

# 非弾性粒子群に対する統計力学的アプローチ

小川 哲\*・加藤 豊文\*\*

(1982年1月6日受理)

## On the Statistical Approaches for Inelastic Granular Particles

By

Satoru OGAWA and Toyofumi KATO

**Abstract:** Mechanics of inelastic particles are investigated by using the procedures of kinetic theory. The relations of inelastic binary collisions of spherical particles are obtained by using two empirical constants, and the Boltzmann equation for inelastic particles is obtained in a very simple form. By using the Monte Carlo Method, we simulate the distribution functions for two initial distributions, and several interesting properties of the statistical structure of granular particulate system become evident.

### 要 約

非弾性粒子群に対する統計力学的取り扱いが試みられている。2つの経験的常数を使って、2体衝突に対する非弾性衝突関係が得られ、スベリ速度比一定を仮定した場合に対し、ボルツマン方程式が導かれている。モンテカルロ法により一様な系に対するエネルギー分布が計算され、運動エネルギー分布は  $\chi^2$  分布へ近づくこと、角運動エネルギー分布は、それと別の分布へ行くことが確かめられている。

### 1. はじめに

粒状体を連続体とみなし、現象論的立場から構成方程式を導く試みは数多くなされている [1-7]。現象論的方法がその有効性を発揮するのが線形関係の場合であることを考えると、粒状体の構成方程式を発見的に導く方法としてはほとんど無意味に近いと考える。粒状体のそれは非線形であるからである [8]。統計力学的にきちんとしたかたちで導くこと

---

\* 東大工学部

\*\* 東京農工大工学部

が出来れば良いのであるが、(1)粒状体は多くの場合複雑な構成をしている、(2)粒子接触が多体的である、という2つの困難に目を奪われ、静的で同径の球型粒子が整然とならんでいる場合、もしくはそれに類似した場合以外は全く研究されていない。[9]において、我々は完全流動状態にある粒状体の構成方程式を簡単な運動論的モデルを使って導いたが、粒子のランダム運動の統計的構造に対し強い仮定を行っている点からも不十分なものであった。上にあげた(1),(2)の困難性をとりぞいた場合でさえ、粒状体の様な非弾性衝突粒子系に対する分布関数が時間とともにどう変化するかについてほとんど何もわかっていないことに気がつく。気体分子の様な保存力の作用する系においては、平衡状態においてマクスウェル分布(正規分布)が実現され、輸送係数を導く際にもそれが良い近似を与えることが知られている[10]。非弾性衝突粒子の場合に正規分布を用いて計算することにどれほどの意味があるか全くわかっていない。本論文においては気体分子運動論的立場から非弾性衝突粒子の運動を論じることにより、上記の問題に対し、若干の解答を与えようとする。

## 2. 粒子の非弾性的衝突関係

粒状体を構成する粒子(ガラス球、砂等)の様な非弾性的衝突をするものについての衝突前後関係はほとんど研究されていない。衝突に際しての微細な変形等を考えると問題は極めて複雑になるが、[9]と同様な方法により以下にのべる様な2つの物性常数を使い簡単なかたちの衝突関係を得る。図1に示される様な2球の衝突を考える。それぞれの粒子の半径、質量、慣性モーメントを  $a_\alpha, m_\alpha, I_\alpha$  ( $\alpha=1,2$ ) で表わし、速度及び角速度はそれぞれ  $v_\alpha, \omega_\alpha$  で表わす。一般に2球の接触は面を通じて行われるのであるが、変形が小さく点接触であるとして議論する。次の仮定をする。

仮定 1 粒子は点接触を行い、衝突している間にその点は動かないとする。図1において接触点における単位ベクトル  $\mathbf{n}$  は衝突している時間一定であるとする。

2球が衝突している微小時間( $\tau$ )の運動を考察する。接触点において粒子1に作用する力を  $\mathbf{F}$  とすると、粒子の運動方程式、及び角運動方程式は

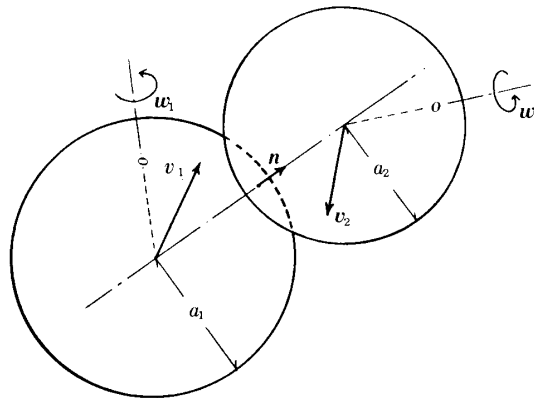


図1 非弾性2体衝突

$$m_\alpha d\mathbf{v}_\alpha/dt = (-1)^{\alpha+1} \mathbf{F}, \quad (\alpha=1,2) \quad (1)$$

$$I_\alpha d\boldsymbol{\omega}_\alpha/dt = a_\alpha \mathbf{n} \wedge \mathbf{F}, \quad (2)$$

