粉粒体の対流運動の数値モデル

東工大 理 田口善弘[1]

近年、(私もその端くれであるところの) 理論物理学者の間で、粉粒体についての興味が急速に高まっている。理論物理の興味からいえば、ニュートンの一体問題から始まった物理学は解析力学というかたちで、質点および剛体の古典力学として完成を見、その修正として量子力学や相対論という現代物理学が誕生し、現在は宇宙論と結び付く素粒子論として発展した。しかし、一方において、物理学にはもう一つの大きな流れがあり、これが、弾性体、流体、粘弾性体などの連続体の物理学として発展してきた。この部分は、欧米において長いこと「化学」の一分野として扱われてきたが、昨年のノーベル賞が高分子や液晶といった物質を主に研究してきた de Gennes に与えられたことからも判るように、現在急速に物理の最前線へと踊り出しつつある。粉粒体に対する興味の高まりもこの流れの中にあり、「粉粒体」という物質を弾性体や流体のようなある種の抽象的な物性を付与された連続体という観点からとらえようという動きになっている。従って、この動きの究極の目標は「粉体の基礎方程式とは何か」というところにある。

さて、このような目標が設定された時、行き方は2通りある。すでに良く知られた方程式 (たとえば Navier-Stokes 方程式) から出発して、それに様々な変更を加えながらゴールに到達しようというもの。もう一つのやり方としては、なるべく極端な場合を想定し、その極端な状況の中に、粉粒体の本質を見て行こうという立場である。本研究は後者の立場に立つ。ここで選ばれた現象はつよい鉛直振動下に晒された粉粒体の集合体に生じる対流現象である。この現象は１８３１年に電磁気学の先駆者として有名な Faraday によって既に発見されていた [1]。この事実からも伺い知れるように電磁気学といういかにも正統的な物理の１分野と粉体などという物理としてはいかにもうさんくさげな対象が当時はほとんど同じレベルの理解度でしかなかったと想像される。その後の、この目を覆うばかりの現象としての理解度の差は、しかし、単に問題の難易度とは別のところにあったように思われる。即ち、電磁気学は既に存在していた偏微分方程式という解析学の枠組にうまく載ったのに比べ、粉粒体はその現象をうまく記述する適当な枠組をもたなかった、という点である。つまり、現象の難易度もさることながら、方法論という点で粉粒体の物理学は大きく立ち後れたといえよう。この点において近年大きな進歩をもたらしたのが計算機の急速な発展である。これにより、離散要素法などの計算手法が現実の様々な現象を記述できるようになりつつあり、物理としての興味の高まりもこの点にかなりよっている部分は大きい。本研究もそのような流れの中にあり、離散要素法的なアプローチを用いて、上記の古くから知られている伝統的かつ本質的な現象を解明しようというものである。但し、物理的な興味から出発しているため、多少、現実性を犠牲にしてモデルの単純化を図っていることはお断りしておく。

[1]Y-h. Taguchi Tel. 03-3726-1111 ext. 4042 e-mail : ytaguchi@cc.titech.ac.jp

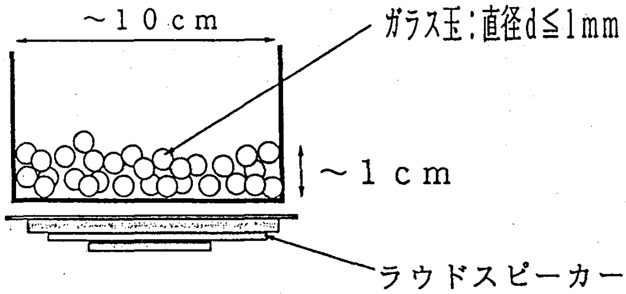


図1

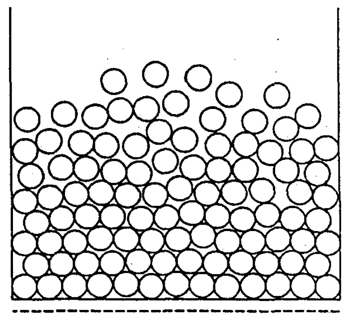


図2

まず、現象を説明する。典型的な実験装置の模式図を図1に示す。大体、差渡し１０cm程度の容器に直径1 mm以下程度のガラス玉を深さ数cm程度に敷き詰める。次にこれをラウドスピーカーの上に載せ、スピーカーを振動させる。簡単のためスピーカーの振動が$b\cos\omega_0 t$に従うとする。すると、容器が受ける加速度はこの関数を時間tについて2階微分をしたものであり、その振幅（加速度振幅）$\Gamma = b\omega_0^2$である。この加速度振幅が重要なパラメーターであり、このΓがある値（重力加速度gの程度）をこえたところで、粉粒体に非常に変わった挙動が観測されるようになる。

即ち、1. 粉体の表面が盛り上がって小山を形成する。2. 粉体の内部で対流が生じる。状況としては、噴火している火山を思い浮かべてもらえれば良いと思う。山の中心から内容物が吹きだし、ふきだしたものが、斜面を転がり落ちながら、裾野に達し裾野から山の内部にもぐり込んで再び山頂から吹き出す、という状況である。このような現象が単に粉粒体を上下に強く振動させるだけで生じるのである。[2, 3] 本当なのだろうか？

