

大阪大集中講義

Subject : 散逸粒子系の統計力学

Subtitle: 散逸粒子を例にした非平衡統計物理学入門

Speaker : 早川尚男 (Dept. Phys., Kyoto Univ.)

Date : 2004年6月16日-6月18日

Location : 大阪大学

粉体の新しい本（早川尚男）



- 粉体とは何だろうか
- 非弾性衝突
- 気体論的アプローチ
- 遅い流れ
- 静力学
- 散逸粒子系の物理の私的展望

目次(1)

- I. 粉体物理とは
 - I-A. 粉体の様々な現象
 - I-B. 数値計算法
- II. 非平衡の現状: 粉体の果たす役割
 - II-A. 非平衡の本質: 不可逆性について
 - II-B. Langevin方程式とFokker-Planck方程式

目次(2)

- III. Boltzmann方程式とその応用
 - III-A. Boltzmann方程式と流体方程式
 - III-B. Burnett orderのBoltzmann方程式の解
 - III-C. 非弾性気体の統計力学
 - III-D. 実験で観測できる非弾性気体と非平衡統計
- 非弾性衝突について(巨視的散逸性についての考察)
 - IV-A. 準静的理論
 - IV-B. 弾性円盤の衝突シミュレーション
 - IV-C. はねかえり係数が1を越える現象
- まとめ

I. Introduction - What is granular physics?-

- Granular Materials: Inelastic Repulsive Interactions, Excluding Volume Effects
- Rich Examples in Daily Life: Important in Industries
- Interdisciplinary : Soil Mech., Civil Eng., Chem. Eng., Earth Sci., etc.
- Strong Fluctuation : Not easy to control
- A Good Subject for Theoretical Physics
- Important for Education of Physics

I-A. Physics of inelastic collisions of macroscopic materials

You do not know the details of inelastic collisions of macroscopic materials. For example, the coefficient of restitution becomes easily larger than 1.

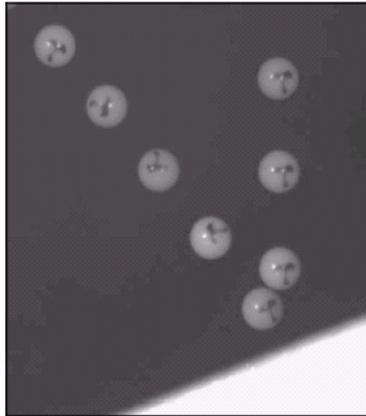


FIG. 2. Typical image with $\gamma = 160^\circ$, $\Psi_1 = 0.364$, $\Psi_2 = 0.033$, $|\mathbf{u} \cdot \mathbf{n}| = 1.4$ m/s, $|\mathbf{u} \cdot \mathbf{t}| = 0.5$ m/s, and $\omega' = 250$ rad/s at a stroboscope frequency of 200 Hz.

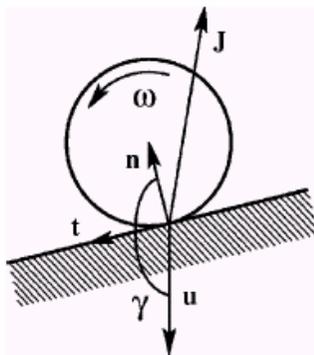


FIG. 1. Impact geometry.

*M.Y.Louge and M.E.Adams,
Phys. Rev. E, 65, 021303 (2002).*

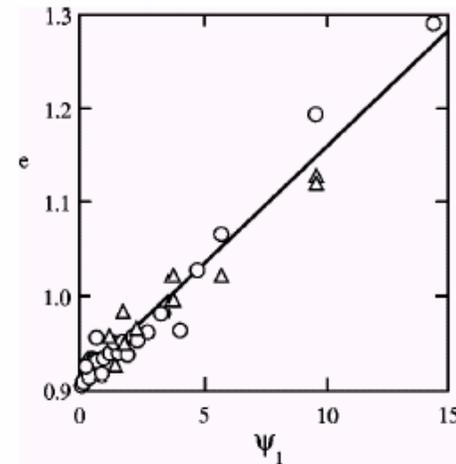
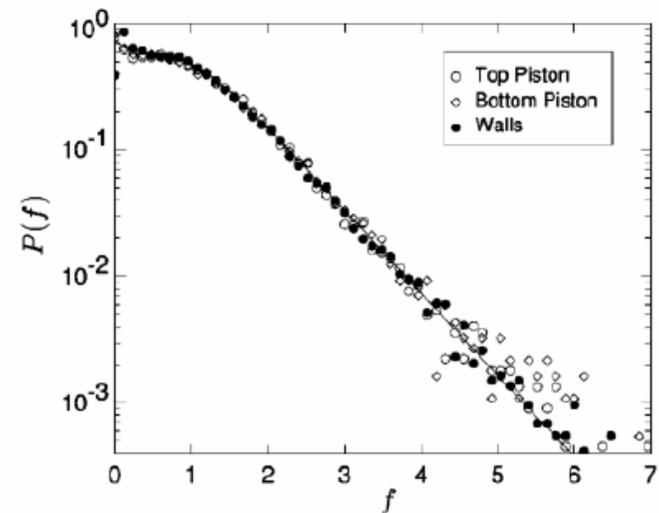


FIG. 5. Kinematic coefficient of normal restitution versus $\Psi_1 = |\tan \gamma|$. The triangles and circles are data with $|\mathbf{u}| = 1.5$ m/s ($h = 12$ cm) and $|\mathbf{u}| = 2.2$ m/s ($h = 25$ cm), respectively.

