

粉体振動層の対流と分岐現象

京大人環 早川尚男 (Hisao Hayakawa)

平成8年 7月 31日

1 初めに

Rayleigh-Benard (RB) convection は現在では標準的な統計力学の教科書にも取り上げられる様になって来ている。即ち開放系における散逸構造の典型例であり、同時に方程式の縮約の現実的ないい例となっているからである。従って RB 対流に代表される流体の対流は統計力学の分野での学部上級から大学院生への格好の教育的題材となっている。逆に言うと流体の対流というのはある意味で非常によく分かっているという事になる。つまり基礎方程式もはっきりしているし、情報の縮約の手続きも routine 化している。勿論、例えば液晶対流の実験に現れる多彩なパターンの形成メカニズムやヴィヴィッドな欠陥の動きは理論的に理解できた訳ではないが方法論的な難しさは少ない。つまり枠組ははっきりしているのである。

最近、離散的散逸素子である粉体の研究が一部で盛んになされている。[1] 粉体そのものは気体、液体、固体が共存したような状態を示しているが特に興味深いのはエネルギーの供給と散逸がバランスしたときに見られる散逸構造としての流体的振舞いである。就中、粉体における対流は実験的にも簡単に再現できる問題であるので相当数の研究がなされている。粉体の対流は最も簡単には重力 (加速度 g) のある真空中に粉体集団をおき、それに高周波 (角振動数 $\omega = 2\pi f$, f : 周波数、振幅 A) をかけてゆすると加速度振幅 $\Gamma = A\omega^2/g$ が 1 を越して間もなく実現する。こうした問題は一般に粉体振動層の問題と呼ばれて流体の Faraday 問題、すなわち、容器に入った水を振動させることによって生じる表面波の問題と深く関わっている。現象的には水の問題とは異なり粉体振動層にはバルクに極めてゆっくりとした対流が生じる。この種の対流が Γ の比較的大きい処で様々な相を示す事は本研究会でも青木によって報告されているのでそちらを参考にされたい。

粉体振動層に対する研究は専ら実験と離散要素法によるシミュレーションに依拠していた。その構成要素の動力学の単純さにも拘らず、否、その簡単さ故に理論的研究は殆んど進んでいない。従って現状のままでは粉体研究は単に結果の寄せ集めに過ぎず、そのまま研究が廃れるのであればあまりにも悲しい。現在の処、粉体の研究者そのものが研究に対する目的を失っている様に感じられる。私個人から見ると粉体が流動的挙動を示す際にいかに流体と異なり或は似た点があるのかという点に興味がある。ある意味では粉体は原子が重力が効く程大きくて、散逸系であったら統計力学、熱力学、流体力学はどう変更を受

けるかという基礎的な問題と深く関わっている。本論ではこの中で粉体の流体力学というものについて考えていきたい。

粉体における流体的挙動と原子集団が示す流体的挙動を比較すると随分状況が状況が異なる事に気がつく。実際、粉体では粒子サイズと流体的スケールの分離が不十分である点、平均自由行程が粒子間隔やサイズとあまり変わらない点、また素子が本質的に散逸的である点などは粒子スケールから流体力学を構成する上での大きな障害となっている。勿論、個々の粒子の運動方程式（この基礎も未だに確立していないが）から非常に遅い運動であるマクロな流体的な運動を直接抽出するのは難しい。従って何らかの意味で有効流体力学を構成する必要がある。従って対流を論ずる上で熱流体の Boussinesq 方程式に対応する基礎方程式から議論を始めなければならない。

こうした現況を踏まえて本論では次のように議論を展開したい。本論の構成は研究会で筆者が講演したものと若干構成を異にする。まず次節で Jenkins and Savage[2] による Enskog 方程式に基づき保存量の方程式として流体の方程式を構成する手法を紹介する。この手法は希薄気体から流体の方程式を導く Chapman-Enskog scheme と対応しているがその問題点も同時にまとめておく。次に我々のオリジナルワーク [3] を紹介する。Jenkins and Savage による手法は謂わばバルクの粒子の動きを議論しているので次に境界の影響で何が本質的に変化するかを議論する。またその「流体」の方程式を用いて対流の発生のメカニズムを一様な並進運動からの分岐という立場で議論する。更にここで得られた解析の問題点をまとめて現象論的にどう流体の方程式を変更し得るかを議論する。尚、この仕事は Lehigh University の Su Yue 及び Daniel C.Hong との共同研究に基づいている。

