惑星科学フロンティア・セミナー

粉体の微視的理論
長距離相互作用する多粒子系としての粉体

平成７年７月１８日（火）
於 静岡市 三保ユースホステル

東北大理 市來健吾

Abstract

粉体とは小さな粒子の集団のことである。砂などが良い例であるが砂粒の間にある空気の存在はしばしば忘れられがちである。粉体流動層と呼ばれる系は容器に入れられた粉体に底から空気を流し込み流動化している系であり、当然流体の効果が非常に重要となるが、一見流体が関係なさそうな現象に於いても、流体の効果が無視できるかどうかは自明ではない。そのため、流体効果の定量的な性質の理解は粉体の本質的な理解には欠くことのできないものである。

本講演では、この流体効果（流体を介した粒子間相互作用）の定式化について簡単に触れ、粉体流への応用を示す。またシミュレーションにより得られた気泡流動や密度波を紹介する。

（流体力学的相互作用は、クーロン相互作用や重力のように長距離的であり、粉体の問題と銀河や銀河団などの重力多体系とは意外と似ているかも知れない。）

目次

1 粉体とは – 本研究のモティベーション

通常粉体 (ふんたい) [1, 2] とは粒子 (半径が数 $10\,\mu \sim$ 数 mm) の集団 (砂時計や砂丘、塩など) を指す。粉体はそれのもつ単純さにもか変わらず多様な現象を示す。

rotating drum	heaping, 雪崩
振動層 (vibrating bed)	対流、表面波、heaping, 気泡
流動層 (fluidized bed)	流動化、気泡
細管流 (pipe flow)	密度波

粉体の示す現象の記述には大きく分けて 2 つの立場がある。巨視的描像では粉体を連続体として記述する為モデルの解析が比較的容易である。しかし粉体本来の離散性や、モデルの正当性に関する議論は確立されていない。一方微視的描像は粉体を離散的に記述使用とする立場で、コンピュータを用いた研究を中心に行なわれている。本研究の立場は、後者である。

粉体の特徴として散逸が重要なメカニズム出あることが挙げられる。

力学的散逸 (接触時のみ効く)	粒子間の摩擦 粒子-壁の摩擦 粒子の変形など
流体的散逸 (運動全体に効く)	粒子-流体間の摩擦

粉体に関するこれまでの多くの研究は「力学的散逸」に焦点が当てられていた。しかし一方の流体的散逸 (粘性) の効果の重要性は、落下現象を考えれば分かる。

本研究の目的は、粉体流における流体力学的効果に注目しこの重要性を調べることにある。粉体流動層は流体によって駆動される系であり特に流体が重要と思われるが、これまで流体の効果が効かないと思われていた細管流や振動層での効果を調べることは重要な課題である。

2 流体力学的相互作用 – 近似法と理論的裏付け

2.1 Stokes 近似

非圧縮粘性流体中に分散する多粒子系の問題はそれ自身解明されていない問題である。この流体力学的相互作用の複雑さは、流体場を常に変化して

いる境界(粒子の表面)に対する境界値問題として解く必要があるために生じる。ここでは Reynolds 数が非常に小さい場合に限り、また粒子は単分散であるとする。

非圧縮粘性流体は Navier-Stokes 方程式

$$\rho_f\{\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u}\} = \mu\nabla^2\mathbf{u} - \nabla p \tag{1}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = 0 \tag{2}$$

に従う。低レイノルズ数の時ナヴィエ・ストークス方程式は線形化される。

$$0 = \mu\nabla^2\mathbf{u} - \nabla p \tag{3}$$

$$\nabla\cdot\mathbf{u} = 0 \tag{4}$$

この場合、粒子表面での境界値問題を解くことは多粒子間の相互作用を表すモビリティ行列を計算することと等価となる。ここで、モビリティ行列 M は以下のように定義される。

$$\mathbf{U} = \frac{1}{6\pi\mu a}\mathsf{M}\cdot\mathbf{F} \tag{5}$$

粒子の速度 $\mathbf{U}$ と流体に及ぼす力 $\mathbf{F}$ は

$$\mathbf{U} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{U}^{(1)} \\ \mathbf{U}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{U}^{(N)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{F} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{F}^{(1)} \\ \mathbf{F}^{(2)} \\ \vdots \\ \mathbf{F}^{(N)} \end{bmatrix} \tag{6}$$

