

Kinetic Approach to the Rheology of Granular Fluids

京都大学 基礎物理学研究所 早川 尚男¹

粉体流のレオロジーに対する粉体ガスの運動論による研究の現状と問題点を理論的側面に焦点をあててレビューする。特に問題になるのは非弾性ボルツマン方程式を用いた多くの解析が部分的にせよ成功を取っている根拠である。また近年剪断流におけるロングタイムテールの消失（及び長距離相関の喪失）を含めて自由冷却系と剪断系は本質的に異なった状態であり、普遍的な流体力学は存在しないのではないかという点が指摘されている。このような諸点を中心に本稿をまとめる。

1 はじめに

「ガラス転移とその周辺」に焦点をあてた本研究会で、粉体を題材として取り上げるのであれば、ジャミングとガラス化をターゲットにするのが適切であろう。しかし現状では多体が同時接触をする状況でミクロなモデルから理論構築をすることは難しい。一方で気体論に基づき粉体流のレオロジーを記述する方法に関する研究が近年急激に発達している。この手の研究は実際に興味のある高密度流に適用ができないと思われてきたが、思いの外適用範囲が広く、更にあまり基盤のはっきりしていない粉体物理の中ではある程度信頼のおける理論的な研究が可能であり、その研究を通して粉体流のレオロジー特性が明らかになるからである。

粉体の統計力学、流体力学を構築する上で最も基本的かつ簡単な状態は気体状態である。このことは統計力学の講義で、専らその枠組を気体に適用して、その有効性を示すことから推察できるであろう。気体が単純であるのは基本的に粒子間の多体相互作用の影響が殆ど現れないからである。また斥力系であれば明確な気液転移は存在しないと期待されるので気体論の適用範囲がかなり広いのではないかという期待もある。こうした背景を踏まえて粉体ガスと呼ばれる非弾性衝突をする気体状態とその流体力学の理論的研究は比較的進んでいる。一方で、粉体ガスの研究上での障害は重力の影響が無視できないが故に地上実験が出来ないことである。現在、航空機実験を使って擬似的な粉体ガスを実現しようという試みが続けられているが、外場の影響がなく浮遊した状態の継続時間はきわめて短く、理想的な粉体ガスの実現は出来ていない。従ってガス状態を保つには空気等を使って浮遊させるか、或いは加振して落下するまでの状態を観測するかのいずれかを用いる場合が多い。しかし前者は流体力学相互作用を通した複雑な多体効果が本質であり、後者は放物運動をする粒子系ということでガス系とは大きく特徴が異なる。従って本稿では実験的研究の詳細は割愛する。また粒子シミュレーションだけでは現象の理解に繋がらないので本稿では説明を割愛する。

このような現状で、運動論を用いた粉体ガスの記述はどこまで可能で、問題点はどこにあるのかをまとめるのが本稿の目的になっている。その中で特にせん断流における我々の研究成果である運動論の妥当性の検

¹E-mail: hisao@yukawa.kyoto-u.ac.jp

証と、自由冷却状態でのロングタイムテールの存在をやや詳しく紹介し、そして自由冷却状態とせん断状態の何が一緒に何が異なるかについてまとめる。

2 非弾性 Boltzmann 方程式

粉体ガスの理論的研究は専ら運動論的手法に基づく。その中でポピュラーなアプローチは非弾性 Boltzmann 方程式を用いるものである。通常の Boltzmann 方程式ですら厳密解を得ることはできないので、摂動論に基づく近似的手法に頼らざるを得ない。通常は Chapman-Enskog 法等を非弾性 Boltzmann 方程式に適用し輸送係数を決定し、流体モードの時間発展を近似的に求める。この手法を人工的であるが高温で一様な状態から出発して非弾性衝突によってエネルギーを失う自由冷却現象やせん断によって実現する Couette 流等に適用する。²この手法は粉体の理論的な研究に対してほぼ唯一精緻な理論として発展し、系統的な教科書が書かれるに至った。[1]

もう少し詳しく非弾性 Boltzmann 方程式を説明しよう。粒子衝突に際に相対速度 $\mathbf{v}_r = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ が $\mathbf{v}_r'$ に変化するハードコア的な衝突においてはねかえり係数 e を

$$\mathbf{v}_r' \cdot \mathbf{n} = -e(\mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n}) \quad (1)$$

で導入する。ここで $\mathbf{n}$ は接触した際の共通法線である。本当ははねかえり係数 e は定数ではなく、接線方向の衝突でもエネルギー散逸があるがその影響は無視して $0 \leq e \leq 1$ の定数とする。(1) 式に従う 1 回の衝突あたり運動エネルギーは

$$\Delta E = -\frac{1-e^2}{4}m(\mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n})^2 \quad (2)$$

だけ変化する。

ここで粒径 σ の 2 粒子間の衝突によって粒子速度がそれぞれ $(\mathbf{v}^*, \mathbf{v}_1^*)$ から $(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1)$ に変化すると、非弾性 Boltzmann 方程式は

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla f = \sigma^2 \int d\mathbf{v}_1 \int d\Omega \Theta(\mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n}) \left[\frac{f^* f_1^*}{e^2} - f f_1 \right] \quad (3)$$

で与えられる。但し $f = f(\mathbf{v})$, $f_1 = f(\mathbf{v}_1)$, $f^* = f(\mathbf{v}^*)$ 等であり、 $\Theta(x)$ は $x > 0$ に対して $\Theta(x) = 1$ でそれ以外は $\Theta(x) = 0$ という関数である。