ここで  $\wedge$  はベクトル積を示す。衝突において  $\mathbf{n}$  方向と  $\mathbf{n}$  に垂直な方向 ( $\mathbf{n}$ -normal) とでは経験的衝突関係が互いに異なることを考えて両方向にわけて考える。 $\mathbf{n}$  方向について (1)式は

$$m_\alpha [d(\mathbf{v}_\alpha \cdot \mathbf{n})/dt] \mathbf{n} = (-1)^{\alpha+1} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n}, \quad (3)$$

$\mathbf{n}$ -normal 方向については

$$m_\alpha d[\mathbf{v}_\alpha \cdot (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn})]/dt = (-1)^{\alpha+1} \mathbf{F} \cdot (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn}), \quad (4)$$

ここで  $\boldsymbol{\delta}$  はクロネッカーのデルタを示す。 $\mathbf{F}$  についても両方向に分割し、(2)式を書きなすと

$$I_\alpha d\boldsymbol{\omega}_\alpha/dt = a_\alpha \mathbf{n} \wedge [\mathbf{F} \cdot (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn})]. \quad (5)$$

衝突前後関係を導くには  $\mathbf{F}(t)$  を知らなくてはならないが、 $\mathbf{F}(t)$  を決めるには接触による変形 (ヘルツ理論等) を解かなければならず極めて困難であることから、以下の仮定をおくことにより2つの経験的物性常数 (反発係数  $\epsilon$ , 及び固体摩擦係数  $\eta$ ) で代用することにする。

仮定 2  $\mathbf{n}$  方向について衝突前後の相対速度の比は一定であるとする。

仮定 3  $\mathbf{n}$ -normal 方向についてのスベリ抵抗 ( $\mathbf{F} \cdot (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn})$ ) は抗力 ( $\mathbf{F} \cdot \mathbf{n}$ ) に比例し、方向はスベリ方向の逆になる。

上記の2つの仮定により衝突前後関係が完全に決定される。接触点における粒子の速度は  $\mathbf{v}_\alpha + (-1)^{\alpha+1} a_\alpha \boldsymbol{\omega}_\alpha \wedge \mathbf{n}$ , ( $\alpha=1,2$ ) で与えられるから、2粒子の衝突直前の相対速度  $\mathbf{V}$  は

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}e = (\mathbf{V} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} + \tilde{V}\tilde{e} = (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) + \sum_\alpha (a_\alpha \boldsymbol{\omega}_\alpha \wedge \mathbf{n}), \quad (6)$$

で与えられる。ここで  $e$  は  $\mathbf{V}$  方向の単位ベクトル、 $\tilde{e}$  は  $\mathbf{V}$  の  $\mathbf{n}$ -normal 成分の方向の単位ベクトルで次式のように与えられる。

$$\tilde{e} = e \cdot (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn}) / \sqrt{1 - (e \cdot \mathbf{n})^2} \quad (7)$$

(6)の相対速度を使うと、仮定2は

$$(\mathbf{v}'_1 - \mathbf{v}'_2) \cdot \mathbf{n} / (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \cdot \mathbf{n} = -\epsilon \quad (8)$$

と表わされ、又仮定3は、

$$\mathbf{F} \cdot (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn}) = -\eta [\mathbf{F} \cdot (-\mathbf{n})] \tilde{e} \quad (9)$$

と表わされる。なお衝突後の諸量には ' をつけて示すことにする。微小衝突時間  $\tau$  について (3)式を積分し、粒子1の式から粒子2の式を差し引くと

$$[(v_1' - v_2') \cdot n]n - [(v_1 - v_2) \cdot n]n = \int_0^\tau (1/\mu)(F \cdot n)n dt, \quad (10)$$

ここで  $\mu$  は換算質量 ( $1/\mu \equiv 1/m_1 + 1/m_2$ ) である。(10)式から(8)式を使い衝突後の量を消去すると

$$\int_0^\tau (F \cdot n)dt = -\mu(1 + \epsilon)(v_1 - v_2) \cdot n, \quad (11)$$

が得られ、(10)式に(11)式を代入すると、 $n$  方向の速度についての衝突前後関係は、

$$(v_a' \cdot n)n = (v_a \cdot n)n + (-1)^\alpha (\mu/m_a)(1 + \epsilon)(\Psi \cdot n)n, \quad (12)$$

で与えられる。ただし  $\Psi \equiv v_1 - v_2$  である。

$n$ -normal 方向の関係は相対速度  $V$  の  $n$ -normal 成分の時間変化を考えることにより以下の様に求められる。 $\tilde{V}$  の支配方程式は(4)及び(5)式から、恒等式

$$n \wedge [F \cdot (\delta - nn)] \wedge n = F \cdot (\delta - nn) \quad (13)$$

を使って

$$d\tilde{V}/dt = KF \cdot (\delta - nn), \quad (14)$$

ただし  $K \equiv 1/\mu + \sum_a a_a^2/I_a$ , で与えられる。(9)の関係を代入すると

$$d\tilde{V}/dt = -\eta KF \cdot (-n)\tilde{e}, \quad (15)$$

となり、衝突後のスベリ速度は(15)式を時間について0から $\tau$ まで積分すれば求められる。注意しなければいけないことは、 $\tilde{V}$ は負値をとる事はないという点である。固体摩擦の性質から、摩擦力は相対速度がある場合のみ作用するのである。(15)式の積分を実行する際に、 $\eta$ は $\tilde{V}$ についてステップ関数でなければならない。

$$\begin{aligned} \eta(\tilde{V}) &= \eta = \text{constant} & \text{if } \tilde{V} > 0 \\ &= 0 & \text{if } \tilde{V} = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