2 運動論的手法

粉体の運動学において現在までで唯一の成果と言えるのは Jenkins and Savage[2] の仕事である。彼らの行った事を要約すれば次のようになる。(1) 出発点を粒子の速度-配位分布の時間発展発展方程式に置く。この出発点は古典粒子系でいえば Boltzmann 方程式に相当する。粉体の場合は平均自由行程に対する粒子半径の比が小さくないので高濃度分子液体に対して有効であることが良く知られている Enskog equation を基礎方程式とする。非弾性衝突の効果は摂動論として扱う。(2) 非弾性衝突の効果が小さいので速度分布は Gaussian であると仮定する。(3) 境界の影響は考えない。(4) これらの条件の下で、保存量に対する遅い方程式を導出する。結果は（保存量でないエネルギー方程式を含めて）質量の保存と運動量の保存などが得られる。運動量の保存は Navier-Stokes 方程式に対応した流体の運動方程式を与える。また圧力、粘性率などに微視的表式を与えることができる。その結果は実験と矛盾しない。(5) Jenkins and Savage[2] 或はその垂流の理論を支持する実験やシミュレーションの結果が幾つかある。

この様な結果に対してたちどころに幾つかの疑問を提出することができる。(i) そもそも濃度展開ができないところでの Chapman-Enskog scheme は意味論から言っても不明確である。(ii) 更に Chapman-Enskog scheme と同じくこの手法では最低次では非粘性の Euler 方程式、また展開の次の次数で Newton 的な粘性の効果が現れる。現在の所、展開を 1 次

で切断してよい理由は正当化できないし、実験的には明らかに Non-Newtonian 的な振舞いをする。(iii) 非弾性の効果は非常に小さくても顕著である。例えば H theorem は散逸が入ることによって直ちに成り立たなくなる。また仮に成り立つとするとエネルギーの保存が存在しないことから速度分布は指数関数となる方が自然である。この指数分布は幾つかのシミュレーションで観測されており (2) における Gaussian 分布という仮定は強過ぎる。

この様に Jenkins and Savage の理論は粉体の kinetics を記述する理論の中では唯一予言能力のあるものであるが同時に基礎的な面で問題も多い事ははっきりしている。この中で彼らの予言した粉体同士の衝突に伴って現れる圧力の表式を与えておこう。 ρ を粒子の質量密度、 ϕ を粒子の体積分率として

$$P = \phi \rho \Theta [1 + 2(1 + e)\phi g_0] \quad (1)$$

但し $\Theta/2 = 3/2 \langle \delta v^2 \rangle$ のように粒子の運動エネルギーの揺らぎから決まる granular temperature であり、 e は非弾性の程度を表すはねかえり係数、そして g_0 は衝突確率を表すために粒子が衝突する地点での 2 点相関関数である。通常 g_0 はハードコア粒子の平衡分布関数の値が使われておりその場合、非常に高い精度で

$$g_0 = (1 - \phi/2)/(1 - \phi)^3 \quad (2)$$

という式で近似できる事が知られている [4]。粘性率も同様な表式があるがここでは詳細は紹介しない。

また最近、いくつかのグループ [5, 6] が Jenkins and Savage [2] の議論に基づき定常配位分布関数を議論している。この際、彼らは配位分布と速度分布が分離できることを、速度分布が Gaussian に従う事を仮定して配位分布が希薄の極限で Fermi 分布に従い得ることを示した。この事は粒子の配置は排除体積のみで決定されていることを示唆しており [7] 実験的にも正しい事が確認されている [8]。この辺りの議論は詳述しないが次章で有効モデルを構成する上での重要なヒントを与える。