このモデルの正当性への疑問は以下のようなものであろう。(i) 衝突数の仮定が実現するには系はエルゴディックである必要があるが、その保証はない。(ii) 相関の効果が無視されており、不均一性が無視できない粉体ガス系の記述に適さない。(iii) 物理的に重要な殆どの系では高濃度粉体ガスが実現しており、ボルツマン近似は実際上役に立たない。それにもかかわらずいろいろな意味で有用な情報を与えていることは事実であり、実用上では平衡状態での位置相関のみを取り入れた剛体系への非弾性 Enskog 方程式が用いて輸送係数の決定を含めた流体力学の導出が議論されている。[2, 3, 4] またこのようなアプローチは重力の影響下にある流れでは半定量的に正しい結果を与えている。この成功は特に斜面流やせん断流で顕著であ

²Poiseuille 流に対する解析が少ないのは空気の影響なしに定常化することが難しく、境界条件に強く依存し、一般に定常流が不安定であるからである。

り、Bagnold scaling やそれで捉えられない特徴的な粉体のレオロジーを明らかにしている。[5, 6, 7] また速度相関の効果も少なくとも自由冷却状態では現象論的に論じられて非平衡系特有の長距離相関の存在が予言され、シミュレーションと良好な一致を見ている。[8] 相関の問題は非平衡系の運動論では共通の問題であり、それを系統的に取り入れる方法論自体は存在する。それらが技術的な困難とそれに伴って説明できる現象の乏しさの狭間で研究の進展に乏しいとは云え、原理的には一般化されたボルツマン方程式等によって多体相関を系統的に取り入れることは可能であろう。

3 現状の理論的研究の問題点

前節末尾にまとめた楽観論にもかかわらず、理論的研究の現状は混乱している側面が多い。それを詳細に見るために非弾性 Boltzmann 方程式 (3) の解析における技術的側面に焦点をあててみよう。

通常の Boltzmann 方程式であれば、衝突不変量をかけて衝突積分のモーメントはゼロになる。このとき運動量保存はフレームの変換に対する不変性を表しているだけであり、粒子数は言わば規格化に効くだけなので、平衡分布が衝突不変量であるエネルギーの関数となる、というのが初等輸送論の帰結である。しかし粉体ガスではエネルギーが衝突不変量ではなく、衝突項におけるエネルギーのモーメントもゼロではない。また物理的にも外力がないとエネルギーを失って冷却していくので平衡状態は存在しない。従って平衡分布が存在せず、それに対する H 定理も、局所平衡状態もなく、本来そのまわりでの空間変調を考慮した Chapman-Enskog 法等の摂動論の使用には注意が必要である。

抽象論を離れて摂動論のためには基準解の存在が必要である。逆に言えば平衡解がない場合にでも基準解をベースにして摂動論を構成できる。衝突積分のモーメントをゼロにする保存量を用いた平衡解が使えないのであれば、その基準解は衝突積分と他の項のバランスによって決まる筈である。例えば自由冷却であれば、空間変調が摂動効果として入るので、(3) 式であれば $(\mathbf{v} \cdot \nabla)f$ の項を落とした一様冷却方程式を解いて初めて基準解が得られる。[1, 9] 一方、せん断の問題であれば、むしろ時間微分を落とし、 x 軸に平行で y 方向へ速度勾配一定な一様せん断流 $\mathbf{u} = \dot{\gamma} y \mathbf{e}_x$ をベースにした

$$-\dot{\gamma} v_y \frac{\partial}{\partial v_x} f(\mathbf{v}) = \sigma^2 \int d\mathbf{v}_1 \int d\Omega \Theta(\mathbf{v}_r \cdot \mathbf{n}) \left[\frac{f^* f_1^*}{e^2} - f f_1 \right] \quad (4)$$

を解いて初めて基準解が得られる筈である。実際、一様冷却状態に対する基準解の研究は進んでおり、同時に一様せん断流に対する基準解に対する研究も存在しており [10, 11]、両者の解は全く異なったものとなっている。これらはいずれも弾性極限近傍で級数解の形で求まっており、コンパクトな形にまとまっていない。このように考えている問題によって基準解が異なり、統計的性質が異なることは分子気体では見られない特徴となっている。

一方で、現実的に即して流体力学を論じる際には最低でも Enskog 近似で輸送係数を決定した後に流体方程式を解くという作業が必要になる。これらの作業は単調ではあるが煩雑な計算を必要としており、一様冷却状態をベースにした信頼のできる計算がようやく現れた段階にある。ところが著者を含めて多くの研究者はせん断の問題に一様冷却状態を基準にした方程式の解を基準にして摂動論を実行し、それがかなりの精度で流体力学の定量的記述に役に立ってしまうことが逆に問題となっている。[6, 7] 無論、最近の研究では両者の違いがマクロな挙動にも現れるという理論的予言も出ており [12]、予断を許さないが、現状ではその

違いが顕著に現れる現象を明示的にした研究はない。

しかしこのヒントになりそうなのは(非平衡) 相関効果とそれと密接に関わっているカレントの時間相関関数に現れるロングタイムテールの問題である。即ち、自由冷却の問題では見るからに相関効果やロングタイムテールが重要であり、無視できないが、一方でせん断流の問題では相関効果やロングタイムテールの効果が小さいことが経験的に知られている。しかし、そのことを系統的に研究した論文は従来殆どなく、粉体ガスを理解する上で最も重要な課題となっている。この相関効果やロングタイムテールの有無を通してせん断流と自由冷却の違いがはっきりすれば混乱した状況も改善すると思われる。また単純せん断以外の物理的な流動現象に関しても何がどうなっているのかをはっきりさせる研究が今後進展していくものと思われる。このことについては7節で詳しく論じる。