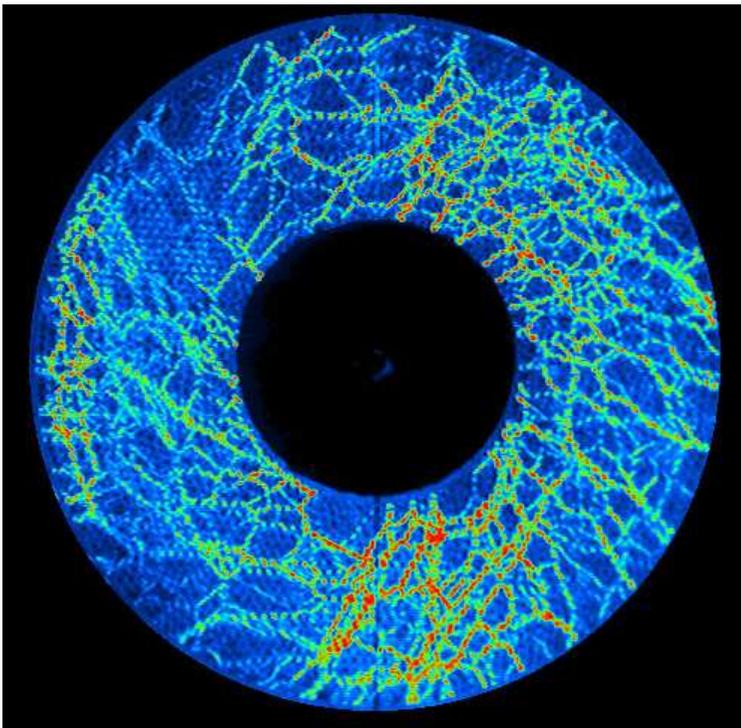
Shape of sand piles

- Static shape is from the frictional force. (Cf: No shape of fluid).
- Force distribution is not uniform. The shape and the force distribution depend on history of making sand piles.
- Pressure distribution obeys an exponential function.