以下では、離散要素法的なアプローチで数値計算を行ない、この現象が理論物理でいうところの動的相転移であることを示唆する [4]。つまり、この現象は容器底面の振動が一様でないために生じるのではなく、システムの内部に起因した自発的な現象であることを示す。使用されるモデルは、回転やクーロン摩擦の効果を無視し、また、弾性的な相互作用や粘性力を一番単純な線形相互作用で近似し、また、法線方向と接線方向の相互作用の区別も無視した単純化された離散要素法とでもいうべきもので、

$$\ddot{\mathbf{x}}_i = -\sum_{j=1}^{N}\theta(a-|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|)\left(k(\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j-a\frac{\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j}{|\mathbf{x}_i-\mathbf{x}_j|})+\eta(\mathbf{v}_i-\mathbf{v}_j)\right)-\mathbf{g},$$

である。ここで、$\mathbf{x}_i$は粉体粒子の重心の座標。$\theta(x)$はいわゆるヘビサイド関数で引数xが正のときは1をそれ以外は0をとる関数である。kは弾性定数、aは粒子の直径、ηは粘性定数である。また、$\mathbf{g}$は重力加速度である。この方程式の意味は粒子間の距離がaつまり直径以下になった時に相互作用しなさい、いいかえれば、接触している間に粘弾性相互作用をしなさいというものである。この方程式をオイラー差分的に積分するのであるが、その際、時間刻は固定ではなく、粒子の移動距離が大きくなり過ぎないように調整しながら、積分する。このモデルでは、k, ηを決めることは正面衝突の際の反発係数eと衝突所要時間t_{col}を決めたことに相当する。($e = \exp(-\eta\pi/\omega), t_{col} = \pi/\omega$,$\omega = \sqrt{2k-\eta^2}$)

シミュレーション条件は、まず、空間は２次元である。２次元空間の中に鉛直方向に $b\cos\omega_0$ のような関数で振動しているような容器をおく。ただし、容器の壁の高さは無限大とする。このような容器の中に、１００個の粒子を入れる。粒子と容器の相互作用は、容器の底との間では、単なる弾性的な相互作用とし、壁との間は粘弾性相互作用とするが、粘性は粒子間のものより、少し大きめにしておく。(これは「対流の向き」を実験で観測されているものと同じにするためである。壁との間の相互作用が

非粘性（弾性のみ）であると、対流の向きは壁ぎわで上向きとなり、壁ぎわで下向きが観測される実験の場合と異なってしまう。）図２にシミュレーションで得られたスナップショットを示す。条件は $a = 2.0, \Gamma = 1.44, g = 1, e = 0.9, t_{col} = 0.1$ である。図３(a)($\Gamma = 1.44$) と（b）($\Gamma = 2.71$) には、長時間の粒子の流れの方向が描かれている。これを見ればすぐ判るように、粒子がまるで流体のように対流している。いまのところ、残念ながら、スロープ（小山）の自発的な形成の再現には成功していない。

(a)　　図３　　(b)

ここで、果たしてこの現象が「動的相転移」であるかどうかを調べてみよう。つまり、Γの値を０から徐々に大きくしていった時, 対流がある臨界値Γ_cを越えたところで突然始まるというふうになっているかどうかである。これを確認するために、$b = 1.1$ に固定し、ω_0を変化させてΓを変え、「対流の強さ」$\mathcal{J}$（具体的には、図３に描かれている流れベクトルの２乗和の平方根）をプロットしたのが図４である。確かに、$\Gamma \cong 1$ のあたりで $\mathcal{J}$が劇的に大きくなっており相転移が起きていることが判る。