摩擦力によりスベリの方向が逆転するのは不合理であり、固体摩擦のこうした性質は解析を困難なものにしている。(15)式を時間について形式的に積分すると、(11)式を使って

$$\tilde{V}' - \tilde{V} = -\eta K \tilde{e} \mu (1 + \epsilon)(\Psi \cdot n) \quad (17)$$

が得られるが、右辺は0~ $\tau$ の間摩擦力が作用し続けた場合の速度の減衰を与えている。 $\Psi \cdot n = V \cdot n$ が満足されているから(7)を使って上式を書き換えると、

$$\tilde{V}' = R\tilde{V}, \quad (18)$$

$$R \equiv 1 - \eta K \mu (1 + \epsilon)(e \cdot n) / \sqrt{1 - (e \cdot n)^2},$$

と表わされる。 $R$ は $0 \leq R \leq 1$ の不等式を満足しなければならない。 $e$ と $n$ のなす角度を $\theta$ とすると、 $R$ は

$$R(\theta) = \begin{cases} [1 - \Lambda \cot(\theta)], & \text{if } \theta^* \leq \theta \leq \pi/2 \\ \pm 0 & , \text{ if } 0 \leq \theta < \theta^* \end{cases} \quad (19)$$

ここで  $\Lambda$  は  $\Lambda \equiv \eta K(1 + \epsilon)\mu$  で定義される定数であり  $\theta^*$  は  $\tan(\theta^*) = \Lambda$  で決まる角度である。  $\theta$  の範囲が  $0 \sim \pi/2$  となるのは衝突の条件  $\cos(\theta) = \mathbf{e} \cdot \mathbf{n} \geq 0$  からである。

(19)の  $R$  を使うと、 $\mathbf{F}$  の  $\mathbf{n}$ -normal 方向の力積は

$$\int_0^\tau \mathbf{F} \cdot (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn}) dt = -(1 - R) \tilde{V}/K, \quad (20)$$

となり、(4)及び(5)式に代入することにより  $\mathbf{n}$ -normal 成分の関係が次の様に与えられる。

$$\mathbf{v}_\alpha' \cdot (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn}) = \mathbf{v}_\alpha \cdot (\boldsymbol{\delta} - \mathbf{nn}) + (-1)^\alpha (1 - R) \tilde{V}/K/m_\alpha, \quad (21)$$

$$\boldsymbol{\omega}_\alpha' = \boldsymbol{\omega}_\alpha - a_\alpha (1 - R) (\mathbf{n} \wedge \tilde{\mathbf{V}})/I_\alpha. \quad (\alpha = 1, 2) \quad (22)$$

(12)式と(21)式をまとめて、速度についての衝突前後関係は

$$\mathbf{v}_\alpha' = \mathbf{v}_\alpha + (-1)^\alpha [(\mu/m_\alpha)(1 + \epsilon) (\boldsymbol{\Psi} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} + (1 - R) \tilde{V}/K/m_\alpha] \quad (23)$$

となる。

球型粒子の場合、慣性モーメント  $I = (2/5)a^2 m$  なる関係があり、 $K = (7/2)/\mu$  となる。(23)及び(22)式の内積をとることにより一回の衝突による運動エネルギー及び回転エネルギーのロスが以下の様に計算される。

$$\begin{aligned} \Delta E_v &\equiv (1/2) \sum_\alpha m_\alpha (\mathbf{v}_\alpha'^2 - \mathbf{v}_\alpha^2) \\ &= -C_1 (\boldsymbol{\Psi} \cdot \mathbf{n})^2 - (C_3 - C_2) [\boldsymbol{\Psi}^2 - (\boldsymbol{\Psi} \cdot \mathbf{n})^2] + C_2 [\boldsymbol{\xi}^2 - (\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n})^2] \\ &\quad - (C_3 - 2C_2) \boldsymbol{\Psi} \cdot (\boldsymbol{\xi} \wedge \mathbf{n}), \\ \Delta E_\omega &\equiv (1/2) \sum_\alpha I_\alpha (\boldsymbol{\omega}_\alpha'^2 - \boldsymbol{\omega}_\alpha^2) \\ &= C_4 [\boldsymbol{\Psi}^2 - (\boldsymbol{\Psi} \cdot \mathbf{n})^2] - (C_3 - C_4) [\boldsymbol{\xi}^2 - (\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{n})^2] - (C_3 - 2C_4) \boldsymbol{\Psi} \cdot (\boldsymbol{\xi} \wedge \mathbf{n}), \end{aligned} \quad (24)$$

ここで以下の定義がなされている。 (25)

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi} &\equiv a_1 \boldsymbol{\omega}_1 + a_2 \boldsymbol{\omega}_2, & C_1 &\equiv (\mu/2)(1 + \epsilon)(1 - \epsilon), \\ C_2 &\equiv (1/2\mu)[(1 - R)/K]^2, & C_3 &\equiv (1 - R)/K, \\ C_4 &\equiv \sum_\alpha (a_\alpha^2/I_\alpha)[(1 - R)/K]^2. \end{aligned} \quad (26)$$