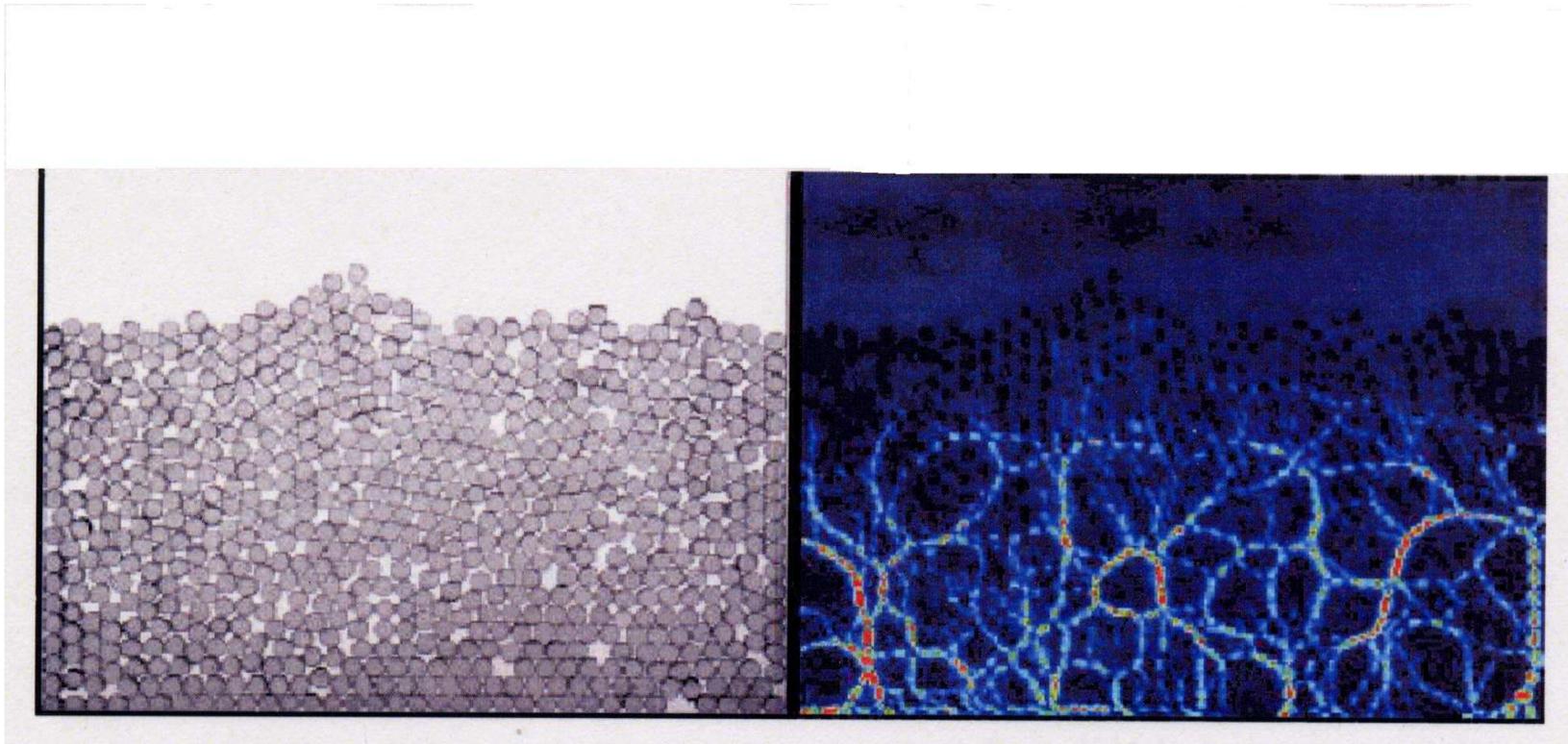
Force propagates along force chains

- Strong fluctuations
- Concentration of stresses in small number of particles
- collapse of a silo by stress concentration!

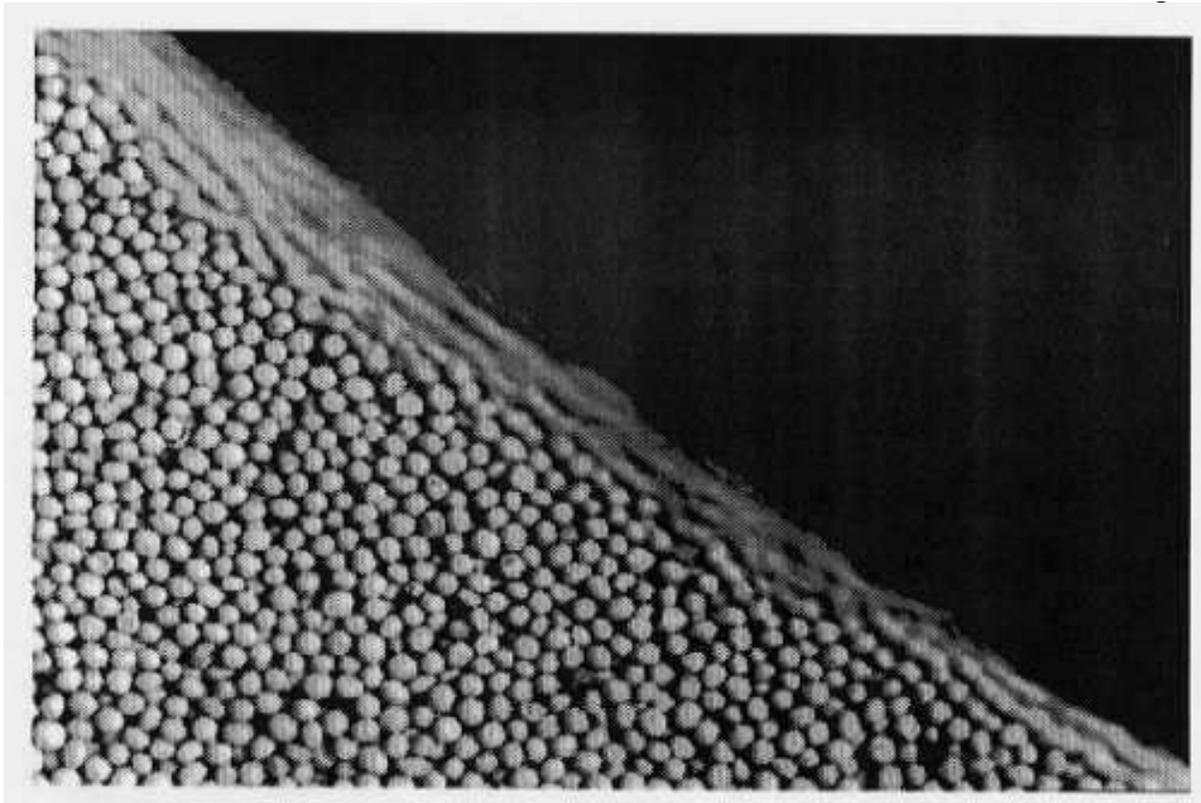


Force chains (2)

- Force chains can be observed in an array of photo-elastic disks (below).



