

平成30年6月14日現在

機関番号：11301

研究種目：研究活動スタート支援

研究期間：2016～2017

課題番号：16H06628

研究課題名(和文)せん断変形下で降伏する粉体の非平衡ダイナミクス 粘弾性挙動と雪崩の解明

研究課題名(英文)Nonequilibrium dynamics of granular materials yielding under shear - viscoelastic response and avalanches

研究代表者

齊藤 国靖 (Saitoh, Kuniyasu)

東北大学・数理科学連携研究センター・准教授

研究者番号：10775753

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,300,000円

研究成果の概要(和文)：粉体の複雑な振舞いを微視的に理解するため、分子動力学法を用いて、せん断変形下で降伏する粉体の非アフィン速度の統計的性質を調べた。特に、非アフィン速度の集団的な振舞いや渦構造が観測される降伏状態において、強い空間相関が現れる事が解り、エネルギースペクトルが波数に対してべき減衰を示し、ストレスの強い非線形性の裏にはマイクロな乱流構造が潜んでいることを見出した。高密状態における強い空間相関のため、従来の運動論は成立せず、分子動力学法によって高密度粉体のマイクロな運動を直接調べることによって、降伏応力の発生と微視的構造の関係解明によって、非アフィン速度の乱流的な振る舞いとレオロジー特性がどう関わるか解明した。

研究成果の概要(英文)：Granular materials are ubiquitous in nature and the rheology of granular materials has a great importance in industry. In this research, we investigate complex dynamics of granular materials by molecular dynamics (MD) simulations. Applying simple shear deformations to the system, we study collective motions and turbulent-like vortex structures of non-affine velocities of granular materials. The complex dynamics of non-affine velocities are directly related to strong spatial correlations. We find that the spatial correlations are significant if the density of granular materials is high and the system is yielding under simple shear deformations. We also reveal the strong connection between the complex dynamics of non-affine velocities and the rheology of dense granular materials.

研究分野：非平衡統計力学

キーワード：粘弾性 乱流 分子動力学法 レオロジー

1. 研究開始当初の背景

粉体は工学や地学など多くの分野で対象とされ、産業での需要も高く、その集団としてのダイナミクスはガラスやサスペンションなどと共に、現在の非平衡統計力学の重要なテーマである。特に、非弾性相互作用によるエネルギー散逸や表面に働く摩擦など、粉体固有の性質はマクロな輸送現象や力学特性の予測を困難にしている。例えば、粉体のレオロジーは密度に強く依存し、ある密度以上では、粉体同士の接触力がマクロな力学応答を支配し、ストレスが強い非線形性を示す降伏状態に陥る（ジャミング転移）。また、粉体の降伏現象は亀裂や破壊を伴うものではなく、離散的な粉体が非アフィンの再配置する事が主な原因である。

この様な粉体の複雑な振舞いを微視的に理解するために、最近、申請者らは分子動力学法による数値計算を用いて、せん断変形下で降伏する粉体の非アフィン速度（平均流周りの速度ゆらぎ）の統計的性質を調べた。そこで、非アフィン速度の集団的な振舞いや渦構造が観測され、降伏状態において強い空間相関を示している事が解った。さらに、エネルギースペクトル（非アフィン速度のスペクトル関数）が波数に対してべき減衰を示し、ストレスの強い非線形性の裏にはミクロな乱流構造が潜んでいることを見出した。

2. 研究の目的

粉体の密度が高く、外場によって流れる場合は、粉体間の接触力が系全体の力学特性に大きく寄与し、粉体気体とは異なるレオロジー特性を示す。例えば、剪断変形に対する系の応答を見ると、ある臨界密度以下では、応力は剪断率の二乗に比例するバグノルド則に従うのに対し、臨界密度以上では応力がほぼ一定に留まる。これは剪断率を限りなく小さくする極限でも応力が有限であることを意味し、降伏応力が発生して固体的に振る舞うジャミング転移としても知られている。この様な高密度状態では粉体同士が強く相関するため、従来の運動論は成立せず、現在でも微視的理論の確立に向けた研究が行われている。一方、分子動力学法によって高密度粉体のミクロな運動を直接調べることもでき、降伏応力の発生と微視的構造の関係解明は重要なテーマである。特に、剪断流の場合に限ると、各々の粉体の速度から平均流を差し引いた「非アフィン速度」が非常に複雑な空間構造を持つことが普遍的に知られ、Radjaiらは初めてエネルギースペクトルを用いてその乱流的な性格を調べた。そこで申請者は、非アフィン速度の乱流的な振る舞いとレオロジー特性がどう関わるか調べた。