4 粉体ガスの流体力学

粉体を連続体として捉えると基本になるのは質量の保存則、運動量の保存則とエネルギーの連続の式である。このうち質量保存則は全ての粒子が質量 m であるとする粒子数の保存の形で書き換えて

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (nu) = 0 \quad (5)$$

としておく。但し n, u はそれぞれ粉体の数密度、粉体流のマクロな流速である。続いて外力 K の加わった系での運動量の保存は成分表示すると

$$\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P_{ki}}{\partial x_k} + K_i \quad (6)$$

となる。³ 但し $\rho = nm$, P_{ij} は圧力テンソル(ストレステンソル)である。

エネルギーの保存も質量や運動量と同様であるが、テンソルが現れない分、直観に訴えやすい。もっともエネルギーそのものが熱力学変数であるので熱力学と切り離せず、連続体で話が閉じなくなってしまう点に注意が必要である。また粉体の場合に熱力学が使えないと思われる上に衝突における散逸があるのでエネルギー方程式が使えるかどうかという点については多くの議論があった。しかし現在では粉体を流体として捉えたときにエネルギー方程式が重要であることに異論を挟む者はいなくなった。力学的エネルギー密度は運動エネルギー密度 $\frac{1}{2}\rho|u|^2$ と内部エネルギー $\rho\epsilon$ に分割出来る。内部エネルギーは統計力学では分布の分散や温度と直結している。従って総量は

$$\int_V \rho \left(\frac{1}{2}|u|^2 + \epsilon \right) dV = \frac{1}{2}m\langle u^2 \rangle + \frac{d}{2}nT \quad (7)$$

となる。ここで d は空間次元、 $\langle \dots \rangle$ は統計平均を表し、 T はボルツマン定数を1としたときの温度に対応したもので粉体温度と呼ばれる。従って、各粒子の質量を m とすると $dnT/2 = \frac{1}{2}m\langle (v-u)^2 \rangle$ となる。但し v は各粉体粒子の速度である。また(7)式から

$$m\epsilon = \frac{d}{2}nT \quad (8)$$

³以降では特に断らない限りアインシュタインの規約に従い、2回現われた添字(成分 x, y, z) について和を取る、即ち $u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} = \sum_k u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k}$ を意味する。

という関係があることが分かる。これはエネルギー等分配則に対応している。また粉体では粒子の内部エネルギーを考慮しないので、エネルギーは粉体温度で特徴づけられる

これらを考慮してエネルギーの連続の式を書き下すと

$$\frac{DT}{Dt} = -\frac{2}{dn} \left(P_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} \right) - 2\gamma\omega T \quad (9)$$

となる。ここで $\gamma \propto 1 - e^2$ は一回の衝突あたりのエネルギー散逸率を表し、 ω は衝突頻度を表す。右辺の最後の項が粉体らしさを表していると言える。

さてこれらの流体力学はまだ閉じていない。それは圧力テンソル P_{ij} や熱流 $\mathbf{q}$ が流体力学変数や粒子の属性パラメータとどう関係するかが分からないからである。通常の流体力学ではそれらを流体力学変数である速度場や温度の微分展開で表されるとし、その最低次で切断した構成方程式を仮定する。これらの構成方程式は非弾性 Boltzmann-Enskog 方程式を用いてよりミクロな運動レベルから導出が可能である。このことが粉体ガス理論の強みでもあり、同時に弱点となっている。強みというのは言うまでもないが、粒子レベルから運動論によってマクロな流体的挙動を定量的に記述できる点である。後ほど我々の研究例を示すが、その定量的有効性は期待以上である。一方、弱点はこうした考え方では何時まで経っても粉体の特徴である降伏応力の存在や、それに伴う固液混相状態の特徴づけが不可能である点である。とりあえず「貧者の方法」とも言うべき気体論に則ってどこまで言えるかをまとめるのが本稿の目的であるので、その流れで話を進める。

最も良く知られている熱流の現象論はフーリエの法則であり、熱流 $\mathbf{q}$ は温度 T の勾配で表される。粉体ガスの場合はそれに密度の勾配に関係する項も付き、以下の様な構成方程式が使われる：

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n \quad (10)$$

で表される。ここで κ を熱伝導率であり、新しい輸送係数 μ は $e \rightarrow 1$ でゼロになる。

変形が小さいときにストレステンソルが歪み速度テンソル

$$u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (11)$$

を用いて展開できる。流体の一様等方性を仮定すると、一般に

$$P_{ij} = (p - \chi u_{kk}) \delta_{ij} - 2\eta \left(u_{ij} - \frac{1}{3} u_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (12)$$

と書けることが知られている。ここで p は圧力である。また η, χ はそれぞれ粘性率、体積粘性率と呼ばれ、流体力学では定数とすることが多い。

粉体ガスの流体流体力学の枠組は大体こんなところである。再び強調したいには圧力 p と輸送係数 η, κ, μ, χ 等はミクロな粒子パラメータ e, m と局所的な流体変数 n, T を用いてミクロに決定できる点である。その決定法には様々なバリエーションがあるがそこには踏み込まない。はじめに、で触れたようにむしろ基準解の選び方が問題になる。またせん断流では一様等方性が破れている可能性が高い。