Frictional flow in seeds of mustard (photo by Chicago group)

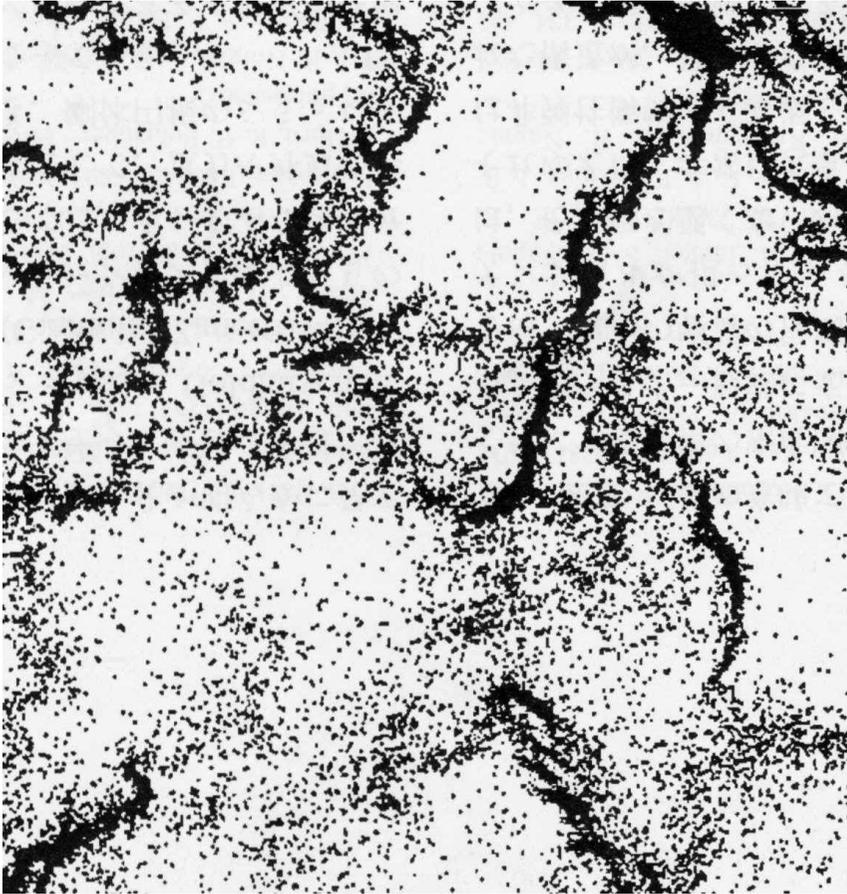


coexistence of solid-like region and fluid-like region

Seeds in solid-like region has very slow creep motion.

Fluid-like region obeys Bagnold's law (shear stress is proportional to the square of velocity gradient).

Granular Gases (What can we obtain if molecules in gases are dissipative?)

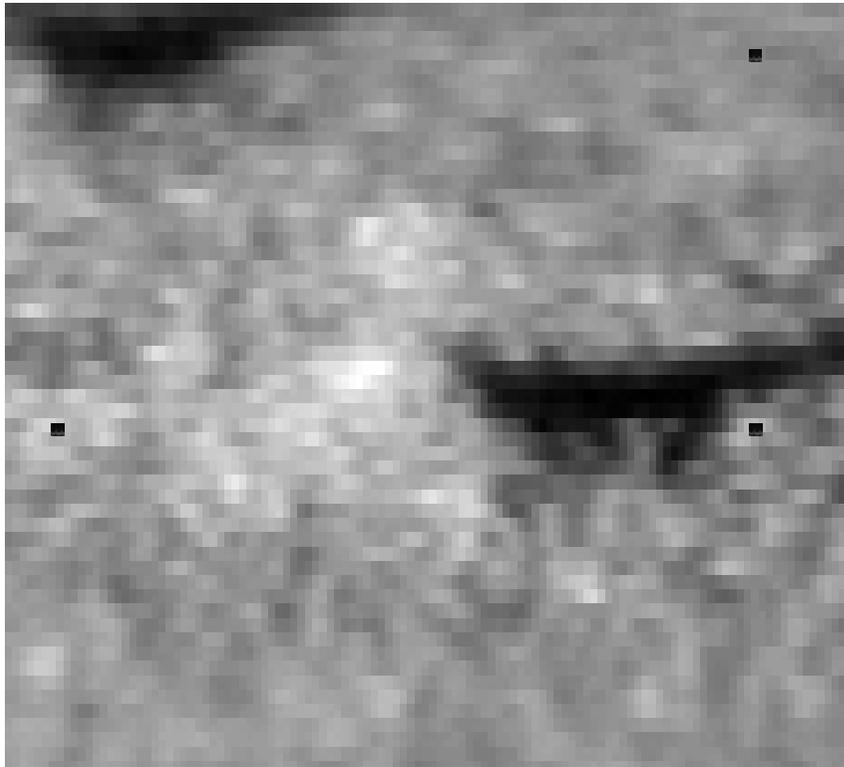


- (1) The system is a model of interstellar dusts.
- (2) Theoretical analysis is possible,