3. 研究の方法

分子動力学法で高密度粉体の単純剪断流を再現する。ここで、結晶化を避けるため、粒径の異なる二種類の粉体を準備し、粉体間の法線・接線方向の接触力を、線形バネと相対速度に比例する粘性力でモデルする。さらに、クーロン摩擦も導入し、法線方向の跳ね返り係数と接線方向の摩擦係数をそれぞれ0.7と0.5に設定する。系に剪断を加えると、応力は最初単調に増加するが、歪みが1を超える辺りで降伏し、定常状態に達する。この時、剪断によってエネルギーが注入され、内部では非弾性相互作用によるエネルギー散逸が生じており、これらエネルギー収支がバランスした非平衡定常状態であることが重要である。

4. 研究成果

高密度粉体レオロジーと乱流化

図1は分子動力学法で計算した高密度粉体の非アフィン速度（矢印）の空間分布である。ここに見られる非アフィン速度の協同的な振る舞いと渦構造は、レオロジーを決定するパラメータに強く依存し、特に降伏応力を伴う高密度粉体で顕著に現れる。そこで、複雑な空間構造を定量化するため非アフィン速度を「流れ場」と見なし、流れの統計則がパラメータの値に応じてどう変化するか調べる。まず、非アフィン速度の空間相関関数を計算すると、被覆率を増やす或は剪断率を減らすと共に、関数の減衰が緩やかになることが解る。つまり、高密度粉体の遅い流れにおいて非アフィン速度は最も協同的で、粉体の運動が強く相関する。さらに、エネルギースペクトルを調べると、粉体が強く相関する高密度・低剪断率領域においてのみ冪減衰が観測され（図2(a)）、非アフィン速度の乱流的な空間構造が示唆される。

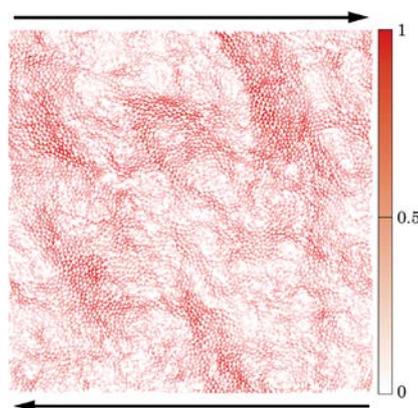


図1：粒子数 8192 個の分子動力学法による粉体の非アフィン速度の空間分布. 上下の水平矢印方向に剪断を加えており、グレースケールは 0~1 にスケールされた非アフィン速度の大きさを表す。

エネルギーカスケード

高密度粉体のエネルギースペクトルの冪減衰は、剪断によるエネルギー注入と非弾性相互作用によるエネルギー散逸の間のカスケードを意味する。これらのエネルギー収支を考え、スケーリングによりスペクトルの冪を説明することもできるかもしれないが、それは次のエンストロフィーカスケードに譲るとし、ここでは現象論的な構成則を用いた解析計算によってスペクトルの振る舞いを説明する。まず、スペクトルの冪減衰が観測される高密度領域では、粉体の個々の運動量に加え、粉体同士の接触力が応力に寄与する。これを踏まえ、Savageは高密度粉体の遅い流れに対する構成則を提案し、応力をバグノルド則に従う運動パートと剪断率に非依存な接触パートに分解した。Savageの構成則を採用し、高密度粉体の流体力学方程式を考えるのだが、ここで流れ場をアフィンの平均流と非アフィン速度に対応するゆらぎに分解する。さらに、密度場と温度場（本来の温度ではなく、運動エネルギーで定義される粉体温度）についても同様状態からのゆらぎを考え、流体力学方程式をゆらぎに対して線形化する。線形化した流体力学方程式にフーリエ変換を適用すると固有値問題に帰着するが、遅い流れに注目するため、剪断率を微小パラメータとした摂動計算を行う。最終的に、剪断率の1次までで求めた固有ベクトル（流体力学モード）の速度成分の2乗により、エネルギースペクトルの解析的な表式が得られる。解析的な表式には構成則のフィッティングパラメータなどが含まれるものの、それらを別途分子動力学法の結果から求めると、高密度・低剪断率領域におけるスペクトルの振る舞いをよく説明するのが解る（図2(a)）。

エンストロフィー

次に、非アフィン速度の渦構造を解析するため、Zhangらの粗視化法を用いて渦度を計算する。降伏する高密度粉体の渦度を可視化すると、非アフィン速度が形成する大小様々な渦構造を反映して空間的に不均一な分布が得られる。また、通常の乱流同様、渦度の分布関数は非ガウスのであり、分布の裾は高密度領域の遅い流れにおいて最も広くなる。この様な渦構造を定量化するため、粗視化法による渦度をフーリエ変換して渦度スペクトルを計算する。ここでもコントロールパラメータに対する依存性を調べるが、エネルギースペクトル同様、やはり高密度・低剪断率領域においてのみ渦度スペクトルの冪減衰が観測される（図2(b)）。いわば、高密度粉体のエンストロフィーカスケードであるが、ここでは大きな渦のエネルギーが追従する小さな渦にカスケードするという乱流描像との接点を考察したい。そこで、簡単なスケーリングから渦度スペクトルの冪減衰を説