3 有効流体モデルと対流の発生

3.1 有効流体モデル

さて前章で概説した通り、粉体に関する信頼における微視的な理論は存在しない。しかしながら粉体が流体の様に振舞い Jenkins and Savage [2] の理論はある側面では実験を説明しているのも事実である。従って粉体の流動を考える際に現象論的な連続体理論を構成し、尚且それが Jenkins and Savage の理論と矛盾しないものを取るというスタンスもあり得る。本論ではそのスタンスに立って有効理論を構成し、更に粉体振動層における対流現象を説明できるかどうかを検証する。

流体的挙動を現象論的に記述するためには粗視化された変数で流体的方程式を書き下す必要がある。ここでは質量の保存則と運動量の保存則を現象論的に導入して、それを (1) などで決まる圧力や粘性率の表式で補完する。通常ではエネルギー (温度) の連続の方程

式も必要となるが、ここでは、熱の緩和は充分早いとして考慮しない。この単純化はエネルギー方程式に伴う様々な問題、つまり保存量でないものに対する連続の式が意味を持ち得るか、速度分布が非ガウスである場合に単純な連続の式が有効かどうかという問題を避けるためでもある。従って質量密度 $\rho(\mathbf{r}, t)$ と速度場 $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ が動的な場の変数である。話しを簡単にするために容器に固定したフレームで運動を記述しよう。そのフレームでは ρ と \mathbf{v} は変数を適当に無次元化して (長さを g/ω^2 , 時間を $1/\omega$ でスケールする)

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0 \quad (3)$$

$$\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = \hat{z}(\Gamma \sin t - 1 - \lambda) - \frac{1}{\rho} \nabla P + \frac{1}{R} [\nabla^2 \mathbf{v} + \chi \nabla(\nabla \cdot \mathbf{v})] \quad (4)$$

と書く事が可能であろう。ここで \hat{z} 鉛直方向の単位ベクトル、 λ は粒子が底面と接触している時に生じる Lagrange multiplier を表す。但しシミュレーションの際は λ を陽に扱わなくても境界条件を通して運動方程式にその効果は現れる。いずれにしても空中に分散している時は $\lambda = 0$ として接触力がある場合は $\lambda = \Gamma \sin t - 1$ とする。(4) 式の右辺第一項はフレームの変換に伴う非慣性力を表している。また第3項に現れる散逸項において R は Reynolds number であり χ は体積粘性率である。また圧力 P には (1) を用いる。

3.2 線形安定性解析

この流体モデル (3),(4) は温度 (熱) の伝播速度が無限大という性質を反映して一様に振動する解を持つ。即ち粉体の集団が一つのブロックとして容器の中で跳ねる解である。この場合、粉体のブロックと容器の底とのギャップ $\Delta(t)$ は

$$\Delta(t) = \Gamma(\sin t_0 - \sin t) + \Gamma \cos t_0(t - t_0) - \frac{1}{2}(t - t_0)^2 \quad (5)$$

に従う。ここで t_0 はブロックが底から離脱する時間である。当然ギャップの変化率は $V_{rel} \equiv d\Delta(t)/dt$ である。一般に $\Delta(t)$ の運動はカオティックになることが知られているがここでは簡単のために次のような仮定を行なう。つまり粉体ブロックは完全非弾性的であり各周期において t_0 に容器から離れ t_1 で容器に再び接触するというものである。この離脱時間 t_0 は数値的に簡単に求める事が可能である。

このような単純化したブロック解に対して線形安定性解析を行なおう。当然の事だがこのモデルで $\lambda = \Gamma \sin t - 1$ とおくと $\rho = 0, \mathbf{v} = 0$ の解は安定である。これは $\Gamma < 1$ の場合の Fixed bed と呼ばれる唯、単に粒子を積み上げて外力の加わらない状態に対応している。

現実に興味があるのはブロック解 $\rho = \rho_0, \mathbf{v} = V_{rel}(t)\hat{z}$ に対する安定性である。解析の詳細は原論文 [3] に譲るとして容器の底での境界条件を考慮することでブロックが空中に浮遊している間 ($t_0 + 2n\pi < t < t_1 + 2n\pi$) の線形の方程式は ρ のゆらぎの常微分方程式

$$\ddot{\rho}_q + B(q)\dot{\rho}_q + iC(q)\rho_q + D(q)\rho_q + iE(q)\rho_q = iL_q(\tau)\dot{\rho}_q + M_q(\tau)\rho_q + iN_q(\tau)\rho_q \quad (6)$$