しかし、このモビリティ行列は 2 体問題の場合しか厳密には解けていない [3, 4]。そのため、多粒子系を扱うには何らかの近似が必要となる。

2.2 速度場の多重極展開

多粒子の作る速度場を各粒子の中心に関して多重極展開を用いて表して多粒子系のモビリティ行列を近似する。

point force の作る速度場はオセーン・テンソル(ストークス方程式のグリーン関数)で表せる。

$$\mathsf{J}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{r}}(\mathsf{I} + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}) \tag{7}$$

粒子の作る速度場をこのオセーン・テンソルの多重極展開で表す。

$$\mathbf{u}'(\mathbf{r}) = \sum_{\beta}^{N-1} \frac{1}{8\pi\mu}\left(1 + \frac{1}{6}a^2\nabla^2\right)\mathsf{J}(\mathbf{r} - \mathbf{r}^{(\beta)})\cdot\mathbf{F}^{(\beta)} \tag{8}$$

ある速度場 $\mathbf{u}$ 中に粒子を置く時及ぼす力はファクセンの法則から分かる。

$$\mathbf{F}^{(\alpha)} = 6\pi\mu a \left(1 + \frac{1}{6}a^2\nabla^2\right) \left[\mathbf{U}^{(\alpha)} - \mathbf{u}(\mathbf{r})\right]_{\mathbf{r}=\mathbf{r}^{(\alpha)}} \tag{9}$$

この速度場に先の多重極展開した多粒子の作る速度場を用いるとモビリティ形式にまとめられる。

$$\mathbf{U}^{(\alpha)} = \frac{1}{6\pi\mu a}\left\{\mathsf{I}\cdot\mathbf{F}^{(\alpha)} + \sum_{\beta\neq\alpha}^{N} \mathsf{m}^{RP}(\mathbf{r}^{(\alpha)} - \mathbf{r}^{(\beta)})\cdot\mathbf{F}^{(\beta)}\right\} \tag{10}$$

あるいは

$$\mathbf{U} = \frac{1}{6\pi\mu a}\mathsf{M}^{\infty}\cdot\mathbf{F} \tag{11}$$

ここで $\mathsf{m}^{RP}(\mathbf{r})$ は Rotne-Prager テンソルで $1/r$,$1/r^3$ 項を含んでいる。

$$\mathsf{m}^{RP}(\mathbf{r}) \equiv \frac{3a}{4}\left(1 + \frac{a^2\nabla^2}{6}\right)^2 \mathsf{J}(\mathbf{r}) = \mathsf{I}\left(\frac{3}{4}\frac{a}{r} + \frac{1}{2}\frac{a^3}{r^3}\right) + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}\left(\frac{3}{4}\frac{a}{r} - \frac{3}{2}\frac{a^3}{r^3}\right) \tag{12}$$

このように流体力学的相互作用は巾的な長距離相互作用であることが分かる。

2.3 希薄極限の沈降速度の理論 (長距離相互作用の発散の困難)

多重極展開を用いて表した流体力学的相互作用を用いて沈降速度の粒子濃度依存性を調べる。沈降速度とは流体中に一様に分散する多粒子が一様重力中で落下する平均速度のことである。

まず単純に2体相互作用の重ね合わせで沈降速度を計算する。ここで2体分布関数 $g(\mathbf{r})$ を用いる。

$$\frac{<\mathbf{U}>}{U_0} = \left[\mathsf{I} + \frac{N}{V}\int d\mathbf{r}\ g(\mathbf{r})\mathsf{m}^{RP}(\mathbf{r}) + \frac{N}{V}\int d\mathbf{r}\ g(\mathbf{r})\{\text{高次の項}\}\right]\cdot\mathbf{e} \tag{13}$$

ここで $U_0 = mg/6\pi\mu a$ は一粒子の沈降速度。Rotne-Prager テンソルの形 (12) からこの項が発散積分になる。

2.4 Batchelor のくりこみ

Batchelor [5] は他の各粒子が単独に作る速度場を重ね合わせるのではなく、平均からのズレとしての disturbance を重ね合わせるベキだと主張した。

$$\frac{<\mathbf{U}>}{U_0} = \left[\mathsf{I} + \frac{N}{V}\int d\mathbf{r}\ \underline{[g(\mathbf{r})-1]}\mathsf{m}^{RP}(\mathbf{r}) + \frac{N}{V}\int d\mathbf{r}\ g(\mathbf{r})\{\text{高次の項}\}\right]\cdot\mathbf{e} \tag{14}$$