### 3. 非弾性粒子群に対するボルツマン方程式

粒状体を構成する粒子が互いに衝突しながら飛びまわっている状況を想定する。問題を簡単にする為、系は一様であり、球型粒子の半径は皆等しい ( $a$ ) とする。衝突が弾性的の場合、分布関数  $f = f(\mathbf{v}, \boldsymbol{\omega}, t)$  の支配方程式は Hard-Sphere 分子のボルツマン方程式に一

致するはずである。我々の問題の場合エネルギー散逸がある為、衝突積分を若干書き換える必要がある。

[11] によると一様な系におけるボルツマン方程式は次の様に表現される。

$$\partial f / \partial t = \Gamma^{(+)} - \Gamma^{(-)}, \quad (27)$$

ここで  $\Gamma^{(+)} d\mathbf{v}d\boldsymbol{\omega}dt$  は衝突により  $dt$  時間に  $(\mathbf{v}, \mathbf{v} + d\mathbf{v})$ ,  $(\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\omega} + d\boldsymbol{\omega})$  の体積内に飛びこんでくる粒子数を,  $\Gamma^{(-)} d\mathbf{v}d\boldsymbol{\omega}dt$  は衝突により失われる粒子数を示す。Hard-Sphere 粒子の場合,  $\Gamma^{(+)}$  及び  $\Gamma^{(-)}$  は次の様に与えられる。

$$\begin{aligned} \Gamma^{(+)} d\mathbf{v}d\boldsymbol{\omega}dt &= d\mathbf{v}' d\boldsymbol{\omega}' dt \int \cdots \int f(\mathbf{v}', \boldsymbol{\omega}', t) f(\mathbf{v}_1', \boldsymbol{\omega}_1', t) \mathbf{g}' \cdot \mathbf{n} (2a)^2 d\Omega dv_1' d\boldsymbol{\omega}_1', \\ \Gamma^{(-)} d\mathbf{v}d\boldsymbol{\omega}dt &= d\mathbf{v}d\boldsymbol{\omega}dt \int \cdots \int f(\mathbf{v}, \boldsymbol{\omega}, t) f(\mathbf{v}, \boldsymbol{\omega}, t) \mathbf{g} \cdot \mathbf{n} (2a)^2 d\Omega dv_1 d\boldsymbol{\omega}_1, \end{aligned} \quad (28)$$

ここで  $d\Omega \equiv \sin(\theta) d\theta d\phi$ , 及び  $\mathbf{g} \equiv \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$  である。保存力の作用する場合,  $|\mathbf{g}| = |\mathbf{g}'|$ , 及び  $(\mathbf{v}, \boldsymbol{\omega}) \rightarrow (\mathbf{v}', \boldsymbol{\omega}')$  の交換のヤコビアン  $J = 1$  が満足され通常の表現が得られる。

我々の導いた衝突前後関係 ((22), (23)式) は  $R$  というステップ関数的性質を持ちかつ非線形関数を含む為ヤコビアン  $J$  の計算はほとんど不可能である。しかしながら何らかの統計的平均をとることによりエフェクティブな  $R$  が求められた場合, もしくは単純に  $R$  を一定として扱おうと(22)及び(23)の交換は線形となりヤコビアンを計算することが出来る。(27)式において, 衝突後の諸量を衝突前の量で書きかえる際に我々はヤコビアン

$$d\mathbf{v}' d\boldsymbol{\omega}' dv_1' d\boldsymbol{\omega}_1' = J d\mathbf{v}d\boldsymbol{\omega}dv_1 d\boldsymbol{\omega}_1 \quad (29)$$

を計算しなければならない。ここで  $J$  は  $12 \times 12$  の行列の行列式であり, 比較的こみ入った計算の後に, 次の様な極めて簡単な結果が得られる。

$$J \in R^2 \quad (30)$$

相対速度の関係は(8)式より

$$|\mathbf{g}'| = \epsilon |\mathbf{g}| \quad (31)$$

が得られる。(27)式を(30)及び(31)式を使って書きかえると結果として

$$\partial f / \partial t = (2a)^2 \int \cdots \int [\epsilon^2 R^2 f' f_1' - f f_1] \mathbf{g} \cdot \mathbf{n} d\Omega dv_1 d\boldsymbol{\omega}_1, \quad (32)$$

が得られる。弾性衝突の場合  $\epsilon = R = 1$  であり(32)式は通常のボルツマン方程式に一致する。

(32)式を無次元化しておく。[12] に従って無次元変数を以下の様に定義する。

$$\begin{aligned}\bar{\mathbf{v}} &\equiv \mathbf{v}/v_0, & \bar{f} &\equiv f/[N/v_0^3\omega_0^3], \\ \bar{\boldsymbol{\omega}} &\equiv \boldsymbol{\omega}/\omega_0, & \bar{t} &\equiv t[\pi N(2a)^2v_0],\end{aligned}\quad (33)$$