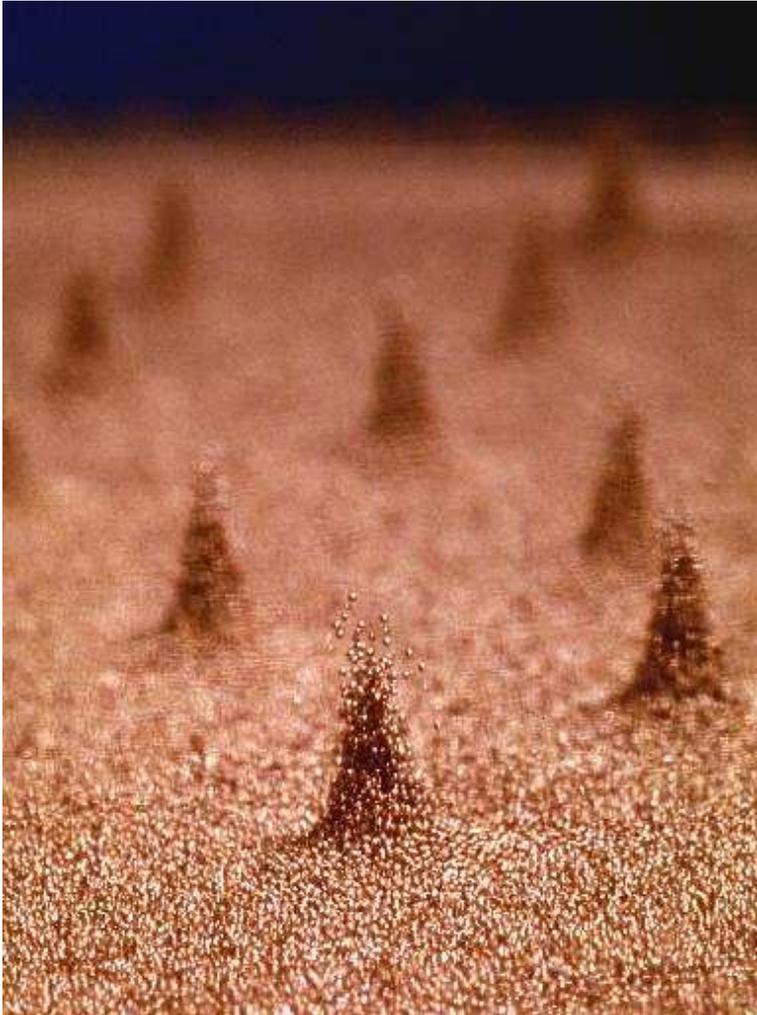
Goldhrisch and
Zannetti (1993 PRL)

粉体振動層のパターン形成

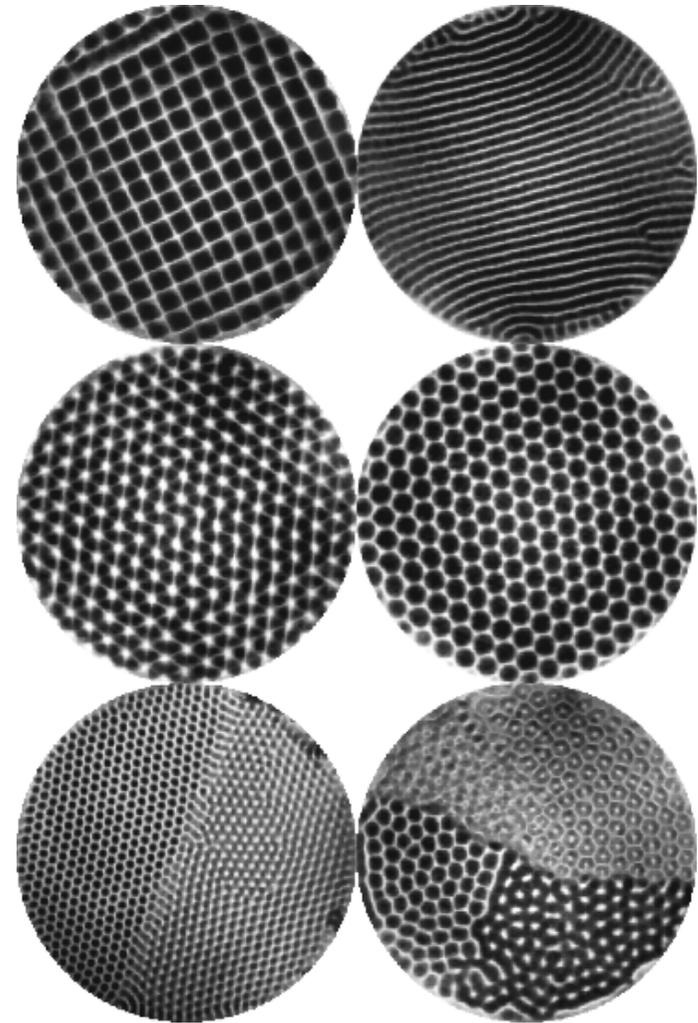
An oscillon observed in the experiment in Texas group