5 Bagnold scaling

さてこのような粉体の流れがどのような法則に従うのだろうか。通常の流体は (12) から想像される通り、接線応力がずり速度に比例する。一方半世紀程前に R. A. Bagnold は粉体流の実験から、接線応力がずり速度の 2 乗に比例することを発見した⁴。このような流体をバグノルド流体と呼ぼう。この応力がどのように決まるかが粉体がどのような流体であるかということの特徴付ける上で重要になる。

もともと実験からバグノルド則が提唱されたのにもかかわらず、その後粉体流がバグノルド流体と呼べるかどうかについては長い議論と混乱があった。既に紹介したように、実験室での粉体流はしばしば流動域と固体領域が共存しており、流体の構成方程式を決めるよりも複雑な要因が絡まって観測される。従って流体の構成方程式を決めるには、粉体流が流れている場合には全領域が流れるような状況が欲しかった。その要求に応えたのが 1999 年の O. Pouliquen の実験である。ポルキン⁵は粉体を流す際にホッパー等を用いるのではなく、ゲートを用いて一端せき止めて、それからゲートを開ける実験を行った。彼の実験によれば、長い時間待つと、粉体が行ける場合は流れ続け、粉体が止まってしまう場合は全て止まってしまうようになった。したがって流体の構成方程式を決めるには流れている場合のみを論じればよいことが分かる。

ポルキンの実験では、流れの生じる（臨界の）層厚 $h_{stop}(\theta)$ が傾斜角 θ とどのような関係式で結ばれるかについても興味深い実験データを示している。しかしここではそれに触れないで、流体の構成法則に関係した部分のみに着目しよう。Pouliquen は流体の表面での斜面に平行な流れの流速 u が層厚 h の関数として

$$\frac{u}{\sqrt{gh}} = \beta \frac{h}{h_{stop}(\theta)} \quad (13)$$

と表されることを示した。ここで g は重力加速度、 β は粒子の種類や大きさにあまり依存しない普遍定数である。

(13) 式はバグノルド則と等価である。そのことを説明してみよう。 z を斜面からの高さとし、 h が層厚であるとする。簡単のために斜面に沿っての座標を x とし、2次元系として考えてみよう。今、定常的な流れを考えているので力のバランスが成り立った状態にある。この座標系で定常方程式を考えてみる。定常流では、流速は進行方向 x の成分のみを持ち、全ての流体変数は x に依存しないと考えられる。したがって (9) 式は

$$\partial_z P_{zx} = \rho g \sin \theta, \quad \partial_z P_{zz} = \rho g \cos \theta \quad (14)$$

という 2 つの式になる。このうち対角項は圧力が深さの線形関数になるという条件を表す。今、大事なのは非対角項である。 $z < h$ で密度 ρ が一定であり、表面 $z = h$ でストレスがかからないとすると

$$P_{zx} = \rho g \sin \theta (z - h) \quad (15)$$

となる。バグノルド則は

$$P_{zx} = -\alpha \left(\frac{du}{dz} \right)^2 = -\alpha \dot{\gamma}^2 \quad (16)$$

であるので 2 つの式を組み合わせると

$$\alpha \left(\frac{du}{dz} \right)^2 = \rho g \sin \theta (h - z) \quad (17)$$

⁴R. A. Bagnold, Proc. Roy. Soc. London A **225**, 49 (1954).

となる。但しずり速度はこの場合 $\dot{\gamma} = du/dz$ である。この式を $z=0$ で $u(z=0)=0$ とすると⁵

$$u(z) = \frac{2}{3} \sqrt{\frac{\rho g \sin \theta}{\alpha}} \left\{ h^{2/3} - (h-z)^{2/3} \right\} \quad (18)$$

となる。ここで $z=h$ とおき、

$$h_{stop}(\theta) = \frac{3}{2} \beta \sqrt{\frac{\alpha}{\rho \sin \theta}} \quad (19)$$

とおくと (13) 式と一致する。このようにポルキンの実験で観測された (13) 式はバグノルド則と等価になっている。

一方、(12) で粘性率 η を定数、 $\chi=0$ としたニュートン流体では

$$P_{zx} = -\eta \frac{du}{dz} = -\eta \dot{\gamma} \quad (20)$$

が成り立つ。この式と (15) 式を比較すると

$$\frac{du}{dz} = \frac{\rho g}{\eta} (h-z) \Leftrightarrow u(z) = \frac{\rho g}{h} \{ h^2 - (h-z)^2 \} \quad (21)$$

となる。但し $z=0$ で $u=0$ とした。この式は Pouliquen の実験結果 (13) とは随分異なる。

バグノルド則は簡単な次元解析から理解できる。ずり速度 $\dot{\gamma}$ は 1/時間の次元を持ち、これが唯一の時間を決めるスケールだとする。この仮定は剛体極限ではこれが正当化できている。⁶このとき運動量変化 Δp は粒子質量 m に粒径 σ とずり速度 $\dot{\gamma}$ をかけたもので見積もれる。また時間スケールがずり速度の逆数なので、運動量の時間変化 $\Delta p/\Delta t \simeq m\sigma|\dot{\gamma}|\dot{\gamma}$ となる。ここで運動量変化は $\dot{\gamma}$ の向きに依存して符号が変わることを用いた。応力は圧力の次元を持つので、断面積で割る必要があるので結局接線応力 P_{zx} は

$$P_{zx} \simeq -m\sigma^{d-2}\dot{\gamma}|\dot{\gamma}| \quad (22)$$

となる。その結果がバグノルド則になることは容易に分かる。

さてバグノルド則は (9) 式からも理解できる。定常状態で流体変数が z のみに依存し、更に流速が x 成分しか持たないことを考慮すると粘性発熱項 $P_{ij}\nabla_i u_j = P_{zx} \frac{du}{dz}$ となる。また熱伝導項は $\mathbf{q} = -\kappa \nabla T$ となる。 $\gamma \simeq \gamma_0 = (1-e^2)/4$ とすると定常エネルギー方程式は

$$-P_{zx} \frac{du}{dz} - \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \frac{d}{4} (1-e^2) n \omega T = 0 \quad (23)$$