（この式は後に遠方での境界条件を陽に取り扱うことで証明された [6]。）角度積分を行なうと、

$$\frac{< U >}{U_0} = 1 - 5\phi + 3\phi \int_2^\infty dr'\ r'[g(r') - 1] + \phi \int_2^\infty dr'\ r'^2 g(r')\ \text{高次} \quad (15)$$

$$\sim 1 - 6.55\phi \qquad \text{希薄極限}\ (\phi \to 0) \quad (16)$$

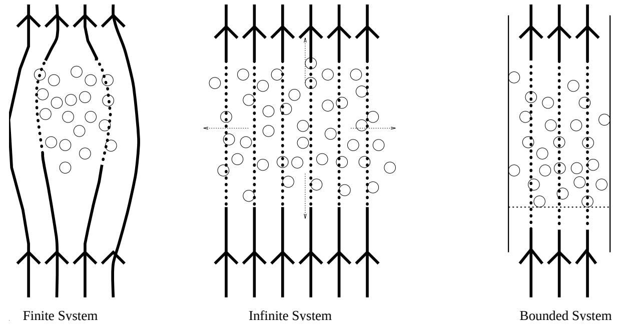
2.5 有限系と無限系と境界に束縛された系 (Batchelor のくりこみの意味)

Batchelor の行なった繰り込みの意味を考えるため、束縛されていない流体中に有限個の粒子がある場合と無限個の粒子がある場合を考える。粒子の落下速度と粒子濃度の関係を考えると直観的にこの 2 つの場合が異なった性質を持つことが分かる。

有限個の粒子の系：粒子が接近する程速く落ちる
無限個の粒子の系：粒子濃度が高い程遅く落ちる

有限個の粒子が粒子が接近する程速く落ちるのは、近くの粒子が周りの流体をひきずって落ちているためである。一方粒子が密集すると流体は流れにくくなることから無限個の粒子は粒子濃度が高い程遅く落ちる。

一見矛盾に見えるこの違いは遠方での境界条件の違いと理解できる。



Finite System　　Infinite System　　Bounded System

束縛されていない流体と有限個の粒子を考えた場合、流体は障害物である粒子を避けるように流れるはずである。（従って混みあった方が粒子は流体からの流れを受けにくい。）束縛されていない流体と、流体度同様に空間に無限に分布する粒子を考えた場合、流体は必然的に粒子の間をながれなくてはいけない。（従って濃度が上がるほど流体は流れにくい。）式の上での表現は、有限個の粒子の場合は無限遠方で速度場が 0 という条件を陰に満たしている為 Batchelor の行なった繰り込みは必要としないが無限個の粒子の場合はこの境界条件を満たすような繰り込みが必要であると言える。

粉体流の数値モデルとしては有限個の粒子の系ではダメであり、無限個の粒子の系か束縛された流体を扱わなければならない。

流体を閉じ込める境界を陽に扱う方が直接的であるが定式化が複雑になるので、ここでは周期境界条件を用いてモデル化する。実際には周期境界条件を先に多重極展開を用いて用いて表したモビリティ行列に課し、エバルド和の方法を用いて具体的に計算する [7]。

$$\mathbf{U} = \frac{1}{6\pi\mu a}\mathsf{M}^{\infty}_{Ewald}\cdot\mathbf{F} \tag{17}$$

2.6　高次の寄与 – 直列回路と並列回路

Batchelor の沈降速度の理論は希薄極限でしか使えず、実際そのまま高濃度を考えると $\phi \sim 0.15$ で負の沈降速度を与える。Batchelor の理論の高濃度への拡張として 2 体分布関数に多体効果を繰り込んでも低濃度で負の沈降速度を与えるという結果は変わらない。しかし高次の寄与を無視するとこの破綻が無くなることが分かった [6]。つまり「高次の寄与」の取り扱いが問題である。