となる。ここで

$$B(q) = \hat{R}^{-1}(\hat{\pi}^2 m^2 + q^2), \quad C(q) = 2q\sqrt{\Gamma^2 - 1} \quad (7)$$

$$D(q) = T_e(q^2 + \hat{\pi}^2 m^2) - \frac{3}{2}q^2\Gamma^2 + q^2, \quad E(q) = -q + \sqrt{\Gamma^2 - 1}\hat{R}^{-1}q(\hat{\pi}^2 m^2 + q^2) \quad (8)$$

及び $L_q(\tau) = 2q[\tau + \sqrt{\Gamma^2 - 1} \cos \tau - \sin \tau]$, $M_q(\tau) = -2q^2(\Gamma^2 - 1) \cos \tau + 2q^2\sqrt{\Gamma^2 - 1} \sin \tau + \frac{q^2(\Gamma^2 - 2)}{2} \cos(2\tau) - q^2\sqrt{\Gamma^2 - 1} \sin(2\tau) - 2q^2\sqrt{\Gamma^2 - 1}\tau(1 - \cos \tau) - 2q^2\tau \sin \tau + q^2\tau^2$ 及び $N_q(\tau) = -q\sqrt{\Gamma^2 - 1} \sin \tau - q \cos \tau + \hat{R}^{-1}q(q^2 + \hat{\pi}^2 m^2)(\tau + \sqrt{\Gamma^2 - 1} \cos \tau - \sin \tau)$. である。対流などのゆっくりした運動の安定性を論じるには $L_q(\tau)$ など ($\tau = t - t_0$) の早い変数の影響をそのまま見るのではなく実際に (6) が有効な間の平均的な効果を知る必要がある。従って $L_q(\tau) \simeq \langle L_q \rangle = \frac{1}{\tau_0} \int_0^{\tau_0} d\tau L_q(\tau)$ などとするとよい ($\tau_0 = t_1 - t_0$)。従って揺らぎの有効増幅率は

$$\sigma_{eff}(q) = \tau_0 \left\{ \left(\tilde{E} - \frac{B\tilde{C}}{2} \right)^2 - B^2 \left(\tilde{D} + \frac{\tilde{C}^2}{4} \right) \right\} + (2\pi - \tau_0)(-B^2 D_0). \quad (9)$$

の判定に帰着する。但し $\tilde{C} = C(q) - \langle L_q \rangle$, $\tilde{D} = D(q) - \langle M_q \rangle$ and $\tilde{E} = E(q) - \langle N_q \rangle$ である。この (9) において τ_0 が掛かっている項はブロックが浮遊している時の寄与であり、 $2\pi - \tau_0$ に比例する項は接触力の働いている時の寄与である。この結果に物理的なパラメータの値を代入して $\sigma_{eff}(q)$ の波数依存性を様々な Γ に対して図示したのが図 1 である。

線形安定性解析の結果をまとめると 1) $\Gamma > \Gamma_c$ で σ_{eff} は有限の波数 q_m で最大値を持つ。特に $\Gamma = \Gamma_c$ の時に一番不安定な波数 q_c が有限であるということはその大きさを持った構造が選択される事を意味する。2) q_c はシステムサイズを無限大にすると $q_c \rightarrow 0$ となる。このことはシミュレーションでの周期系での対流ロールの消失と対応している。3) 揺らぎの最大成長波数 q_m とシミュレーションから観測されるロールのサイズは無矛盾である。従ってこの線形解析は粉体振動層の対流発生メカニズムの本質を捉えていると言える。