となる。ここで熱伝導項が無視できるとしよう。また運動論を用いて (20) 式のニュートン流体的な構成方程式を仮定しよう。但し粘性率 η は運動論で決まるものと同じ関数依存性

$$\eta = \frac{\sqrt{mT}}{\sigma^{d-1}} \varphi(\nu) \quad (24)$$

を持つとする。ここで φ は体積占有率 ν の適当な関数であるとする。また $\psi(\nu)$ を ν の適当な関数として $\omega = \sqrt{T/m} \psi(\nu)$ と表すと (39) 式は

$$\dot{\gamma} = \left(\frac{du}{dz} \right)^2 = (1-e^2) \frac{n\sigma^{d-1}}{m} A(\nu) T \quad (25)$$

⁵一般にこの境界条件は正しくない。しかし定数分ずらせばよいので議論に大きな変化はない。

⁶実際にはこの仮定は強すぎる。衝突頻度がもう一つの重要な時間スケールになっている。しかし一様せん断流では、後述のように両者は比例関係にあり、ほぼ同程度の値になっている。また重力加速度 g がもう一つの時間スケール $\sqrt{\sigma/g}$ を作る。これについても密度が一樣であれば (17) 式から重力加速度とずり速度の関係がつく。

となる。但し $A(\nu) = (d/4)\psi(\nu)/\varphi(\nu)$ である。この結果を (24) 式に代入すると

$$\eta = B(\nu) \frac{m}{\sqrt{(1-e^2)n\sigma^{d-1}}} \left| \frac{du}{dz} \right| \quad (26)$$

となる。但し $B(\nu) = \varphi(\nu)/\sqrt{A(\nu)}$ である。この式を (20) 式に代入すると

$$P_{zx} = -\frac{m}{\sqrt{(1-e^2)n\sigma^{d-1}}} B(\nu) \left| \frac{du}{dz} \right| \frac{du}{dz} \quad (27)$$

となっている。このように実は運動論でも導かれる線形の関係式 (20) はバグノルド則と矛盾しないことが示された。この結果は一見不思議な感じも与えるが、通常の分子気体では独立変数である温度が速度勾配と密度で (25) 式のように表現できたことに由来する。勿論、この等式は $e = 1$ では正しくない。そのときは熱伝導項が粘性発熱とバランスしなければならない。また (25) 式は衝突頻度 ω が速度勾配に体積占有率の関数をかけたものに等しくなることを意味している。したがって衝突頻度から決まる時間スケールが必ず速度から決まる時間スケールに従属するとも言える。⁷

6 定常せん断流の解析

前節での Bagnold scaling の解析はかなり粗雑なものであることに気がついたであろうか。例えば必ず速度が唯一の時間スケールというのは明らかに誤りであり、Bagnold scaling の成立には一様せん断流が成り立つことが必要である。そのときは他の諸々のタイムスケールは必ず速度でスケールでき、Bagnold scaling は成立する。逆に言えば一様せん断流が不安定であれば Bagnold scaling は成り立たない。また構成方程式を速度勾配の一次で切断したことの是非はともかく、その議論から明らかに Bagnold scaling は定常せん断流のときのみに有効な概念である。このことは、通常の流体の粘性率と構成方程式が考えている状況に依存しない普遍的なものであることは著しい対比をなす。経験的に重力の影響下にある斜面流では確かに近似的に Bagnold scaling が成り立っているが、重力の影響がないより簡単な場合にはどうなっているだろうか。

我々は重力の無い系でのせん断流の性質を詳細に調べるために粒子シミュレーションと運動論で決まる流体力学のシミュレーションの比較、それから流体力学方程式の定常解と粒子シミュレーションの結果の直接比較を試みた。粒子シミュレーションは離散要素法 (Discrete element method) 或いは個別要素法 (Distinct element method) と呼ばれる手法を採用した。どちらの手法の英語呼称も略して DEM となるので今後 DEM と呼ぶことにしよう。モデルやパラメータの詳細は原論文に譲るとして反発係数が 0.85 に設定したということと粒子数が 5000 の 2 次元シミュレーションを行ったことを明記しておこう。壁に粒子を埋め込んだ境界を用意し、その壁を一定速度で動かすことでせん断をかけた。初期条件はガウス分布を充たす平衡状態としてせん断をかけた状態で定常化するまで数値計算を行った。

一方、位置、速度、温度を

$$t = \frac{2\sigma}{U} t^*, \quad x = \sigma x^*, \quad v = \frac{U}{2} u, \quad T = \frac{U^2}{8} \theta \quad (28)$$

に従い無次元化する。無次元化した圧力テンソル、熱流、衝突に伴うエネルギーロスはそれぞれ

$$P_{ij} = \frac{\rho_p U^2}{4} P_{ij}^*, \quad q = \frac{\rho_p U^3}{8} q^*, \quad \chi = \frac{\rho_p U^3}{8\sigma} \chi^*. \quad (29)$$

