

多分散系の摩擦シミュレーション

上田光生, 湯川諭

大阪大学大学院 理学研究科 宇宙地球科学専攻

概要

現在、レオロジーの立場から摩擦について計算機を用いた研究が多くなされている。それらの研究では、摩擦係数の大きさは速度の冪乗で大きくなるという報告がよく聞かれる。しかし、実際の実験から速度に応じて摩擦係数が小さくなる、速度弱化的な振る舞いをする摩擦則もあることがわかっている。本研究では、実験をもとに構成された摩擦構成則のミクロな起源を調べるため、分子動力学法を用いたシミュレーションにより、半径比の異なる弾性円盤に定圧条件下でずりをかけることで摩擦係数を調べた。粒子の半径比と摩擦の大きさの関係を調べた結果、半径比の分散が小さい領域では摩擦は速度弱化的な振る舞いが、分散が大きい領域では速度強化的な振る舞いが見られた。

Numerical Simulation of Friction with Polydisperse Particles

Mitsuo Ueda and Satoshi Yukawa

Department of Earth and Space Science, Graduate School of Science, Osaka University

Abstract

Recently, there have been many studies on frictional phenomena from a rheological viewpoint: In these studies, a frictional constant sometimes exhibits power-law dependence on a shear rate. In an experimental study, it is sometimes observed that the frictional coefficient is decreasing as increasing a sliding velocity which is called as “a velocity-weakening friction”. In this article, we investigate such frictional behavior from a microscopic viewpoint using a molecular dynamics simulation of two-dimensional elastic bidisperse disk systems. We find behavior of velocity weakening in small size dispersities. In addition, velocity strengthening behavior is also observed in large size dispersities.

1 はじめに

現在、複雑な物理現象が解明されているにもかかわらず、私達の身近な物理現象である摩擦のメカニズムはわかっていないことが多い。摩擦は様々な物理現象と深く関連しており、その解明は地震の発生の理解などにも重要な役割りを担うと期待されている。数値計算による摩擦の研究に関して言えば、粉体系ではマクロな摩擦係数 (= 接線応力 / 法線応力) は速度の冪乗で大きくなる領域がある [1, 2] ことがわかっている。また粉体系に限らず、層構造

をもった系においても、摩擦係数は速度に関して冪乗で大きくなるという報告がある [3]。

岩石を用いた摩擦の実験の1つに、摩擦面の状態に応じて、摩擦の大きさがすべり速度に対して大きくなる速度強化的な振る舞いをする摩擦や、すべり速度に対して小さくなる速度弱化的な振る舞いの摩擦があることを示しているものがある。この実験結果をもとに Dietrich らが提案された摩擦構成則が、すべり速度-状態依存の摩擦構成則である。[4, 5]

$$\phi = c + a \log(v/v^*) + b \log(\theta/\theta^*) \quad (1)$$

ここで a, b, c は物質パラメータとなる正の定数、 v は速度である。この構成則で注目すべき点は状態変数 θ を導入した点である。この θ は現象論的な変数であり、時間に依存するものとなっている。 v^* と θ^* はそれぞれ系の特徴的な速度と状態変数であり、系の特徴的な長さ L を用いて $\theta^* = L/v^*$ と書く。また、状態変数 θ の発展則についても様々な提案がなされている。その代表的なもの2つに、スローネス則とすべり則という発展則がある。スローネス則は式 (2)、すべり則は式 (3) のようにかける

$$\frac{d\theta}{dt} = 1 - \frac{v\theta}{L} \quad (2)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = -\frac{v\theta}{L} \log\left(\frac{v\theta}{L}\right) \quad (3)$$

この2つの発展則を用いたすべり速度-状態依存の摩擦構成則は速度弱化的な摩擦、速度強化的な摩擦の両方を再現している。

2 モデル

上述のような摩擦を調べるために、本研究で用いたモデルは次のようなものである。二次元空間に粒子をつめ、一方の境界は同じ粒子をつめた壁ではさみ、もう一方の境界には周期境界条件を課した。そして、その壁にずりをかけることで摩擦面が動いていることを表現した。また、壁が法線方向に自由に動き、その方向に一定の外力を加えることで、系の内部の圧力は一定に保たれている。粒子間の相互作用は Hertz の接触理論 [6] から $V(x) = Y(x_0 - x)^{5/2}$ ($x \leq x_0$), $V(x) = 0$ ($x > x_0$) と定義した。但し、 x は2つの粒子の中心間距離、 x_0 は2粒子の半径の和である。そして、ヤング率 Y を十分に大きくとることで、固い弾性円盤の粒子であるとしている。また、散乱によるエネルギーの散逸はない。また、系のエネルギーを一定に保つため、系の中心に能勢-フーバーの熱浴 [7] をつけた。