この「負の沈降速度」は沈降速度をモビリティ形式での重ね合わせで表していることに起因する。

		電気回路との類似
モビリティ形式	$U^{\alpha} = \sum_{\beta} M^{\alpha\beta}F^{\beta}$ 速度の重ね合わせ	$I = \sum_i \frac{1}{R_i}V$
レジスタンス形式	$F^{\alpha} = \sum_{\beta} R^{\alpha\beta}U^{\beta}$ 力の重ね合わせ	$V = \sum_i R_i I$

レジスタンス形式での重ね合わせを行なう場合、「抵抗が多くなれば流れにくいが、逆には流れる訳はない！」ので負の沈降速度などは生じない。

2.7　Stokesian dynamics の方法

以上の描像を流体力学的相互作用の計算に用いたのが Stokesian dynamics である [8]。つまり

「高次の寄与はレジスタンス形式で重ね合わせる。」

この為に予め 2 体の厳密解からレジスタンス形式での高次の寄与を抜き出しておく。

$$\mathsf{R}^{lub}_{2B} = \mathsf{R}_{2B} - (\mathsf{M}^{\infty}_{2B})^{-1} \tag{18}$$

このレジスタンス形式での高次の寄与を多粒子系に対して全てのペアで重ね合わせたものを R^{lub} とする。これを用いてレジスタンス行列を次のように近似する。

$$\mathsf{R} \sim (\mathsf{M}^{\infty}_{Ewald})^{-1} + \mathsf{R}^{lub} \tag{19}$$

2.8 Stokesian dynamics は正しいのか ?

この Stokesian dynamics は数多くのシミュレーションにおいてその正当性は示されているが、理論的に示されてはいない。ここでは Stokesian dynamics の方法を沈降速度の理論に応用し過去の理論と比較する [9]。

Stokesian dynamics の方法を沈降速度の理論に適用すると次のようになる。

$$\frac{< U >}{U_0} = < M > = < R^{-1} > = \frac{1}{< (M^{\infty})^{-1} > + < R^{lub} >} \tag{20}$$

Rotne-Prager 近似でのモビリティ行列の平均は 2 体分布関数に Percus-Yevick の動径分布関数を用いると次のように書ける [6]。

$$\begin{aligned} < M^{\infty} > &= 1 - 5\phi - \frac{1}{5}\phi^2 + 3\phi \int_2^{\infty} dr'\ r'[g(r') - 1] \quad (21) \\ &= \frac{(1-\phi)^3}{1+2\phi} \quad (22) \end{aligned}$$

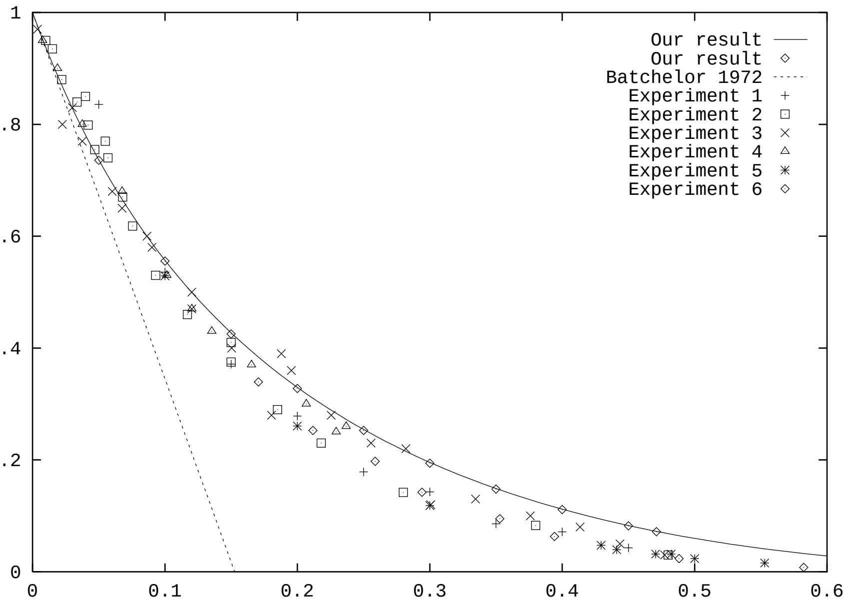
高次の寄与をレジスタンス形式で計算すると、

$$\begin{aligned} < R^{lub} > &= \frac{N}{V} \int d\mathbf{r} g(r) \left\{ R_{2B} - (M^{\infty}_{2B})^{-1} \right\} \quad (23) \\ &\sim 1.492\phi \quad (24) \end{aligned}$$