⁷このことは (??) 式で $n\sigma^{d-1} \sim 1/\sigma$ とすれば $\dot{\gamma} \sim \omega$ となることから確かめられる。

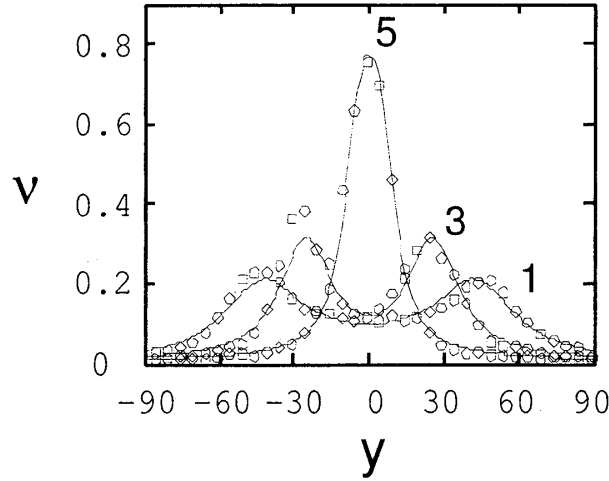


図 1: 平均面積占有率 $\bar{v} = 0.121$ の場合の DEM (open circles) と流体シミュレーションの比較。但し $t = 20$ (the label 1), 60 (the label 3) and 380 (the label 5).[7]

となる。ここで無次元化した量 (*を付けた量) はそれぞれ

$$P_{ij}^* = [p(\nu)\theta - \xi(\nu)\theta^{1/2}(\nabla^* \cdot \mathbf{u})]\delta_{ij} - \eta(\nu)\theta^{1/2}\hat{D}_{ij}^*, \quad (30)$$

$$\mathbf{q}^* = -\kappa(\nu)\theta^{1/2}\nabla^*\theta - \lambda(\nu)\theta^{3/2}\nabla^*\nu, \quad (31)$$

$$\chi^* = \frac{1-e^2}{4\sqrt{2\pi}}\nu^2g(\nu)\theta^{1/2}[4\theta - 3\sqrt{\frac{\pi}{2}}\theta^{1/2}(\nabla^* \cdot \mathbf{u})]. \quad (32)$$

である。また $p(\nu)$, $\xi(\nu)$, $\eta(\nu)$, $\kappa(\nu)$ and $\lambda(\nu)$ の陽な表現は Jenkins and Richman[2] によるものを採用しており、それらは表 1 にまとめられている。また動径分布 $g(\nu)$ は

$$g(\nu) = g_c(\nu) + \frac{g_f(\nu) - g_c(\nu)}{1 + \exp[-(\nu - \nu_0)/m_0]}, \quad (33)$$

を採用した。[13] 但し $g_c(\nu) = (1 - 7\nu/16)/(1 - \nu)^2$ 及び $g_f(\nu) = [(1 + e)\nu(\sqrt{\nu_c/\nu} - 1)]^{-1}$ であり $\nu_c = 0.82$, $\nu_0 = 0.7006$, $m_0 = 0.0111$ である。

結局、無次元化した流体方程式は

$$D_t\nu = -\nu\nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (34)$$

$$\nu D_t\mathbf{u} = -\nabla \cdot \mathbf{P}, \quad (35)$$

$$\frac{1}{2}\nu D_t\theta = -P_{ij}\nabla_i u_j - \nabla \cdot \mathbf{q} - \chi. \quad (36)$$

となる。ここで無次元化記号 * を消去した。

この流体モデルの直接シミュレーションの時間発展と DEM の結果の比較した (図 1: 但しスペースの関係上面積占有率の時間発展のみ示す)。もつともこの流体シミュレーションの初期条件はある程度流体変数が明確に定義できる状態になって DEM の結果を多項式で近似したもので与えた。文献 [7] に示す通り粒子密度、流速の x 成分、温度は非常に良好な一致を示している。また流速の y 成分は定性的には非常によく再現しているが、流体シミュレーションの振幅値が DEM のそれより大きくなっている。

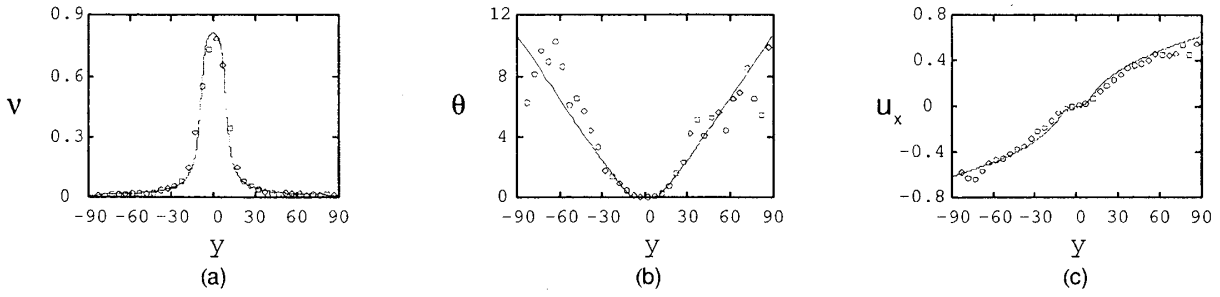


図 2: 定常解の理論 (solid lines) と DEM(open circles) の比較。(a) 面積占有率, (b) 粉体温度, 及び (c) u_x . ここで反発係数 $e = 0.798$ と平均面積占有率 $\bar{\nu} = 0.121$. [7]