今回は、2つの異なる半径を持つ同数個の粒子をこのモデルにつめてずりをかけ、その半径分散値と摩擦係数の関係を調べた。それぞれの粒子の半径を r_1, r_2 ($r_1 \geq r_2$)、粒子の平均半径を $r_0 = (r_1 + r_2)/2$ としたとき、半径分散値 $\delta r = (r_1 - r_2)/r_0$ と定義し、摩擦係数は定常状態において実現される壁の接線応力を σ 、法線応力を p の比、 σ/p と定義した。また、剛体円盤粒子の平衡系における固液相転移 (アルダー転移 [8]) に関する研究のうちの1つに、系に含まれる粒子の半径分散との関係を調べたものがある [9]。そ

れによると、ある臨界半径分散値 ($\delta r = r_c \sim 0.135$) を境にアルダー転移における固液共存領域がなくなることが示されている。3の計算結果ではその臨界分散値との関係についても考察する。今回のシミュレーションに用いたパラメータを表1に示す。

ヤング率 Y	1×10^4
粒子の質量 m	1
粒子の平均半径 r	1
粒子の半径分散 δr	0 to 0.2
内部粒子数 N	2048
1つの壁の粒子数 N_w	32
壁に与える外力 g	$9.8 \times N_w$
熱浴の設定温度 K_0	5×10^{-1}
熱浴の時間スケール τ	1
積分のタイムステップ Δt	1×10^{-3}

表1: シミュレーションに用いた物理量と積分計算のパラメータ

3 計算結果

壁の速度と摩擦係数の関係の半径分散の依存性を図1に表す。単分散系 $\delta r = 0$ では $\gamma \geq 0.8$ で摩擦係数が小さくなっていることがわかる。よって、粒子の半径分散が小さいと、摩擦係数は速度弱化的な振る舞いとなっている。また、半径分散が大きくなると速度強化的な振る舞いであると言えるだろう。また、臨界分散値 $r_c \sim 0.135$ を境に速度弱化と速度強化がわかれているようにみえる。

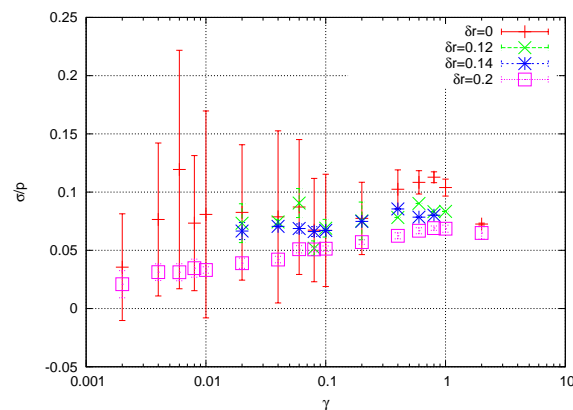


図1: ずり速度と摩擦の関係。横軸はずり速度 γ 、縦軸は摩擦係数、 δr は粒子の半径分散。誤差棒はサンプルゆらぎを示す。

図2に系内部の速度分布を示す。単分散系 $\delta r = 0$ では中心付近は固まっており、多分散系 $\delta r = 0.2$ では全体的に溶けているようにみえる。多分散系と単分散系の摩擦の定性的な振る舞いの違いは、この違いが関係するのではないかと1つ考えることができる。一方、能勢フーバーの熱浴は $y = 0$ の位置につ

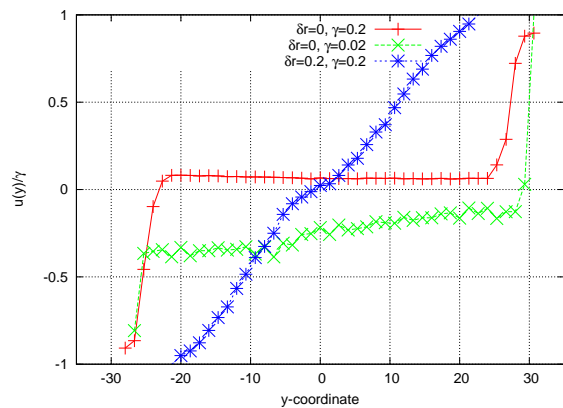


図2: 速度分布。横軸は壁に垂直な座標である y 座標。縦軸は位置 y における平均速度 $u(y)$ をずり速度 γ で規格化したもの。+、 \times は $\delta r = 0$ のとき、* は $\delta r = 0.2$ のときの速度分布。