となるので、まとめると次のように書ける。

$$\frac{< U >}{U_0} \sim \frac{(1-\phi)^3}{1 + 2\phi + 1.492\phi(1-\phi)^3} \tag{25}$$

2.9 実験と理論の比較



縦軸に沈降速度$< U > /U_0$、横軸に粒子の体積分率ϕ をプロットする。この結果高濃度での定量性は問題があるが、広い濃度範囲に対して妥当な結果を示していると言えよう。

3 シミュレーション方法 – 粒子の慣性の効果

長さ a, 速度 U_0 で無次元化した粒子の運動方程式は次のようになる。

$$St\frac{d}{dt}\mathbf{U}^{(\alpha)} = (-\mathbf{F}^{(\alpha)}) - \mathbf{e}_z, \qquad \mathbf{F}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \mathsf{R}^{\alpha\beta} \cdot \mathbf{U}^{(\beta)} \tag{26}$$

(但し粒子の接触は衝突則により表す。) 粒子の終端速度 $\mathbf{V}^{(\alpha)}_{term}$ を導入する。

$$-\mathbf{e}_z = \sum_{\beta} \mathsf{R}^{\alpha\beta} \cdot \mathbf{V}^{(\beta)}_{term} \tag{27}$$

この終端速度を用いて運動方程式を書き直す。

$$St\frac{d}{dt}\mathbf{U} = -\mathsf{R} \cdot \{\mathbf{U} - \mathbf{V}_{term}\} \tag{28}$$

つまり粒子の速度はその瞬間の粒子の配置から決まる終端速度に向かって緩和していくことが分かる。

レジスタンス行列 R が A で対角化されるとすると、

$$St\frac{d}{dt}\mathsf{A}\cdot\mathbf{U} = -(\mathsf{A}\cdot\mathsf{R}\cdot\mathsf{A}^{-1})\cdot\{\mathsf{A}\cdot(\mathbf{U}-\mathbf{V}_{term})\} \tag{29}$$

となる。一般に粒子の慣性の効果 (各粒子の終端速度への緩和時間) にも流体的多体効果が効いてくる。今回の話しではこの慣性効果の多体効果は無視し、以下の運動方程式を用いた。

$$\tilde{St}\frac{d}{dt}\mathbf{U}^{(\alpha)} = -\left\{\mathbf{U}^{(\alpha)} - \mathbf{V}^{(\alpha)}_{term}\right\} \tag{30}$$

4 計算結果と課題

シミュレーション結果

今回のシミュレーションは力学的散逸を一切含まないモデルを用いた。このモデルで「気泡流動層」「細管流の密度波」を再現できた。

課題

課題としては、主にモデルの構成に際して行なった近似、仮定、簡略化に対する評価を系統的に行なう必要がある。

5 惑星科学との関連性

恐らく聴衆の皆さんはこの点に関する私なりの意見を期待されていたと思いますが、思い付いた類似点を示すのみとします。(すいません。)

粉体	星
長距離相互作用する多体系としての粉体	重力多体系としての星
流体中の沈降過程	星雲中の塵の堆積過程

参考文献

[1] 早川, 西森, 佐々, and 田口, 日本物理学会誌 **49**, 18 (1993).

[2] H. Hayakawa, H. Nishimori, S. Sasa, and Y.-h. Taguchi, Jpn. J. Appl. Phys. **34**, 397 (1995).

[3] D. J. Jeffrey and Y. Onishi, J. Fluid Mech. **139**, 261 (1984).

[4] S. Kim and R. T. Mifflin, Phys. Fluids **28**, 2033 (1985).

[5] G. K. Batchelor, J. Fluid Mech. **52**, 245 (1972).

[6] J. F. Brady and L. J. Durlofsky, Phys. Fluids **31**, 717 (1988).

[7] C. W. J. Beenakker, J. Chem. Phys. **85**, 1581 (1986).

[8] J. F. Brady and G. Bossis, Ann. Rev. Fluid Mech. **20**, 111 (1988).

[9] H. Hayakawa and K. Ichiki, Phys. Rev. E **51**, R3815 (1995).