

粉体せん断流の数値的および理論的研究

京都大学 理学研究科 齊藤国靖 (Kuniyasu Saitoh) 早川尚男 (Hisao Hayakawa)

Department of Physics, Kyoto University

1 はじめに

粉体粒子で構成される粉体流には通常の Newton 流体には見られない数多くの特徴がある [1, 2]。散逸的な斥力相互作用をする多体粒子系である粉体流は、非 Newton 流体に分類される。一様せん断流では接線応力がせん断速度の 2 乗に比例する Bagnold 則が知られている。更に密度の一様状態は殆どの場合に不安定であり、不均一な状態になり易い。また巨視的物体であるため、境界や重力の影響を強く受け、しばしば静的な領域と動的な領域が共存した流れになる。そのため、粉体流の理論的解釈は困難であり、僅かに運動論によるものが比較的希薄な流れの記述に成功している。

本研究では、粉体流の特徴のエッセンスを取り出す目的で、比較的単純な系であるせん断流を扱った。粉体せん断流に関しては多くの報告がされており、その多くは重力の影響を無視した理論的・数値的研究である。具体的には、運動論の立場から流体方程式を導き、単純せん断流の定常解を解析的に求めたり [4]、一様せん断流をベースにした線型安定性解析 [5, 6]、せん断面を周期境界にした Lees-Edwards の境界条件を課した数値シミュレーションなどがある [7]。

2 シミュレーション

2.1 粉体モデル

本シミュレーションでは、粉体が接触する際に働く弾性力と抵抗力を、線型バネと相対速度に比例する粘性で近似した粉体モデルを使って、離散要素法 (DEM) によりシミュレーションを行った。

法線方向および接線方向の相対変位をそれぞれ \mathbf{u}_n , \mathbf{u}_t とすると、粉体粒子の接触中にそれぞれの方向に \mathbf{F}_n , \mathbf{F}_t が働く。

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_n &= -k_n \mathbf{u}_n - \eta_n \dot{\mathbf{u}}_n \\ \mathbf{F}_t &= \begin{cases} -k_t \mathbf{u}_t - \eta_t \dot{\mathbf{u}}_t & (\mu |\mathbf{F}_n| > |\mathbf{F}_t|) \\ -\mu |\mathbf{F}_n| \mathbf{t} & (\mu |\mathbf{F}_n| < |\mathbf{F}_t|) \end{cases} \end{aligned}$$

ここで、 \mathbf{t} は接線方向の単位ベクトルであり、 k_n および k_t は線型バネのバネ係数、 η_n および η_t は粘性係数である。接線方向には摩擦係数は μ の Coulomb

摩擦を導入した。相対速度に比例する粘性および接線方向の Coulomb 摩擦がエネルギー散逸を引き起こすモデルになっている。

本シミュレーションで使用したパラメータの値は以下の通りである。

k_n	1.0×10^5	$[\sqrt{U/2d}]$
η_n	48.0	$[U/2d]$
μ	0.2	

接線方向のバネ係数および粘性係数はそれぞれ $k_t = k_n/4$ 、 $\eta_t = \eta_n/2$ である。ここで、 U はせん断の相対速度である。この場合、法線方向の跳ね返り係数 e を計算すると $e = 0.85$ になる。