また定常状態において

$$0 = \frac{d}{dy} P_{xy}, \quad (37)$$

$$0 = \frac{d}{dy} P_{yy}, \quad (38)$$

$$0 = P_{yx} \frac{d}{dy} u_x + \frac{d}{dy} q_y + \chi. \quad (39)$$

が要求されるので、垂直応力とせん断応力は定数

$$p \equiv P_{yy} = \text{const.} \quad \tau \equiv P_{yx} = \text{const.} \quad (40)$$

となる。従って圧力テンソルの定義を用いて

$$\tau = -\frac{\eta(\nu)}{2} \theta^{1/2} \frac{du_x}{dy}, \quad (41)$$

$$p = \frac{1}{2} \nu [1 + (1+e)\nu g(\nu)] \theta. \quad (42)$$

となる。このようにして θ と du_x/dy の表式が p, τ と ν の関数として表される。これらを (39) の最後の式に代入すると

$$\frac{d}{dy} \left[F(\nu) \frac{d\nu}{dy} \right] = G(\nu), \quad (43)$$

を得る。但し

$$F(\nu) = \frac{1}{\alpha(\nu)^{3/2}} \left[\left(\frac{1}{2} + r \frac{d}{d\nu} (\nu^2 g) \right) \frac{\kappa(\nu)}{\alpha(\nu)} - \lambda(\nu) \right], \quad (44)$$

$$G(\nu) = \epsilon \frac{2\alpha(\nu)^{1/2}}{\eta(\nu)} - (1-e) \frac{\xi(\nu)}{\alpha(\nu)^{3/2}} \quad (45)$$

であり、 $\epsilon = (\tau/p)^2$ 及び $\alpha(\nu) = 2/(\nu[1 + (1+e)\nu g(\nu)])$ である。

言うまでもないが2階常微分方程式は容易に解けるのでこれと DEM の結果を比較することになる。その結果は文献 [7] に示すように DEM の結果をほぼ完全に再現できている。2 但し境界条件の選び方に多少任意性がありそこに2つのフィッティングパラメータがあることと対応して p, τ をフィッティングパラメータとしている。

ここで流体力学変数の空間的变化を運動論ベースの流体力学で曲がりなりにも完全に決めたということの特筆すべきことであろう。任意性が殆どなくほぼレオロジーを完全に決めたことになる。このことは粉体

表 1: The dimensionless transport coefficient by Jenkins and Richman

$$p(\nu) = \frac{1}{2}\nu[1 + (1+e)\nu g(\nu)]$$

$$\xi(\nu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(1+e)\nu^2 g(\nu)$$

$$\eta(\nu) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}\left[\frac{1}{7-3e}g(\nu)^{-1} + \frac{(1+e)(3e+1)}{4(7-3e)}\nu + \left(\frac{(1+e)(3e-1)}{8(7-3e)} + \frac{1}{\pi}\right)(1+e)\nu^2 g(\nu)\right]$$

$$\kappa(\nu) = \sqrt{2\pi}\left[\frac{1}{(1+e)(19-15e)}g(\nu)^{-1} + \frac{3(2e^2+e+1)}{8(19-15e)}\nu + \left(\frac{9(1+e)(2e-1)}{32(19-15e)} + \frac{1}{2\pi}\right)(1+e)\nu^2 g(\nu)\right]$$

$$\lambda(\nu) = -\sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{3e(1-e)}{16(19-15e)}[4g(\nu)^{-1} + 3(1+e)\nu]\frac{1}{\nu}\frac{d(\nu^2 g(\nu))}{d\nu}$$

研究の大きな進展の一步であると思われる。また壁から離れた中央領域に高密度クラスターが現れるが、その非常に高濃度にまで運動論ベースの流体力学が有効である点も特筆すべきであろう。もう一つのメッセージは一樣せん断流が不安定であり、この系では近似的な意味でも Bagnold scaling が成り立っていない点である。実際、(40) 式からせん断応力は空間的に一定でなければならないが、図から明らかなようにそれは一定ではない。つまり熱伝導項が無視できないのである。これはある意味自明な結果である。重力のように体積力で粒子に直接エネルギーを渡す機構がなければ基本的にエネルギー供給は境界からの熱伝導に拠っているからである。そのような状況では速度勾配と接線応力の積である粘性発熱はできるだけ生じないように系が緩和していくとも言える。

この系の一樣せん断流の不安定性は明らかに境界駆動型であるが人工的に周期境界 (Lees-Edwards 境界) 条件下でも、無限系では一樣せん断流は常に不安定であることが知られている。安定になるのは有限のシステムサイズにおいての稀薄極限と密度変化ができない程高密度な系のみである。その意味でも重力がない系で一樣せん断流は常に不安定である。

7 ロングタイムテールについて

前節で非弾性 Boltzmann-Enskog 理論で決まる流体力学から粒子シミュレーションの結果を良く再現することを見た。しかし既に 3 節で触れた通り、本来このような取り扱いで流体力学が粒子シミュレーションと一致する理由は無い筈である。実際、せん断流では自由冷却の際に現れる長距離相関がないと思われる。またその長距離相関と密接に関連した統計量としてカレントの時間相関に現れるロングタイムテールの問題がある。

散逸のない粒子系では流体力学モードと関連して速度自己相関関数の緩和が時間のべきで減衰する遅い緩和があることが知られている。このような遅い緩和はロングタイムテールと呼ばれ非平衡系の大きな特徴