ここで  $v_0$  及び  $\omega_0$  は基準となる速度及び角速度であり、 $N$  は粒子の数密度である。これらの無次元変数を使うと (32) 式は次の様に表わされる。

$$\partial \bar{f} / \partial \bar{t} = \int \cdots \int [\epsilon^2 R^2 \bar{f}' \bar{f}'_1 - \bar{f} \bar{f}'_1] |\bar{\mathbf{g}}| d\bar{\Omega} d\bar{\mathbf{v}}_1 d\bar{\boldsymbol{\omega}}_1, \quad (34)$$

ここで  $d\bar{\Omega} \equiv \cos(\theta) d\Omega / \pi$  である。

#### 4. モンテカルロ法

前章で導いたボルツマン方程式は非線形で解析的に解くことが出来ず、我々はモンテカルロ法による数値実験を行うことにより分布関数の時間的变化を調べる。

時間  $\bar{t} + \Delta \bar{t}$  における分布関数  $\bar{f}(\bar{t} + \Delta \bar{t})$  は  $\bar{f}(\bar{t})$  から以下の様なモンテカルロ法 [13-14] により決定される。 $N_s$  個の粒子を考え、分布関数を  $N_s$  個の粒子状態で代表させる。微小時間  $\Delta \bar{t}_c \ll \Delta \bar{t}$  のうちに粒子が衝突するかどうかを決める。

1) ある粒子が指定された時、単位時間当りの衝突ひん度  $\gamma_a$  は

$$\gamma_a = \int \cdots \int \bar{f}(\bar{\mathbf{v}}_1, \bar{\boldsymbol{\omega}}_1, \bar{t}) |\bar{\mathbf{v}}_a - \bar{\mathbf{v}}_1| d\bar{\Omega} d\bar{\mathbf{v}}_1 d\bar{\boldsymbol{\omega}}_1, \quad (35)$$

で与えられる。ここで  $\bar{\mathbf{v}}_a$  は指定された粒子の速度である。衝突ひん度が十分小さい場合時間間隔  $(\bar{t}, \bar{t} + \Delta \bar{t})$  内に最初の衝突が起こる確率はポアソン分布  $P(\bar{t}) \gamma \exp(-\gamma \bar{t})$  で与えられることから、時間について 0 から  $\Delta \bar{t}_c$  までの積分を行うと  $\Delta \bar{t}_c$  内にある指定された粒子が衝突をする確率は

$$P(\Delta \bar{t}_c) = 1 - \exp(-\gamma_a \Delta \bar{t}_c), \quad (36)$$

となる。 $[0,1]$  の一様乱数を引いて、(36) と比べることにより粒子が衝突するかどうかを決定する。

2) 粒子が衝突する場合、速度が  $(\bar{\mathbf{v}}_1, \bar{\mathbf{v}}_1 + \Delta \bar{\mathbf{v}}_1)$  にある粒子との衝突確率は

$$\omega(\Delta \bar{\mathbf{v}}_1) = \left[ \int \bar{f}_1 d\bar{\boldsymbol{\omega}}_1 \right] |\bar{\mathbf{v}}_a - \bar{\mathbf{v}}_1| \Delta \bar{\mathbf{v}}_1 / \gamma \quad (37)$$

で与えられ、乱数を引くことにより相手粒子が決定する。

3) 衝突後の粒子の状態は、衝突点における単位ベクトル  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\Theta, \Phi)$  を確率

$$P_n(\Delta \Theta, \Delta \Phi) = \sin(\Theta) \cos(\Theta) d\Phi / \pi, \quad (38)$$

で与えることにより決定する。

以上 1)–3) までの手順を、 $N_s$  個の粒子について行い、 $\sum \Delta \bar{t}_c$  が  $\Delta \bar{t}$  になるまでくり

かえし実行する事により  $\bar{t} + \Delta \bar{t}$  における粒子状態が決定する。

数値実験において  $10^4$  個の粒子を考え、初期状態として、(1)正規分布 (Case 1), (2)等エネルギー分布 (Case 2) の2つを考えた。基準速度及び角速度  $v_0, \omega_0$  は、標準正規乱数を使う事を考え、

$$\begin{aligned} v_a^2(t) &\equiv (1/3) \int (v^2 f) dv d\omega, \\ \omega_a^2(t) &\equiv (1/3) \int (\omega^2 f) dv d\omega, \end{aligned} \quad (39)$$

で与えた。又粒子の平均衝突ひん度  $\gamma_a$  を計算する際に  $N_c \leq N_s$  個の粒子を指定し、(35)式を  $\gamma_a = \sum_{\beta=1}^{N_c} |\bar{v}_a - \bar{v}_\beta| / N_c$  で代用した。実際の計算において計算時間及び誤差を考慮した結果  $\Delta \bar{t}_c = 0.025$ ,  $N_c = 10$  として計算を行った。