Typical Patterns

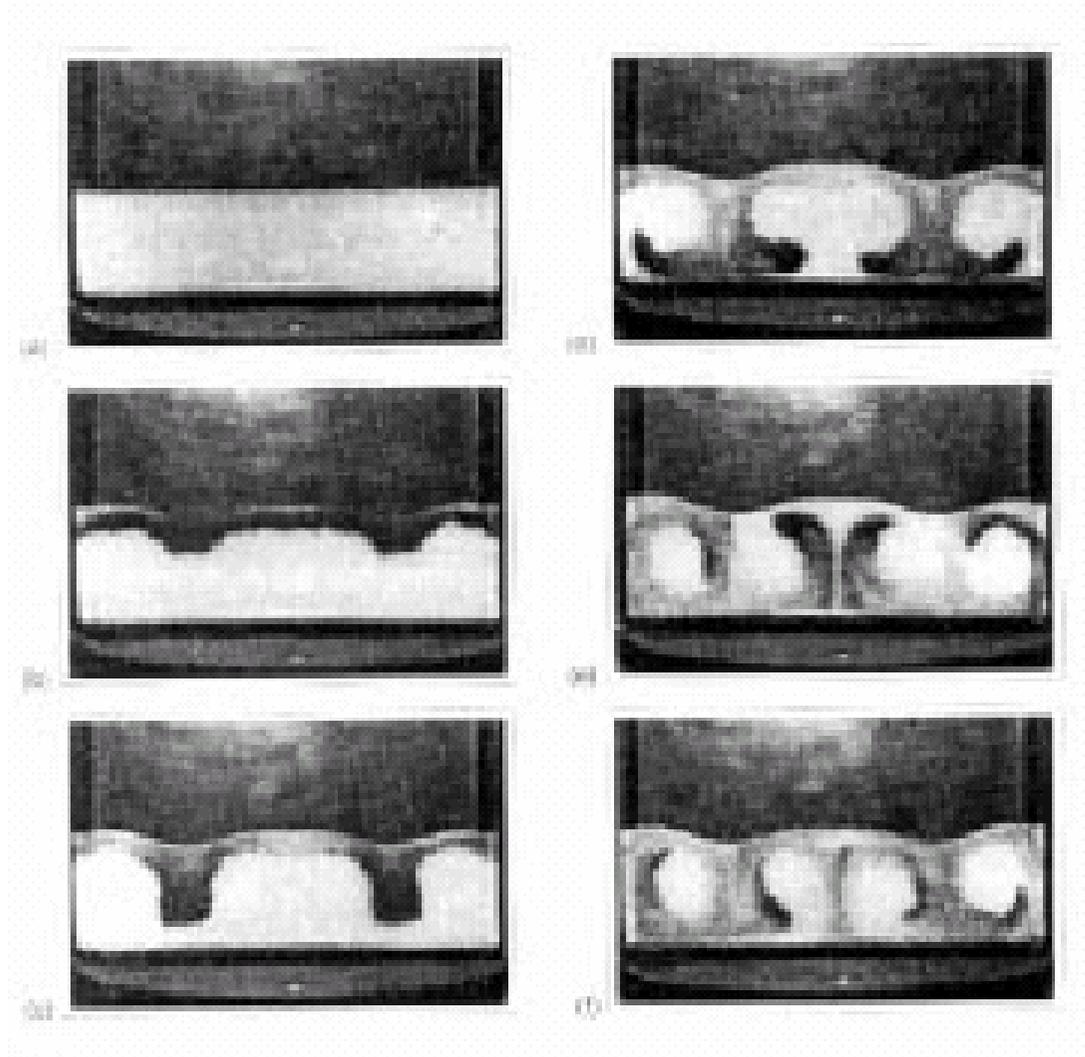


Multiple oscillons



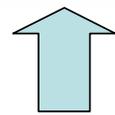
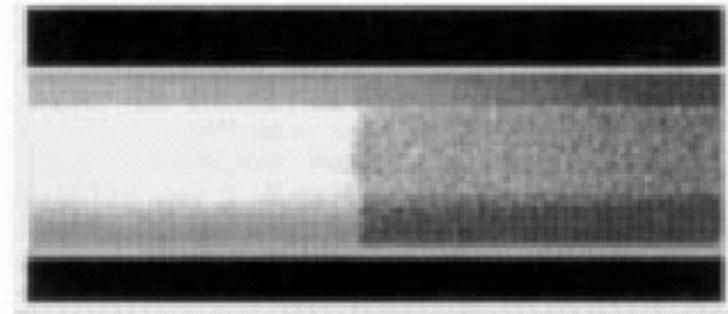
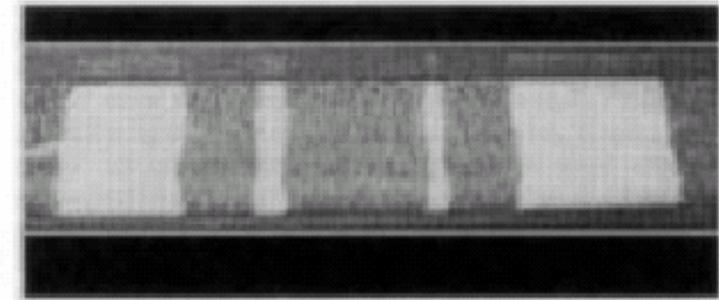