明する。まず、粉体の定常的な流れは剪断変形によって維持されるため、剪断によるエネルギー注入率を ε とする。また、注入されたエネルギーは粉体間の粘性力によって散逸されるため、散逸の度合を表す粘性係数を η として導入する。これらのパラメータを用いて渦度スペクトルを表現すると、冪減衰の指数 α が導入される。ところで、剪断によりシステムサイズのスケールでエネルギーが注入される一方、エネルギー散逸は粉体間の非弾性相互作用によって粒子スケールで行われるため、その間のスケールはエネルギーの流入と散逸の無い慣性領域となる。実際、渦度スペクトルが冪減衰を示すメソスケールでは、非アフィン速度が協同的に振る舞い（図1）、粉体間の相対速度も小さく、エネルギー散逸も弱いと考えられる。従って、メソスケールにおける渦度スペクトルの表現は散逸パラメータ η に非依存であることを要求すれば、冪減衰の指数 $\alpha=2/3$ が得られる。これは2次元乱流のエンストロフィーカスケードのスケーリング手法を拝借したものだ。高密度粉体の冪減衰をよく説明している（図2(b)の実線）。但し、2次元乱流とは冪指数が異なり、波数の大きい領域でスケーリングから外れる点に注意する。さらに、マクロな剪断応力 σ に高密度粉体の構成則を適用すれば、エネルギー注入率 ε を通じて渦度スペクトルの剪断率依存性が予想され、分子動力学法の結果を見事に説明する（図2(b)）。

異方性

最後に、非アフィン速度のシステムサイズ依存性を紹介する。粒子数が4倍（約3万粒子）の比較的大きな系の分子動力学法によると、高密度領域の遅い流れにおいて、非アフィン速度の協同的な運動の向きが水平および垂直方向に揃う場所があり、大きな系では異方性が顕著に現れるのが解る。但し、異方性は剪断によるもので、小さな系でも異方性は存在する。また、非アフィン速度は平均流周りのゆらぎであるため、集団的な異方性は剪断によるシアバンド形成と直接関わっている。従って、エネルギースペクトルも波数に対して異方的であり、高密度・低剪断率領域において特徴的な四重極パターンが観測される（図2(c)）。エネルギースペクトルの異方性を説明するためには、先述の流体力学モードを波数ベクトルの関数に拡張すればよい。流体力学方程式を密度場・速度場・温度場のゆらぎに対して線形化し、摂動計算により流体力学モードを剪断率の1次までで求める。ここで、全部で4つ得られる流体力学モードのうち、緩和時間が短いものは速く減衰するため、緩和時間が一番長いモードの速度成分の2乗をエネルギースペクトルの解析的な表式とする。図2(d)は解析的に求めたエネルギースペクトルであり、高密度・低剪断率領域で観測された四重極パターンを

再現しているのが解る. 特に, 長波長側 (図の中心付近) で分子動力学法と定性的に一致するのは, 解析計算が高密度粉体の連続体モデルを出発点にしたからである. また, 四重極パターンを再現する流体力学モードの緩和時間は, 圧縮率 β に比例する. これは粉体気体の密度不安定を引き起こす固有値に対応しているが, 粉体気体の剪断流では負の圧縮率によって一様状態が不安定化し, 密度場に不均一が生じることが線形安定性解析の結果から解る. 但し, 高密度粉体の一様状態は常に線形安定であるため, 密度に不均一が生じないことにも注意する.

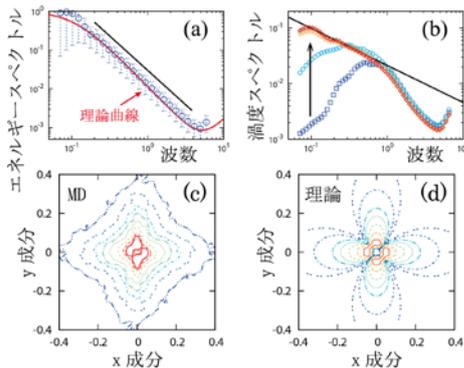


図 2 : (a) 分子動力学法によるエネルギースペクトル (丸) と流体力学モードによる解析的な表式 (曲線). (b) 分子動力学法による過度スペクトル (点) を, 予想される剪断率依存性でスケールしたものを. 矢印方向に剪断率を 1 桁ずつ減らしており, 実線は冪減衰を表す. (c) 異方的なエネルギースペクトルと (d) その解析的な表式を波数成分の関数として等高線プロットしたもの. いずれも波数は平均粒径でスケールしている.