いている。速度分布の端の位置がそれぞれ異なるのは、壁が自由に動くためである。

次に系の内部構造をより詳しく見るために、粒子の衝突角度分布を調べた。図3は単分散系 $\delta r = 0$ での粒子の衝突角度の頻度分布、図4は多分散系 $\delta r = 0.2$ における衝突角度分布をプロットしたものである。縦軸方向は壁に垂直な方向、横軸は平行な方向に対応する。単分散系でずり速度 $\gamma = 0.2$ のと

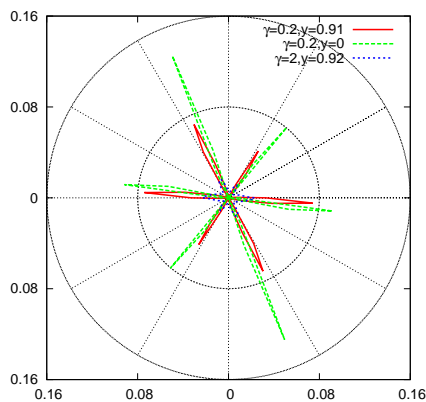


図3: 単分散系 $\delta r = 0$ の衝突角度頻度分布。 y は系の中心を0、壁の位置を1としたときの座標。 γ はずり速度。

きは壁付近と中心付近共に、最密結晶構造をとっていることがわかる。また、ずりを妨げる方向に力の強い方向あるようにみえる。 $\gamma = 2$ の壁付近は溶けた状態となっている。つまり、 γ が小さい領域ではストレス鎖が系全体に形成され、壁の速度が速くなると壁付近のストレス鎖がくずれ、そのことが速度弱化的摩擦則のメカニズムとなっていると考えられる。一方、多分散系 $\delta r = 0.2$ では $\delta r = 0$ の時に比べ全体的に溶けているが、弱い構造は保ったままである。 $\delta r = 0$ のときほど強い構造はなく、これがずり速度が小さい領域で $\delta r = 0.2$ のときより $\delta r = 0$ の摩擦係数が弱い所以ではないかと考えられる。実際、粒子間相互作用の大きさの分布も衝突角度分布とよく一致している。

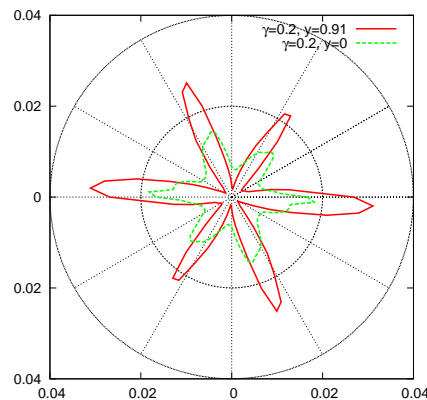


図4: 多分散系 $\delta r = 0.2$ での衝突角度頻度分布。 y は系の中心を0、壁の位置を1としたときの座標。 γ はずり速度。

4 まとめ

粒子半径に分散性を与え、固い弾性円盤にずりをかけたシミュレーションでは速度弱化的摩擦と速度強化的摩擦の両方が現れることがわかった。そして半径分散値が小さい領域では速度弱化的な摩擦、大きい領域では速度強化的な摩擦が実現される。さらに、速度依存性の境は平衡系で気液共存ができる半径分散値の臨界分散値と一致しているように思われる。今後はこの臨界分散値付近についてより詳しく調べる必要がある。また、速度弱化的メカニズムは、系内部に形成されるストレス鎖が大きく寄与しているのではないかと考えられる。

参考文献

- [1] T. Hatano, M. Otsuki, and S. Sasa, J. Phys. Soc. Jpn. **76**, 023001, (2007).
- [2] T. Hatano, Phys. Rev. E **75**, 060301, (2007).
- [3] H. Yoshino, H. Matsukawa, S. Yukawa, and H. Kawamura, cond-mat/0709.3883.
- [4] J. H. Dietrich, J. Geophys. Res. **84**, 2161-2168, (1979).
- [5] A. Ruina, J. Geophys. Res. **88**, 359-370, (1983).
- [6] H. Hertz, J. Reine Angew. Math. **92**, 156, (1882).
- [7] Wm. G. Hoover 原著, 小林進 監訳, 志田晃一郎 訳, 計算統計力学, 森北出版株式会社, (1999).
- [8] A. J. Alder and T. E. Wainwright, Phys. Rev. **127**, 2 (1962).
- [9] W. Vermöhlen and N. Ito, Phys. Rev. E **51**, 4325, (1995).