2.2 せん断流モデル

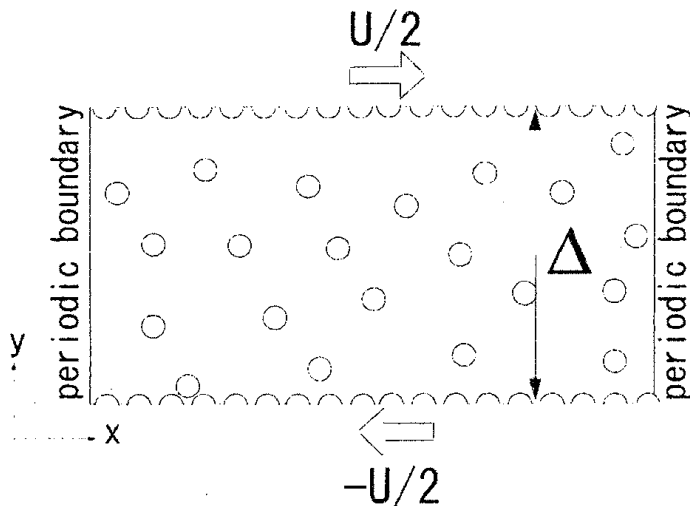


図 1: せん断流モデル

我々は粉体をランダムに配置し、ガウス分布に従う初速度を与えた 2 次元粉体ガスを初期条件とし、粒子を埋め込んだ壁 ($\pm y$ の位置) をそれぞれ x 方向に $\pm U/2$ の速度で動かすことで 2 次元単純せん断のシミュレーションを行った。ここでせん断方向 (x 軸方向) の境界は周期境界条件を用いた。

シミュレーションも含めた以下の解析では、長さを粒子直径 d で、時間スケールを $2d/U$ でスケールして無次元化を行った。また、粒子質量を $m = 1$ としてある。その他、本シミュレーションで用いた外部パラメータの値は以下の通りである。

粒子数	$N = 5000$
容器幅	$W = 180d$
容器高さ	$\Delta = 180d$
平均面積占有率	$\bar{\nu} = 0.12$

3 シミュレーション結果

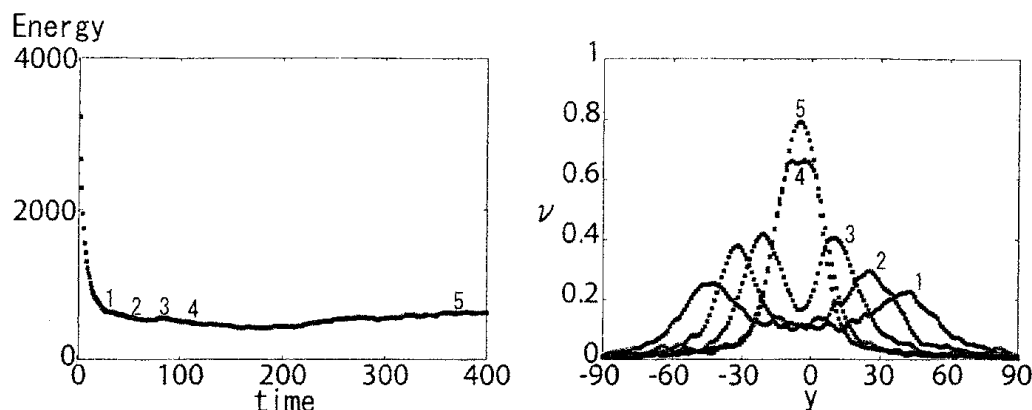


図 2: 系の全エネルギー (左図) と面積占有率の時間発展 (右図)。図中の番号はエネルギーの時間発展の図中の番号と一致している。2つの density cluster が生成され、bulk 中央で衝突し、1つの大きな cluster を形成するまでは、エネルギー的に一定な準安定状態である (1-4)。相分離した状態が定常状態である (5)。

図 2 は系の全エネルギーの時間発展と面積占有率の時間発展を示している。初期の一様な状態において、壁際の粒子が壁に埋め込まれた粒子と衝突し、バルク中央に向かって弾かれ、壁からやや離れた粒子と非弾性衝突を起こしてクラスターを形成する。このクラスターは衝突の余力でそのまま bulk 中央へと移動していき、やがてバルク中央で衝突、合体し、1つの大きなクラスターを形成する。この間、系はエネルギー的にはほぼ一定であり、クラスターの移動と合体は非常にゆっくり起きる。そしてバルク中央にクラスターを形成したまま定常状態に至る。つまり、粉体流はせん断によって相分離を引き起こしたということになる。