## 5. 結 果

我々の問題において3つのパラメータ、反発係数  $\epsilon$ , 固体摩擦係数  $\eta$ , 及び初期状態における角運動エネルギーと運動エネルギーの比  $C_e \equiv [(1/2)I\langle\omega^2\rangle] / [(1/2)m\langle v^2\rangle]$ , があらわれる。時間の経過とともに分布関数の形がどう変化するかを調べるのが本論文の主目的であるから、2つの分布間の距離を表わす規準が必要となる。分布間の距離を表わす規準として様々なものが提出されている [15] が、モンテカルロ法により得られる分布が離散的であることを考慮し、ヘリンジャー距離を使うことにする。ヘリンジャー距離  $D_H$  は  $P(\mathbf{X})$ ,  $Q(\mathbf{X})$  を2つの確率分布とした時

$$D_H \equiv \int [1 - \sqrt{P(\mathbf{X})Q(\mathbf{X})}] d\mathbf{X} \quad (40)$$

で定義される。もし  $X_i (i=1,2,3)$  が平均0, 分散1の正規分布に従うとすると  $\{X_i, X_i\}$  は自由度3の  $\chi^2$  分布に従うことから、エネルギーの分布と自由度3の  $\chi^2$  分布との距離を求めることにする。通常の気体分子の様な保存力の作用する系において、平衡状態においてエネルギーは  $\chi^2$  分布にぜん近し、我々の計算機シミュレーションでは  $D_H \sim O(10^{-4})$  となることがわかっている(以下の計算においてヘリンジャー距離  $D_H$  において、 $O(10^{-4})$  の誤差が含まれている)。

エネルギー分布の時間変化が主として調べられた。初期速度、及び角速度を正規乱数からひいた Case 1 の場合、運動エネルギーの分布は、計算誤差の範囲内で  $\chi^2$  分布の近くにとどまり続けることが確認された。非弾性衝突によりエネルギーは急速に減少するが、分布の形は平衡状態の場合とほとんど一致する(図省略)。一方角運動エネルギーの分布は  $\chi^2$  分布からだんだん離れて行くことが確認された。図2は、パラメータ  $\epsilon = 0.5$ ,  $\eta = 0.3$ ,  $C_e = 1.0$  の場合についての角運動エネルギー分布の時間変化が示されている。分布の形を調べる為、横軸の尺度が時間の経過とともに変化していることに注意。図から明らかなように時間の経過とともに低エネルギー及び高エネルギー部分の度数が初期分布 ( $\chi^2$  分布) と



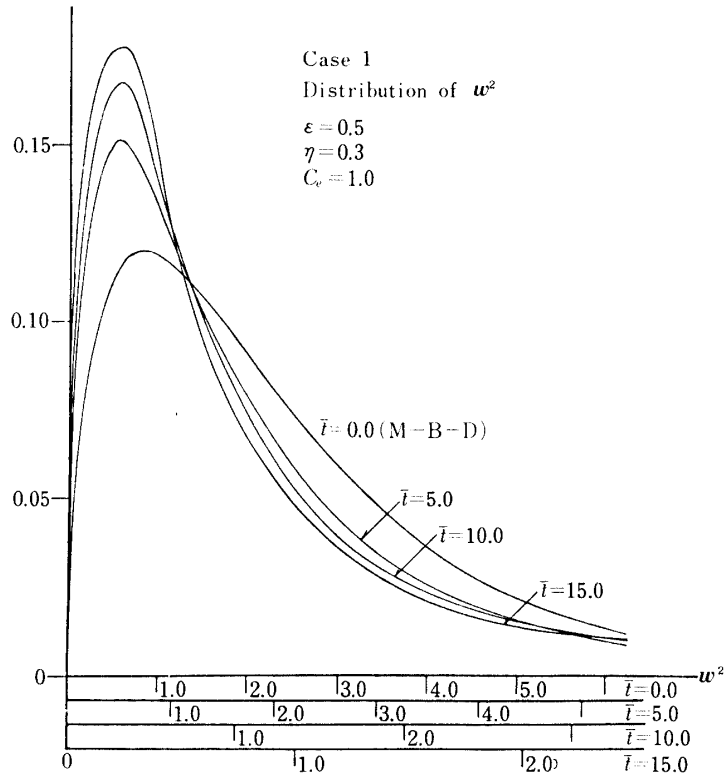


図2 角運動エネルギー分布の時間変化 (Case 1)

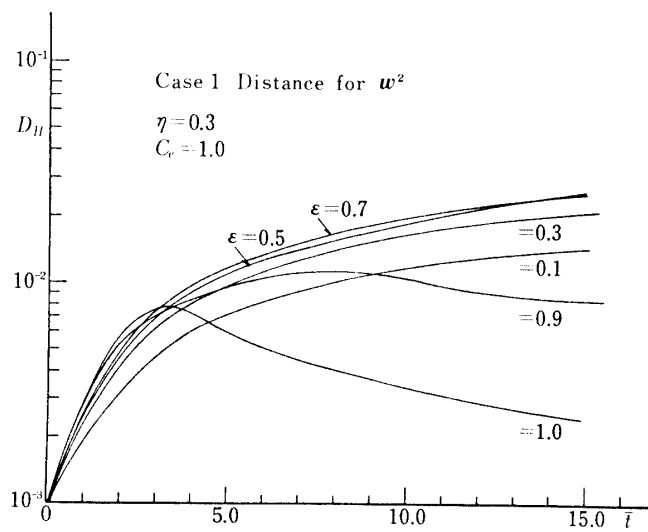


図3 角運動エネルギー分布と  $\chi^2$  分布とのヘリンジャー距離 (Case 1)