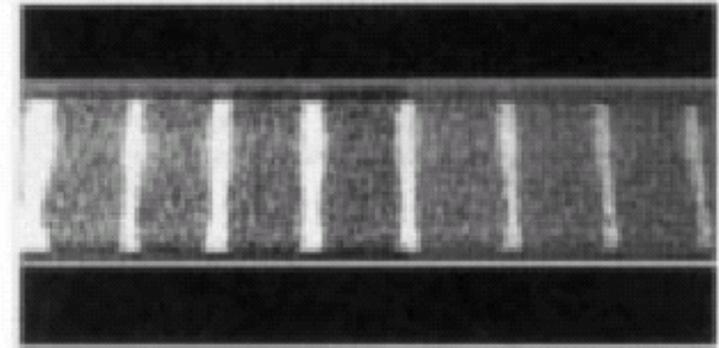
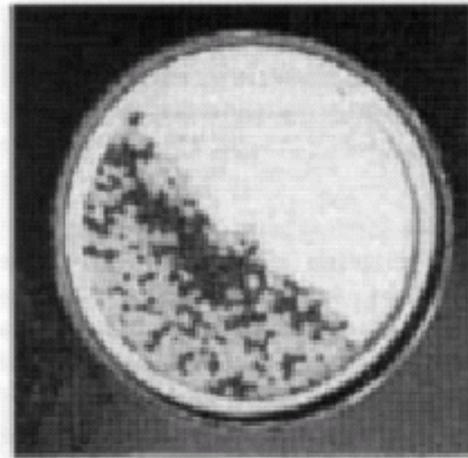
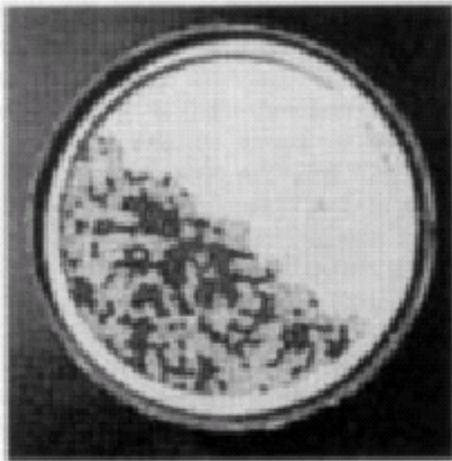
Surface patterns in vibrating beds

Typical Patterns (2)