になっている。またロングタイムテールは時間 t , 次元 d に対して $t^{-d/2}$ に比例すると考えられており、その時間積分は 2 次元で対数発散する。カレントの時間相関が粘性率や熱伝導率といった輸送係数と関係しているために、この問題は深刻であり 2 次元系や 1 次元系での輸送係数がシステムサイズに依存して変化し、熱力学極限で発散するという事実が知られるようになってきている。

もしロングタイムテールが存在すると、非弾性 Boltzmann-Enskog 理論で決めた輸送係数はあまり意味を持たないということになる。特に粉体ガスでは（擬）2 次元系を数値的或いは実験的に扱う機会が多いだけにその影響は深刻である。前節で示した非弾性 Boltzmann-Enskog 理論とシミュレーションの良好な一致は単なる偶然であろうか。このようにロングタイムテールは非常に重要な概念でありながら、従来あまり粉体ガス系では議論されてこなかった。おそらくは粉体系では一様状態は不安定で局所的に粗密を持った構造を作り、相関関数が容易に負になるためであると思われる。しかし、ごく最近になってロングタイムテールが理論的、数値的に調べられるようになった。実際、Ahmad and Puri[14] が速度自己相関関数を自由冷却系に対するシミュレーションで調べ、衝突間隔でスケールした時間を用いて通常型のロングタイムテールがありそうであることを報告した。また著者は Ernst 等 [15] の手法に基づき、全てのカレントの時間相関が衝突間隔でスケールした時間を用いて通常型のロングタイムテールがあることを示した。一方、Kumaran[16] がせん断流においてロングタイムテールが消滅する（より正確には次元 d に対して $t^{-3d/2}$ 型のテールになる）ことを理論的に予言した。Kumaran の議論が正しければ、2 次元せん断流において輸送係数の発散は起こらず、非弾性 Boltzman-Enskog 理論によって半定量的に正しい流体现象の記述が可能になってもおかしくない。Kumaran の理論は基本的に Ernst 等 [15] の手法に則ってより精緻化することが可能である。Kumaran はエネルギーの寄与を無視したが、エネルギーを流体モードとして取り入れても基本的に変わらない結果を得ることは著者によって確認されている。また粒子シミュレーションからは確かに通常のロングタイムテールがより長時間で早く緩和することが観測されている。しかし現時点ではべきの特定には至っていない。

おそらくせん断流でロングタイムテールが存在しないことが、同時刻の速度相関関数における長距離相関の抑圧と関係していると思われる。これら粉体ガスに基づく粉体系の流体力学の理解は近年急速に進んでおり、統一的な描像を持つ日は遠くないと思われる。

8 まとめと今後の展望

本稿ではごく簡単に粉体ガスの理論的研究の現状についてまとめてみた。技術的困難さを除くとやるべきこととその影響ははっきりしており理論物理の典型的問題となっていることが分かる。おそらく近い将来にこれらの問題は解決され粉体流の理解が飛躍的に進むものと思われる。

尚、粒子の同時接触が問題になるより高濃度の流れに関してはもはやガス系とは呼べず、本稿の対象としていないことをお断りする。しかし、同時接触による流れの質的变化は粉体のみならずレオロジー分野全体に関わる本質的に重要な問題である。実際、最近の数値計算や理論計算では同時接触によって降伏応力の発生が生じることが指摘されている。[17] 同時接触を含めた非常に高濃度な流れにおける降伏応力の発生とレオロジーの質的变化は今後に発展が見込まれる重要な課題であり、ガラス転移とも密接に関わっている。

参考文献

- [1] N. V. Brilliantov and T. Pöschel, *Kinetic Theory of Granular Gases* (Oxford Univ. Press, Oxford, 2004).
- [2] J. T. Jenkins and M. W. Richman, *Phys. Fluids* **28**, 3485, (1985).
- [3] V. Garzo and J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **59**, 5895, (1998).
- [4] J. F. Lutsko, *Phys. Rev. E* **72**, 021306 (2005).
- [5] O. Pouliquen, *Phys. Fluids*, **11**, 542, (1999).
- [6] N. Mitarai and H. Nakanishi, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 128001, (2005).
- [7] K. Saitoh and H. Hayakawa, *Phys. Rev. E* (to be published).
- [8] T. P. J. van Noije, M. H. Ernst, R. Brito and J. A. G. Orza, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 411 (1997), T. P. C. van Noije, M. H. Ernst and R. Brito, *Physica A* **251**, 266 (1998), T. P. C. van Noije and M. H. Ernst, *Phys. Rev. E* **61**, 1765 (2000).
- [9] T. P. C. van Noije and M. H. Ernst, *Granular Matter*, **1**, 57 (1998).
- [10] N. Sela, I. Goldhirsch, and S. H. Noskowitz, *Phys. Fluids* **8**, 2337 (1998).
- [11] J. F. Lutsko, *Phys. Rev. E* **70**, 06110 (2004).
- [12] A. Santos, V. Garzó and J. W. Dufty, *Phys. Rev. E* **69**, 061303 (2004).
- [13] D. Volfson, L. S. Tsimring and I. S. Aranson, *Phys. Rev. E* **68**, 021301 (2003).
- [14] S. R. Ahmad and S. Puri, *Phys. Rev. E* **75**, 031302 (2007).
- [15] M. H. Ernst, E. H. Haug and J. M. J. van Leeuwen, *Phys. Rev. A* **4**, 2055 (1971).
- [16] V. Kumaran, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 25802 (2006).
- [17] T. Hatano, M. Otsuki and S. Sasa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **76**, 02301 (2007). See also T. Hatano, preprint.