の衝突

計算が止まるだけではなく、上記で条件に掲げているマクロな流れの場を仮定しないと粒子は集中する傾向があるといえることになる。速度が一致点に集中するのでエネルギースペクトルは局所的に増大することが予想されるが、計算上でその結果が裏付けられる結果も得られた。

5. おわりに

粒子自体の衝突の効果のみでシミュレーションが実現できるかどうかは、粒子のクラスタリングが原因で粒子の集中化現象が様々な形で現れ、不可能であることがわかった。また少数粒子での粒子振動実験では振動入力と粒子挙動の、振幅・位相状態によって様々な挙動が表れ、カオティックな現象も確認できた。CG上で同現象は再現できるが、プリンタ出力方法に今後工夫を要する。