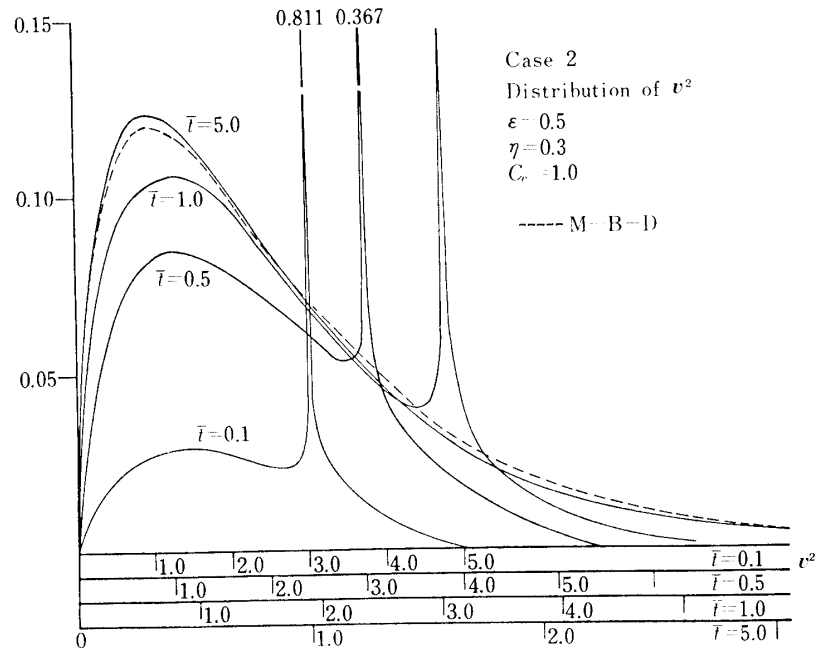


図 4 運動エネルギー分布の時間変化 (Case 2)

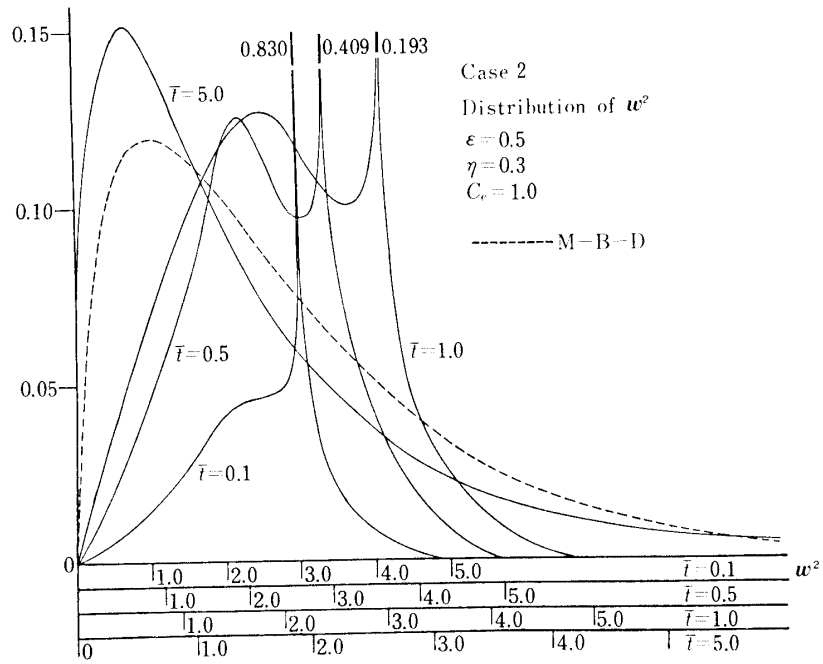


図 5 角運動エネルギー分布の時間変化 (Case 2)

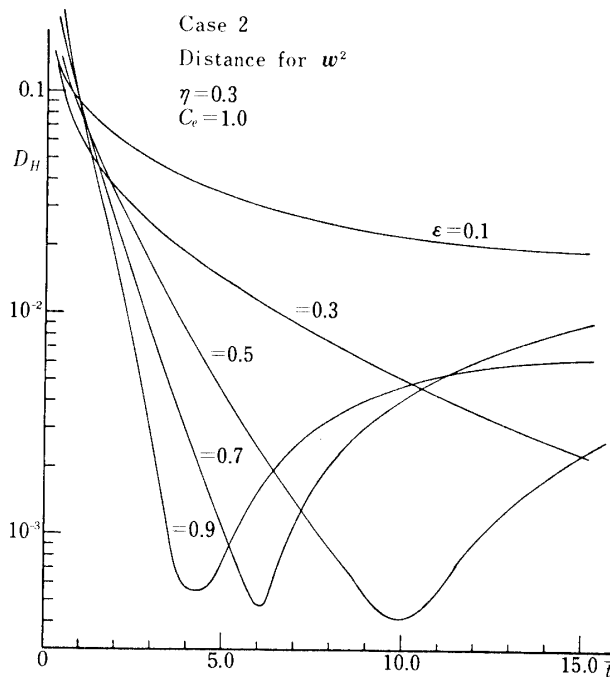


図6 角運動エネルギー分布と  $\chi^2$  分布とのヘリンジャー距離 (Case 2)