4 回転自由度を繰り込んだ連続方程式

Jenkins and Richman [8] は運動論から出発し、回転自由度を含めた粉体流の連続方程式を与えた。しかし、実際には変数の数が多く解析が困難である。回転の効果の有用性については [4, 9, 10] に報告があり、最近 Jenkins and Zhang [11] によって、回転自由度を摩擦係数の展開という形で法線方向の跳ね返り係数に繰り込む理論を提唱している。ここではその 2次元版である Yoon and Jenkins [12] に従い、回転自由度を法線方向の跳ね返り係数に繰り込むことにする。彼らの理論によれば、接線方向の Coulomb 摩擦係数 μ が小さければ、回転の効果は法線方向の跳ね返り係数を μ を用いて

$$e_{eff} \simeq e - \mu + 2(1 + e)\mu^2 \quad (1)$$

とした有効跳ね返り係数に置き換えることで十分であるとされている。このような理論に基づき、面積占有率 ν 、速度場 \mathbf{u} および粉体温度 θ に対し、回転自由度を繰り込んだ連続方程式

$$\begin{cases} D_t \nu = -\nu \nabla \cdot \mathbf{u} \\ \nu D_t \mathbf{u} = -\nabla \cdot \mathbf{P} \\ \nu D_t \theta = -\mathbf{P} \cdot \nabla \mathbf{u} - \nabla \cdot \mathbf{q} - \chi \end{cases} \quad (2)$$

が得られる。なお、速度および粉体温度は無次元化されている。ここで、圧力テンソルは

$$P_{ij} = [p - \eta(\nabla \cdot \mathbf{u})] \delta_{ij} - \frac{1}{2} \lambda (\partial_i u_j + \partial_j u_i) \quad (3)$$

で与えられ、 p は静水圧、 η は体積粘性率、 μ は粘性率を表す。また、熱流は

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla \theta - \kappa_\nu \nabla \nu \quad (4)$$

で与えられ、 κ は熱伝導率を表す。エネルギー散逸率は

$$\chi = \frac{1-e^2}{\sqrt{2\pi}} \nu^2 g(\nu) [\theta^{3/2} - \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \theta (\nabla \cdot \mathbf{u})] \quad (5)$$

5 定常状態

5.1 定常解

せん断流の定常状態では、流体変数は空間座標 y にのみ依存する。従って、

$$\nu = \nu(y) \quad u_x = u_x(y) \quad u_y = 0 \quad \theta = \theta(y) \quad (6)$$

と書ける。これらを連続方程式に代入すると、

$$\begin{cases} 0 = \nabla_y P_{xy} \\ 0 = \nabla_y P_{yy} \\ 0 = -P_{yx} \nabla_y u_x - \nabla_y q_y + \frac{\lambda}{2} \end{cases} \quad (7)$$

となる。最初の2つの方程式から、定常状態では圧力テンソル $P_{xy}(=P_{yx}), P_{yy}$ が空間的に一様であることが解る。

$$P_{xy} = \tau \quad (\text{一定}) \quad P_y = p \quad (\text{一定})$$

従って、 P_{xy}, P_{yy} の表式から

$$\begin{cases} -\frac{\lambda(\nu)}{2} \theta^{1/2} \frac{du_x}{dy} = \tau \\ \frac{1}{2} \nu [1 + (1+e)\nu g(\nu)] = p \end{cases}$$

という関係が得られる。ここで、 $g(\nu)$ は 2 体相関関数であり、

$$g(\nu) = \frac{16 - 7\nu}{16(1 - \nu)^2} \quad (8)$$

を用いる [12]。また、 $\lambda \equiv \bar{\lambda}(\nu)\theta^{1/2}$ とした。これより、せん断方向の速度勾配と温度を ν で表すことができ、

$$\frac{du_x}{dy} = -\frac{2\tau}{\bar{\lambda}(\nu)\theta^{1/2}} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \theta &= \frac{2p}{\nu[1 + (1 + e)\nu g(\nu)]} \\ &\equiv p/\alpha(\nu) \end{aligned} \quad (10)$$