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 9 件)

1. K. Saitoh and H. Mizuno, “Anisotropic decay of the energy spectrum in two-dimensional dense granular flows”, Phys. Rev. E 96 (2017) 012903:1–12. 【査読有】
2. K. Saitoh, V. Magnanimo, and S. Luding, “The effect of microscopic frictions and size distributions on conditional probability distributions in soft particle

packings”, Comp. Part. Mech. 4 (2017) 409–417. 【査読有】

3. M. Tolomeo, K. Saitoh, C. Gael, S. Luding, V. Magnanimo, V. Richefeu, and G. Viggiani, “Stochastic model for the micromechanics of jammed granular materials: experimental studies and numerical simulations”, EPJ Web Conf. 140 (2017) 02021. 【査読有】
4. K. Saitoh and H. Hayakawa, “A microscopic theory for discontinuous shear thickening of frictional granular materials”, EPJ Web Conf. 140 (2017) 03063. 【査読有】
5. K. Saitoh and H. Mizuno, “Enstrophy cascades in two-dimensional dense granular flows”, Phys. Rev. E 94 (2016) 022908:1–11. 【査読有】
6. K. Saitoh and H. Mizuno, “Anomalous energy cascades in dense granular materials yielding under simple shear deformations”, Soft Matter 12 (2016) 1360–1367. 【査読有】
7. H. Mizuno, K. Saitoh, and L. E. Silbert, “Elastic moduli and vibrational modes in jammed particulate packings”, Phys. Rev. E 93 (2016) 062905:1–21. 【査読有】
8. S. Takada, K. Saitoh, and H. Hayakawa, “Kinetic theory for dilute cohesive granular gases with a square well potential”, Phys. Rev. E 94 (2016) 012906:1–20. 【査読有】
9. K. Saitoh and F. Ogushi, “A master equation for force distributions in dense granular materials”,

[学会発表] (計 12 件)

1. K. Saitoh, “*A master equation for force distributions in dense granular materials*”, Symposium on Large Fluctuations and Collective Phenomena in Materials III – Materials Science & Technology (MS&T16), Salt Palace Convention Center, Salt Lake City, Utah, USA, October 23–27, 2016. 【招待講演】
2. K. Saitoh, “*Granular turbulence*”, International Conference Patterns and Waves 2016, Hokkaido University, Sapporo, Japan, August 1–5, 2016. 【招待講演】
3. K. Saitoh, “*A stochastic approach to mechanics of jammed granular materials*”, International Workshop on Jamming and Granular Matter – Satellite meeting of StatPhys26, Queen Mary University of London, London, UK, July 13–15, 2016.
4. K. Saitoh, “*Anomalous energy cascades in dense granular materials yielding under shear*”, The Euromach colloquium 580 – Strongly nonlinear dynamics and acoustics of granular metamaterials, INRIA Grenoble Rhone-Alpes, Montbonnot, France, July 11–13, 2016. 【招待講演】
5. 齊藤国靖, Brian P. Tighe, 『ソフト粒子系のコルモゴロフ流におけるシェアバンド形成と非局所性』, 日本物理学会第 73 回年次大会, 2018 年 3 月 25 日, 東京理科大野田キャンパス
6. 齊藤国靖, 『分子動力学法による粉体中の音波の解析』, 第 7 回計算統計物理学研究会, 2017 年 9 月 26 日, 東北大学 AIMR 本館 2 階セミナー室【招待講演】
7. 齊藤国靖, 『分子動力学法による粉体中の音波伝搬の解析』, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 2017 年 9 月 22 日, 岩手大学
8. 齊藤国靖, 早川尚男, 『摩擦のある粉体の微視的理論と不連続シェアシッキング』, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 2017 年 9 月 22 日, 岩手大学
9. 齊藤国靖, 『粉粒体レオロジーの数値的および理論的研究』, 2017 年度 第 1 回計算粉体力学研究会, 2017 年 7 月 25 日, 同志社大学【招待講演】
10. 齊藤国靖, 『摩擦のある粉体の不連続シェアシッキングと履歴依存性の

微視的理論』, 日本物理学会第 72 回年次大会, 2017 年 3 月 17 日, 大阪大学

11. 齊藤国靖, 『粉体の巨視的挙動の非平衡統計物理学的アプローチによる解明』, 日本物理学会第 11 回 (2017 年) 若手奨励賞受賞記念講演, 2017 年 3 月 17 日, 大阪大学【招待講演】
12. 齊藤国靖, 『単純せん断変形下で降伏する高密度な粉体の乱流構造』, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016 年 9 月 13 日, 金沢大学

6. 研究組織

(1) 研究代表者

齊藤 国靖 (SAITOH, Kuniyasu)
東北大学・数理科学連携研究センター・准教授
研究者番号 : 10775753