比較し増加して行く傾向を示している。計算時間の制限から角運動エネルギーの分布が漸近的にどの様な分布に近づくかはわからないが、運動エネルギーの分布が  $\chi^2$  分布から離れないことを考えると極めて興味深い。図3に角運動エネルギー分布と  $\chi^2$  分布とのヘリンジャー距離  $D_H$  が示されている。パラメータ  $\eta=0.3$ ,  $C_e=1.0$  に対し、 $\epsilon$  による変化が示されている。図に示されているように  $\epsilon=0.4\sim 0.8$  程度のところで  $D_H$  が極大になっている。 $\epsilon=1.0$  の場合  $D_H$  が小さいのは、弾性衝突に近い事と一致している。 $\bar{t}=15.0$  までの計算では  $D_H \sim O(10^{-2})$  のあたりに漸近するよう感じられるが、この先の挙動がどうなるかは現在のところ明確ではない。非弾性衝突をする粒子群においては運動エネルギーはほぼ  $\chi^2$  分布のまま急速に減衰し、角運動エネルギーは  $\chi^2$  分布と異った分布へ近づきつつ残り残されると考えられる。エネルギーが各粒子について一定で速度及び角速度の方向が等方的な初期条件 (Case 2) の場合にも同じ傾向を示すことが確かめられた。図4に運動エネルギー分布の時間変化が示されている。 $\bar{t}=0.0$  において  $\delta$  関数的に与えられた運動エネルギー分布が、 $\bar{t}=5.0$  においてほとんど  $\chi^2$  分布になっている事がわかる。運動エネルギー分布が  $\chi^2$  分布になるまでの平均衝突回数はおおよそ8回程度である。図5は Case 2 に対する角運動エネルギー分布の時間変化が示されている。傾向は Case 1 の場合と同じで時間の経過とともに  $\chi^2$  分布を通りすぎ低エネルギー及び高エネルギー部分の度数が増加して行く。図6はヘリンジャー距離を示したものでパラメータは Case 1 の場合と同じである。いずれの場合も  $\chi^2$  分布には近づかず、別の分布へ行く様子が示され

ている。Case 2 の結果から、運動エネルギー分布は  $\chi^2$  分布へ移行しようとする性質を持ち、角運動エネルギー分布は  $\chi^2$  分布と別の分布へ近づく性質を持つことが確かめられた。

## 6. おわりに

粒状体の運動を記述する構成方程式を微視的關係から導く為の基礎づけとして、非弾性粒子群に対する統計力学的取り扱いを試みた。反発係数、及び固体摩擦係数の2つの経験的常数によって非弾性衝突關係を導いた。衝突關係は非線形であるが、スベリ速度の減衰をあらわす  $R$  を一定とした場合、非弾性粒子群に対するボルツマン方程式が極めて簡潔な形で得られた。モンテカルロ法を作ったの数値実験によって分布関数の時間的变化が得られ、(1)運動エネルギーは  $\chi^2$  分布に近づこうという性質を持つ、(2)角運動エネルギーは  $\chi^2$  分布と異なった別の分布へ漸近する、という興味深い結果が得られた。したがって構成方程式にあらわれる輸送係数の統計力学的計算において、並進運動の分布は正規分布によって近似しても十分良い結果が得られると考えられる。

今後に残された問題として、(1)角運動エネルギーの分布がどんな分布に近づくかを明確にすること、(2)一様な系を考えたが、速度勾配や角速度勾配がある系での分布関数の時間变化を調べること、(3)最近注目されている準モンテカルロ法でボルツマン方程式を解き数値実験の結果と比較すること、等が考えられる。

## References

- [1] N. Oshima, RAGG Memoires, 1, 111 (1955)
- [2] R. Mindrin, Arch. Rat. Mech. Anal., 16, 51 (1963)
- [3] C. Eringen, and S. Suhubi, Int. J. Engng. Sci., 2, 189 (1964)
- [4] S. Cowin, Physics of Fluids, 11, 1919 (1968)
- [5] M. Goodman, and S. Cowin, J. Fluid Mech., 45, 321 (1971)
- [6] M. Goodman, and S. Cowin, Arch. Rat. Mech. Anal., 44, 249 (1972)
- [7] S. Ogawa, and N. Oshima, JEME Preprint, 760-8, 89 (1976)
- [8] R. Bagnold, Proc. Roy. Soc., A 225, 49 (1954)
- [9] S. Ogawa, A. Umemura, and N. Oshima, ZAMP, 31, 483 (1980)
- [10] J. Jeans, The Dynamical Theory of Gases, Dover Pub., Inc., New York (1954)
- [11] J. Hirschfelder, C. Curtiss, and R. Bird, Molecular Theory of Gases and Liquids., John Wiley and Sons, New York (1954)
- [12] K. Kogan, Rarefied Gas Dynamics, Plenum Press, New York, (1969)
- [13] R. Bird, Molecular Gas Dynamics, Oxford Univ. Press, Oxford (1976)
- [14] K. Koura, J. Chemical Physics, 59, 691 (1973)
- [15] S. Amari, Post-RAGG Reports, No. 106, (1980)