となる。但し、

$$\alpha(\nu) \equiv \frac{2}{\nu[1 + (1 + e)\nu g(\nu)]}$$

である。従って、エネルギー方程式は、 ν のみの微分方程式にすることができ、

$$\begin{aligned} \frac{d}{dy} \left[\frac{1}{\alpha(\nu)^{3/2}} \left[(1 + (1 + e) \frac{d}{d\nu}(\nu^2 g)) \frac{\bar{\kappa}(\nu)}{2\alpha(\nu)} - \bar{\kappa}_\nu(\nu) \right] \frac{d\nu}{dy} \right] \\ = \epsilon \frac{2\alpha(\nu)^{1/2}}{\bar{\lambda}(\nu)} - (1 - e) \frac{\bar{\eta}(\nu)}{\alpha(\nu)^{3/2}} \end{aligned}$$

となる。但し、 $\epsilon = (\frac{\tau}{p})^2$ である。また、 $\kappa \equiv \bar{\kappa}(\nu)\theta^{1/2}$ 、 $\kappa_\nu \equiv \bar{\kappa}_\nu(\nu)\theta^{3/2}$ 、 $\eta \equiv \bar{\eta}(\nu)\theta^{1/2}$ である。ここで $F(\nu) = \frac{1}{\alpha(\nu)^{3/2}} \left[(1 + (1 + e) \frac{d}{d\nu}(\nu^2 g)) \frac{\bar{\kappa}(\nu)}{2\alpha(\nu)} - \bar{\kappa}_\nu(\nu) \right]$ および $G(\nu) = \epsilon \frac{2\alpha(\nu)^{1/2}}{\bar{\lambda}(\nu)} - (1 - e) \frac{\bar{\eta}(\nu)}{\alpha(\nu)^{3/2}}$ と置いて、上式を

$$\frac{d}{dy} \left[F(\nu) \frac{d\nu}{dy} \right] = G(\nu) \quad (11)$$

とすると、積分することにより変形できて、定常状態での ν が

$$\pm \int_{\nu(0)}^{\nu(y)} \frac{F(\nu')}{\sqrt{2 \int_{\nu(0)}^{\nu'} F(\nu'') G(\nu'') d\nu''}} d\nu' = y \quad (12)$$

とできる。この式を数値的に積分することで ν を y の関数として求めることができるのである。さらに (12) 式を用いれば、速度場と温度も同時に y の関数として求まる。

5.2 DEM データと定常解の比較

上記の方法で定常解を求めて、DEM のデータと比較したものが図 3 である。なお、有効跳ね返り係数は $e_{eff} = 0.798$ である。いずれも定常解はシミュレーション値と定量的に一致している。これにより、粉体せん断流の定常状態は、運動論から導かれる連続方程式により説明できたといえる。なお、フィッティングパラメータとして $\epsilon = 5.9 \times 10^{-4}$ を用いた。