3.3 シミュレーション

前節で述べた線形安定性解析の有効性を議論するために流体モデル (1)-(4) のシミュレーションも行なった。シミュレーションでは粒子'流体'は上方にも蓋のある容器に閉じ込められているとした。また全ての境界で粒子流に粘性境界条件を課した。このことは容器と粒子の間の摩擦が粒子間より大きいことを反映している。シミュレーションではシステムを 32×32 のグリッドに分割して時間発展は Crank-Nicolson 法と Runge-Kutta 法の両方で行ない結果の収束性を確かめている。またシミュレーションでは $\lambda = \chi = 0$ として圧力の項も理想気体のものに簡略化している。

図 2 は対流が発生していないときの中心にあるグリッドにおける速度場の鉛直成分の時間発展を図にしたものである。一様に振動しており $\Gamma < \Gamma_c$ のシミュレーションの結果がブロックが振動するという描像の有効性が確かめられた。但し接触力を陽に導入していないことを反映して $\Gamma < 1$ でも振動するのはご愛敬である。図 3 では $\Gamma > \Gamma_c$ での対流パターンのスナップショットを図で示した。きれいな対流ロールのペアが観測されておりモデルの有効性を示唆している。以上の事から'粉体'流体モデル (1)-(4) は現象論としてそれほど悪くないモデルを構成していると言えよう。

4 結果の議論と今後の発展に向けて

この様に見、うまく機能している様に見える我々の解析だが問題が多い。最大のものは温度の素早い緩和を仮定したためかブロックの底の運動の自由度の方が大きくなって、対流のロールが底の方にむしろ出来やすいという傾向を示している。この結果、縦長の容器でシミュレーションを行なうと対流ロールが縦方向にも並ぶという結果が出た。これは実験で観測される対流ロールは表面近くに局在するという事実と相反するものである。従って我々が意図的に避けた問題、温度（運動の自由度）のローカルな変化を方程式にカップルさせる必要がある。実際、既に本文中で触れた粒子の配位分布がフェルミ分布に近いというのは見方を替えると表面付近にのみ運動の自由度が局在していることを示しており、その事を理論中に組み込まねばならない。逆に言えば運動自由度の局在を記述できればより正しい現象論モデルを構成できることになる。

また本文中で示唆した運動論的手法の有効性の再検討も急務である。現在、配位分布のみが議論できているが温度の分布との関係も含めて検討を要する。同時に表面に運動の自由度が局在すれば低温物理におけるフェルミ流体的な振舞いの存在も検討に値する。

いずれにしても問題山積であり粉体の問題から散逸系の統計・熱力学を抽出するという初期の目的には遠い。わずかに流体的モデルを現象論として提出してその一部の有効性を示したのみである。しかしながら結果としては満足いくものではなく問題の難しさを浮き彫りにするのみである。こうした難しさは流体的モデルの構成に不可分の問題として粉体の統計・熱力学の問題が入り込んでいるからである。端的な例が温度の果たす役割であり、粉体における温度は単に運動エネルギーでいいのかという問題は避けて通れない。排除体積が重要であるということはむしろポテンシャル効果の方が温度として重要である可能性を示唆している。今後の発展に期待したい。

参考文献

- [1] reviews, e.g. H. M. Jaeger, S. R. Nagel and R.P.Behringer, *Physics Today* 49, 32 (1996); H.Hayakawa, H. Nishimori, S. Sasa and Y-h. Taguchi, *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1*, 34, 397 (1995).
- [2] J.T.Jenkins and S.B.Savage, *J.Fluid Mech.* 130, 187 (1983).
- [3] , H.Hayakawa, S.Yue and D.C.Hong, *Phys.Rev.Lett.*75, 2328 (1995).
- [4] N.F.Carnhan and K.E.Starling, *J.Chem.Phys.* 51, 635 (1969).
- [5] T.Ohtsuki, unpublished.
- [6] H.Hayakawa and D.C.Hong, in preparation.
- [7] H.Hayakawa and D.C.Hong, to be published in *Int.J.Bifurcation & Chaos*.

[8] E.Clement and J.Rajchenbach, *Europhys.Lett.* **16**, 133 (1991).