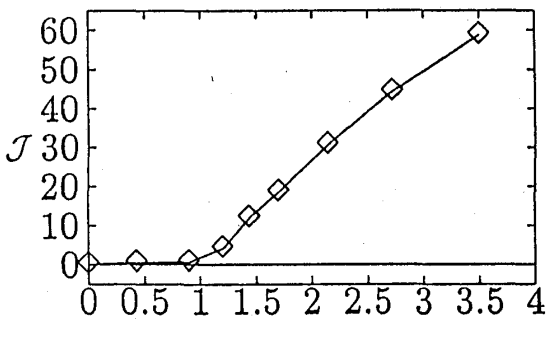


図４

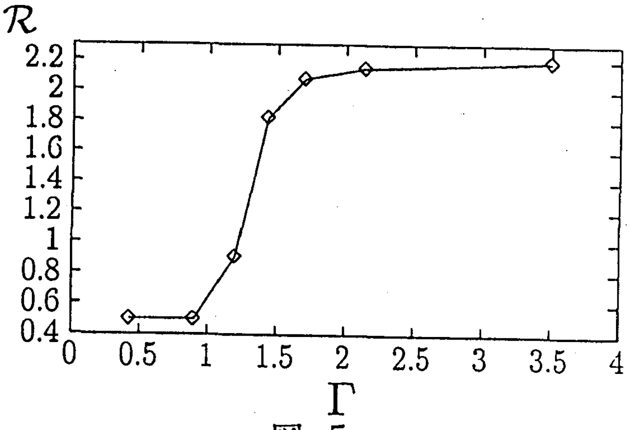
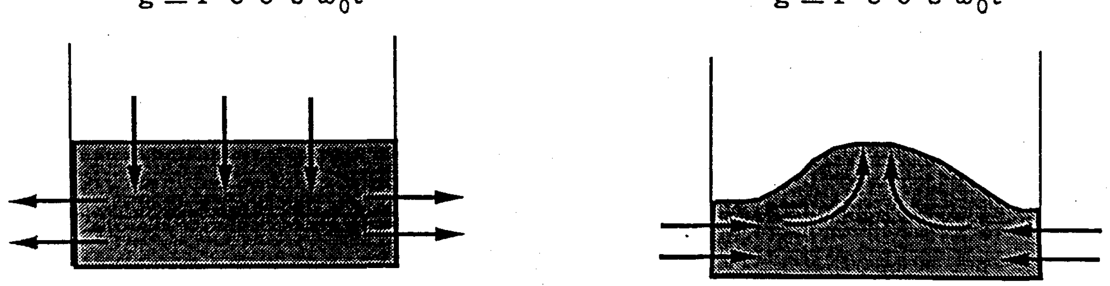


図　5

図３を見て気がつくことは対流が表面の辺りでのみ生じており、容器の下の方は「固層」のままであることが判る。しかも、Γを大きくするに従って、表面の「流動層」の厚

さが徐々に大きくなっているように見える。この現象は実験でも観測されている [5]。図5にこの流動層の厚さ $\mathcal{R}$ のΓ依存性を示す。ここでもやはり相転移が起きていることが確認できる。

最後に、この動的相転移がどうして生じるのかについて定性的な考察を加えよう。$\Gamma > g$ の時は振動の１周期を$-g < \Gamma \cos\omega_0 t$ の状態（以下、状態１と呼ぶ）と$-g > \Gamma \cos\omega_0 t$ の状態（以下、状態２と呼ぶ）とにわけることができる。状態１に於いては、容器の下向きの加速度が重力加速度よりも小さいので、重力によって加速された粒子は容器によって落下を妨げられ、結果的に容器の中に強く押し込まれることになる。この状態では粒子は互いにほとんど常に接触しており、連続体のようにふるまう。このため、粉体の内部では鉛直方向のみならず水平方向のストレスも生じることになる。（図６ (a)）次に、状態２になると容器の下向き加速度が重力加速度よりも早くなり、容器は粉体を取り残してどんどん下がっていってしまう。つまり、鉛直方向に関する限り粉体の落下は自由落下である。従って、鉛直方向のストレスは素早く解放されてしまう。これに対し、水平方向は壁があるために動きがとれず、ストレスが残ってしまう。このため、このストレスを解放しようと粒子は自発的に水平方向に動き始める。容器の横幅が限られているからこの水平方向の動きは容器の中央で衝突し、鉛直方向の動きに変換される。しかし、容器には「底」があるため、上方向に動かざるをえず、表面にこぶができる。（図６（b））こう書くといかにも不自然に思えるがこれは一種のバックリングである。皿洗いなどに用いられるスポンジを小さめの弁当箱などに押し込めて手を放すと、真中が盛り上がる。基本的にはあれと同じ現象である。バックリングと異なるのは、表面が盛り上がったことによって生じた底面付近の空間が周囲から流れ込む粒子によって埋められ、一方、盛り上がった表面は振動で崩れ落ちて壁の方へとながれていく。これが全体として対流を形成するのである。また、状態２がなければ対流も起こりようがないが$\Gamma > g$というのはまさに状態２の出現条件であり、「動的相転移」の「臨界値」が $g = 1$ であることをよくせつめいする。



(a)　　図６　　(b)

この対流運動は、いわば弾性によって引き起こされる全く新しい形の対流運動である。流体ではこのようなことは起こりようがないであろう。離散要素法的なアプローチは粉体のもっとも粉体らしい、粉体固有の挙動をよく再現することが明らかになった。これから判ることは離散要素法的アプローチは粉体の動力学を論じるのに十分な能力を持っているということである。これからは、定量化などより信頼できる方法へと改良していくことが

望まれるであろう。

References

[1] M.Faraday, *Phil. Trans. Soc. Lond.* **52**,(1831) 299.

[2] P.Evesque and J.Rajchenbach,*Phys. Rev.Lett.* **62**, (1989)44.

[3] C.Laroche,S.Douady and S.Fauve, *J.Phys.(France)* **50**,(1990)699.

[4] Y-h. Taguchi, *Phys. Rev. Lett.*. 69, (1992) 1367.

[5] P.Evesque,E.Szmatula and J.-P. Denis, *Europhys. Lett.* **12**(1990)623.