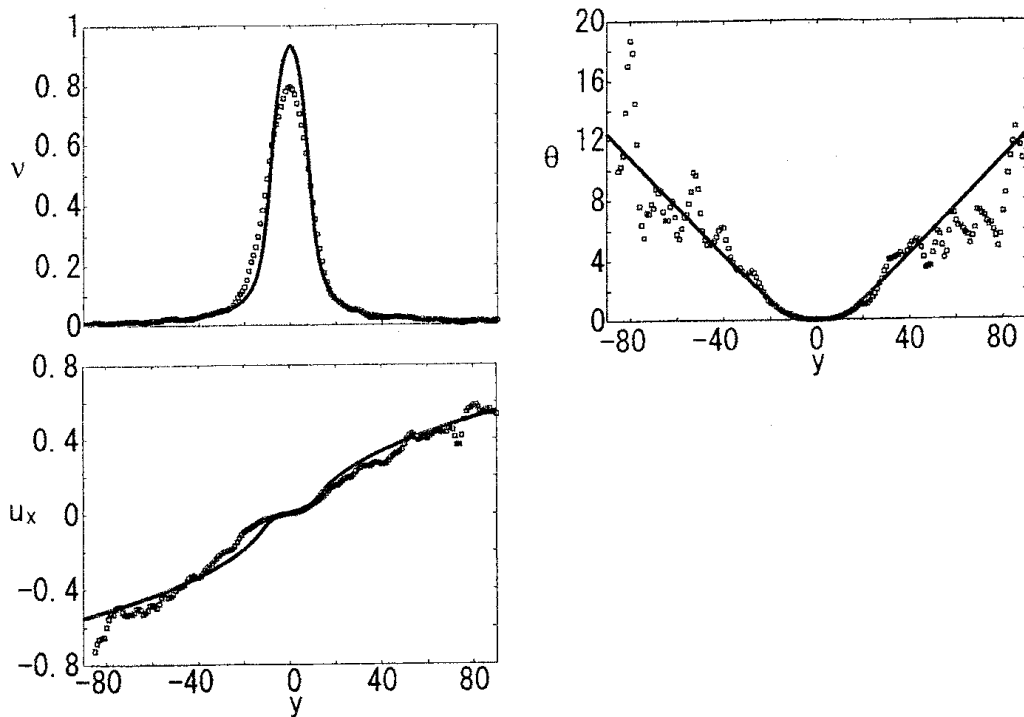


図 3: 定常状態でのシミュレーション値 (ドット) と定常解 (実線)。面積占有率 (左上図)、粉体温度 (右上図) Shear 方向の速度場 (速度場の x 成分) (下図)。ここで $\epsilon = 5.9 \times 10^{-4}$ である。

5.3 弾性極限および強いせん断応力状態について

弾性極限 ($e \rightarrow 1$) では、面積占有率のピークがバルク中央にあり、 $F(\nu)$ が常に正であるにも関わらず、 $G(\nu) > 0$ となり、被積分関数の分母の根号の中が負になってしまう。また、 $\epsilon > 0.06$ になる程強いせん断応力がかかる場合も $G(\nu) > 0$ になってしまい、同様に定常解が存在しない。

DEM においても、上述の極限においてはいずれもエネルギーが増加し続け、定常状態に到達しない。従って、これらの極限で定常解が存在しないのは自然なことと言える。

6 一様解の不安定性

6.1 連続方程式の線型化

連続方程式には一様解

$$\begin{cases} \nu_0 = \text{const} \\ \frac{d\nu_0}{dy} = \text{const} \\ u_{y0} = 0 \\ \theta_0 = \text{const} \\ a = \sqrt{\frac{2(1-e)\eta_0}{\lambda_0}} \theta_0^{1/2} \end{cases} \quad (13)$$

も自明な解として存在するが、実際には相分離した解が得られる。通常の Newton 流体のせん断流は一様解が安定であるが、粉体流のせん断流は一様解が不安定であることを示すため、線型安定性解析を行う。

一様解をベースに、連続方程式を線型化し、流体変数の時間部分はラプラス変換、空間部分はフーリエ変換する。

$$\mathbf{X}(t, x, y) = \mathbf{X}(0, 0, 0) e^{\sigma t} e^{ik_x x} e^{ik_y y} \quad (14)$$