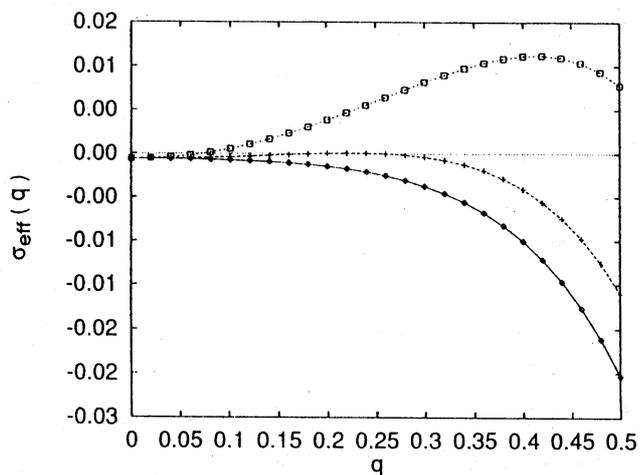


FIG. 1. The effective growth rate $\sigma_{\text{eff}}(q)$ as a function of the wave number q for $\Gamma = 1.05$ (diamonds), for which $\sigma_{\text{eff}}(q) < 0$ for all values of q . For $\Gamma = 1.2 > \Gamma_c = 1.12$, $\sigma_{\text{eff}}(q)$ becomes positive for a band of q (squares). Γ_c is determined by the condition that the maximum of $\sigma_{\text{eff}}(q)$ becomes zero at Γ_c (crosses). The parameters used are $T_e = R = 10$ and $L = 10$.

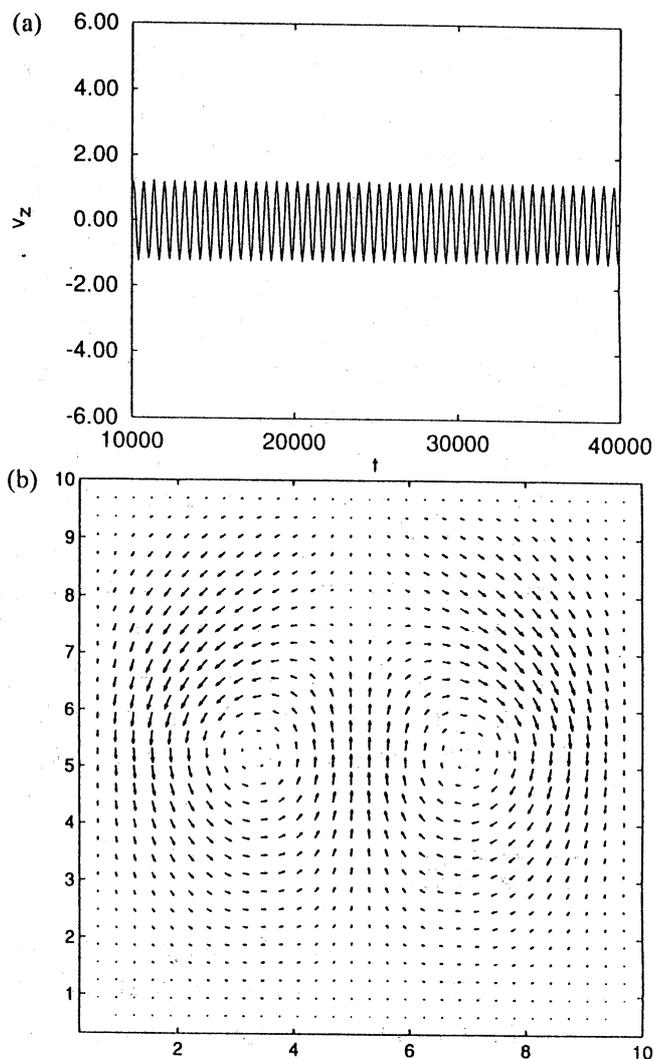


FIG. 2. (a) A bouncing solution. The speed v_z at a given point is plotted as a function of time for $\Gamma = 0.9$. (b) For $\Gamma = 1.2 > \Gamma_c = 1.12$, the bouncing solution becomes unstable and permanent convective rolls appear inside the box. The arrows are the velocity vectors and the direction of the arrow is the direction of the flow. The parameters used in simulations for (a) and (b) are the same as those in Fig. 1.