これにより線型化された連続方程式は

$$\begin{aligned} \sigma \hat{\nu} &= -aik_x \hat{\nu} - \nu_0 (ik_x \hat{u}_x + ik_y \hat{u}_y) \\ \sigma \hat{u}_x &= i\nu_0^{-1} \left(\frac{1}{2} a \lambda_\nu \theta_0^{1/2} k_y - p_\nu k_x \right) \hat{\nu} \\ &\quad + i\nu_0^{-1} \left(\frac{1}{4} a \lambda_0 \theta_0^{-1/2} k_y - p_\theta k_x \right) \hat{\theta} \\ &\quad - (\nu_0^{-1} [(\eta_0 + \lambda_0) \theta_0^{1/2} k_x^2 + \frac{1}{2} \lambda_0 \theta_0^{1/2} k_y^2] + iak_x) \hat{u}_x \\ &\quad - (\nu_0^{-1} (\eta_0 + \frac{\lambda_0}{2}) \theta_0^{1/2} k_x k_y + a) \hat{u}_y \\ \sigma \hat{u}_y &= i\nu_0^{-1} \left(\frac{1}{2} a \lambda_\nu \theta_0^{1/2} k_x - p_\nu k_y \right) \hat{\nu} \\ &\quad + i\nu_0^{-1} \left(\frac{1}{4} a \lambda_0 \theta_0^{-1/2} k_x - p_\theta k_y \right) \hat{\theta} \\ &\quad - \nu_0^{-1} (\eta_0 + \frac{\lambda_0}{2}) \theta_0^{1/2} k_x k_y \hat{u}_x \\ &\quad - (\nu_0^{-1} [(\eta_0 + \lambda_0) \theta_0^{1/2} k_y^2 + \frac{1}{2} \lambda_0 \theta_0^{1/2} k_x^2] + iak_x) \hat{u}_y \\ \sigma \hat{\theta} &= \nu_0^{-1} [-2\kappa_\nu \theta_0^{3/2} (k_x^2 + k_y^2) + a^2 \lambda_\nu \theta_0^{1/2} - 2(1-e)\eta_\nu \theta_0^{3/2}] \hat{\nu} \\ &\quad + (\nu_0^{-1} [-2\kappa_\theta \theta_0^{1/2} (k_x^2 + k_y^2) + \frac{1}{2} a^2 \lambda_0 \theta_0^{-1/2} - 3(1-e)\eta_\theta \theta_0^{1/2}] + iak_x) \hat{\theta} \\ &\quad + i\nu_0^{-1} \left[\left(\frac{3}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1-e)\eta_0 \theta_0 - 2p_0 \right) k_x - 4\tau_0 k_y \right] \hat{u}_x \\ &\quad + i\nu_0^{-1} \left[\left(\frac{3}{2} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (1-e)\eta_0 \theta_0 - 2p_0 \right) k_y - 4\tau_0 k_x \right] \hat{u}_y \end{aligned} \quad (15)$$

となる。ここで、各関数の添え字の0は一様解の場合であることを表す。これを行列表記に直し、

$$\sigma \begin{pmatrix} \hat{v} \\ \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \\ \hat{\theta} \end{pmatrix} = \mathbf{L} \begin{pmatrix} \hat{v} \\ \hat{u}_x \\ \hat{u}_y \\ \hat{\theta} \end{pmatrix} \quad (16)$$

とする。さらに、せん断がかかるため、波数が $\mathbf{k} = (k_{x0}, k_{y0} - k_{x0}t)$ (k_{x0}, k_{y0} は時刻 $t=0$ での波数) のように時間発展することを考慮すると、行列 \mathbf{L} を以下のようにヘルムホルツ分解する必要がある。

$$\mathbf{L} = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_1 t + \mathbf{A}_2 t^2 \quad (17)$$

6.2 Layering mode

$k_{x0} = 0, k_{y0} \neq 0$ である Layering mode の不安定性を考える。図4によると、せん断速度 γ を固定 ($\gamma = 22.5$) した時、跳ね返り係数 e および平均面積占有率 \bar{v} に対する σ の実部の等高線プロットである。本シミュレーション ($e_{eff} = 0.798, \bar{v}$) ではいずれも一様解は不安定である。

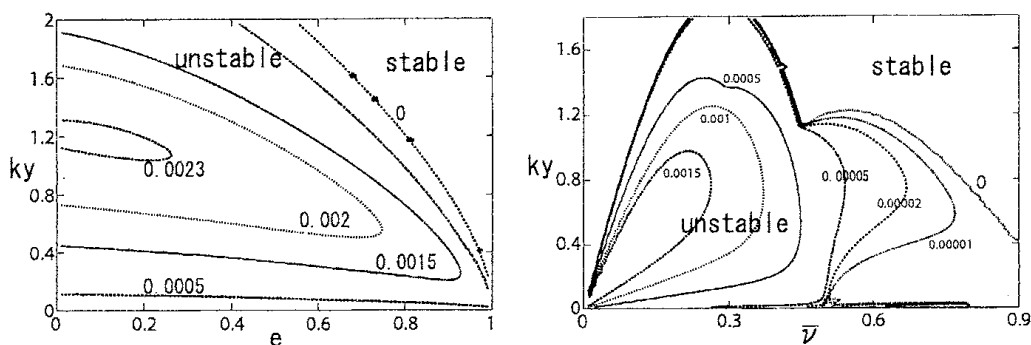


図4: 跳ね返り係数 e に対する不安定な波数領域 (左図) および平均面積占有率の \bar{v} に対する不安定な波数領域のマッピング (右図)。

図によると、弾性極限 $e \rightarrow 1$ 、希薄 $\bar{v} \ll 1$ の場合に一様解が安定になる波数領域が広がってくる。現状では Lees-Edwards 境界を考慮した有限系の解析はしていないが、相図で k_y にカットオフを入れ、定性的に系の安定性を理解できる。このような考察から、 Δ がある程度小さければ、 $e \rightarrow 1, \bar{v} \ll 1$ では一様解が安定になると思われる。

7 まとめと課題

本シミュレーションの結果と理論的な解析から、粉体せん断流が相分離した形で定常化することが解った。定常状態は運動論を基に導出された連続方

程式でよく記述でき、線型安定性解析によって一様解の不安定性も確認することができた。本研究において、高密度・低温領域でも運動論による結果が適用できることは、高密度・低温領域での粒子の衝突の99%以上が2体衝突であるという事実により裏付けられる。また、理論解析において、回転自由度を跳ね返り係数に繰り込むという立場は有効であるということも確認できたといえる。

しかし、今回求めた定常解のフィッティングパラメータの値は、せん断応力 $\tau_0 = -1.7 \times 10^{-3}$ はシミュレーションでの実測値とほぼ同じであるが、垂直応力 $p_0 = 0.07$ はシミュレーションでの実測値 $p_0 = 0.002$ と大きく異なる結果になってしまっている。 p_0 の理論値と実測値の違いの原因を明らかにすることが今後の課題である。

また、クラスターの時間発展については現在解析中であり、相分離のスローダイナミクスの特徴を抽出しつつあるところである。

参考文献

- [1] 早川 尚男 『散逸粒子系の力学』岩波講座 物理の世界 物理と数理 4 (岩波書店, 2003)
- [2] H. M. Jaeger, S. R. Nagel and R. P. Behringer, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 1259, (1996)
- [3] N. Mitarai and H. Nakanishi, *J. Fluid Mech.* **507**, 309, (2004)
- [4] C. K. K. Lun, *J. Fluid Mech.* **233**, 539, (1991)
- [5] P. R. Nott, M. Alam, K. Agrawal, R. Jackson and S. Sundaresan, *J. Fluid Mech.* **397**, 203, (1999)
- [6] M. Babic, *J. Fluid Mech.* **254**, 127, (1993)
- [7] M. L. Tan, I. Goldhirsch, *Phys. Fluids* **9**, 856, (1997)
- [8] J. T. Jenkins and M. W. Richman, *Phys. Fluids* **28**, 3485, (1985)
- [9] N. Mitarai, H. Hayakawa, and H. Nakanishi, *Phys. Rev. Lett* **88**, 174301, (2002)
- [10] I. Goldhirsch, S. H. Noskowitz and O. Bar-Lev, *Phys. Rev. Lett* **95**, 068002, (2005)
- [11] J. T. Jenkins and C. Zhang, *Phys. Fluids* **14**, 1228, (2002)
- [12] D. K. Yoon and J. T. Jenkins, *Phys. Fluids* **17**, 083301, (2005)