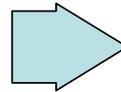
Multi-rolls convections

Segregation

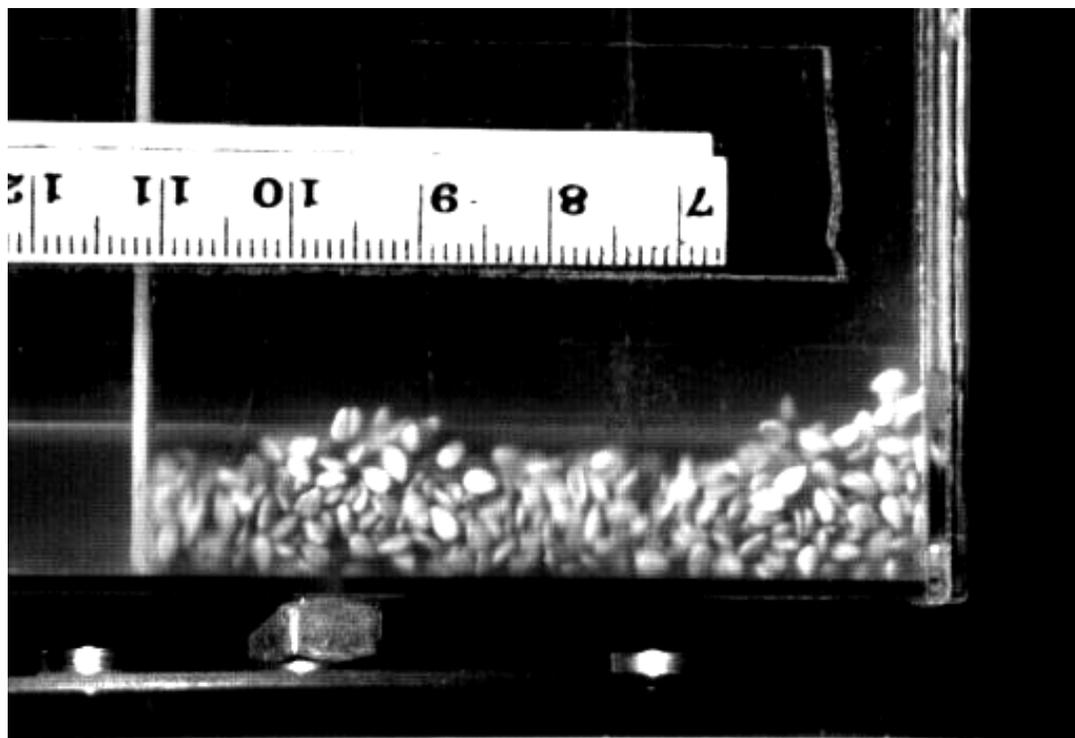


Radial segregation

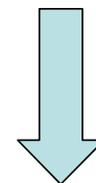
Axial segregation



粉体振動層の準2次元の挙動



- 左図：鵜川、佐野（東京農工大）による実験
- 弾性板の振動と類似



- 半定量的に有効性は確認されている。
- 斥力系で弾性的挙動は興味深い

1997.8.21



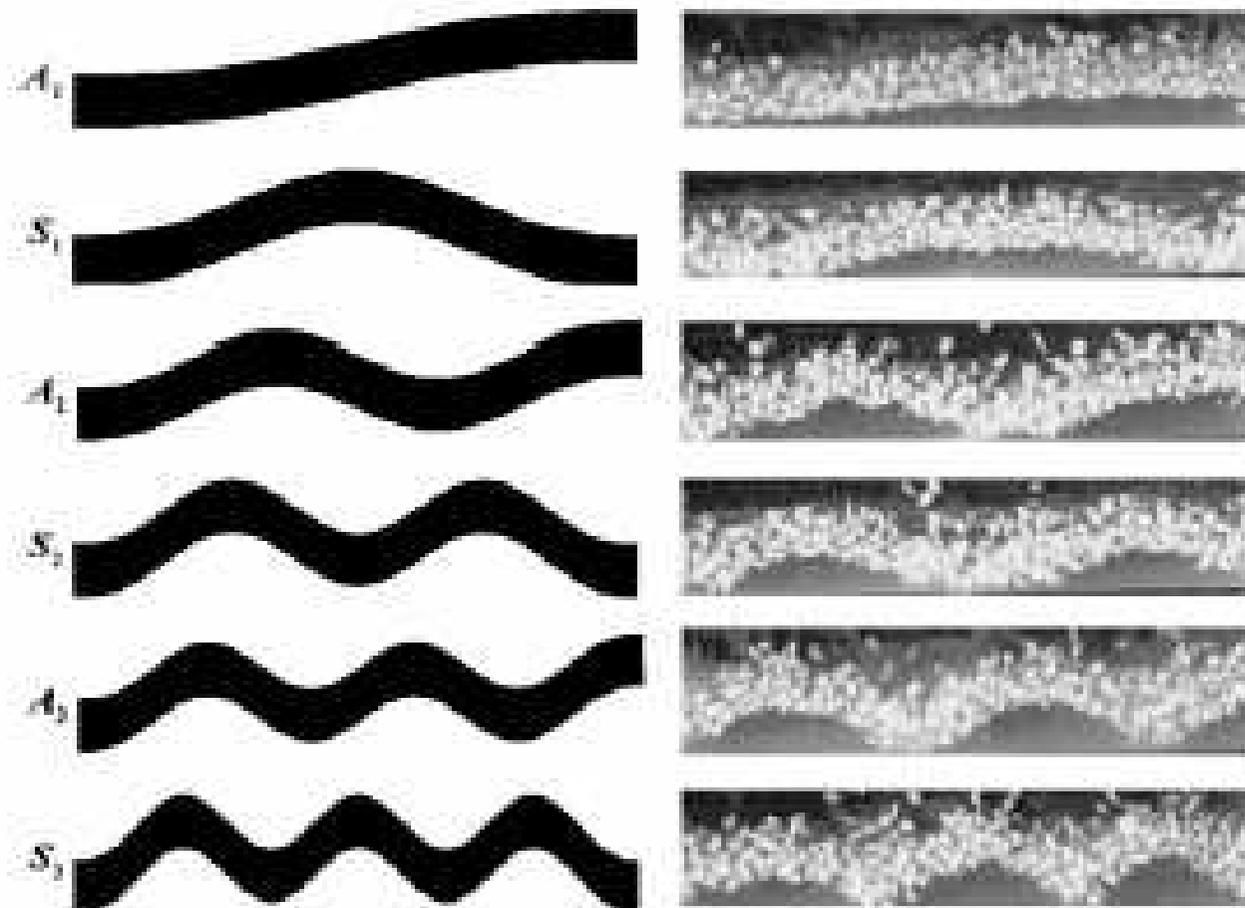


Fig. 2. Undulations of a thin granular layer. Right column is a corresponding example observed for an $h = 6.8$ mm layer of sesame: (A_1) $f = 20$ Hz, $a = 2.60$ mm, $\Gamma = 4.18$; (S_1) $f = 27$ Hz, $a = 2.52$ mm, $\Gamma = 7.41$; (A_2) $f = 30$ Hz, $a = 1.40$ mm, $\Gamma = 5.07$; (S_2) $f = 30$ Hz, $a = 2.02$ mm, $\Gamma = 7.32$; (A_3) $f = 30$ Hz, $a = 2.33$ mm, $\Gamma = 8.44$; (S_3) $f = 30$ Hz, $a = 2.64$ mm, $\Gamma = 9.56$. Mode S_0 is an almost rigid-body up and down motion.

実験で観測されたもの(2)

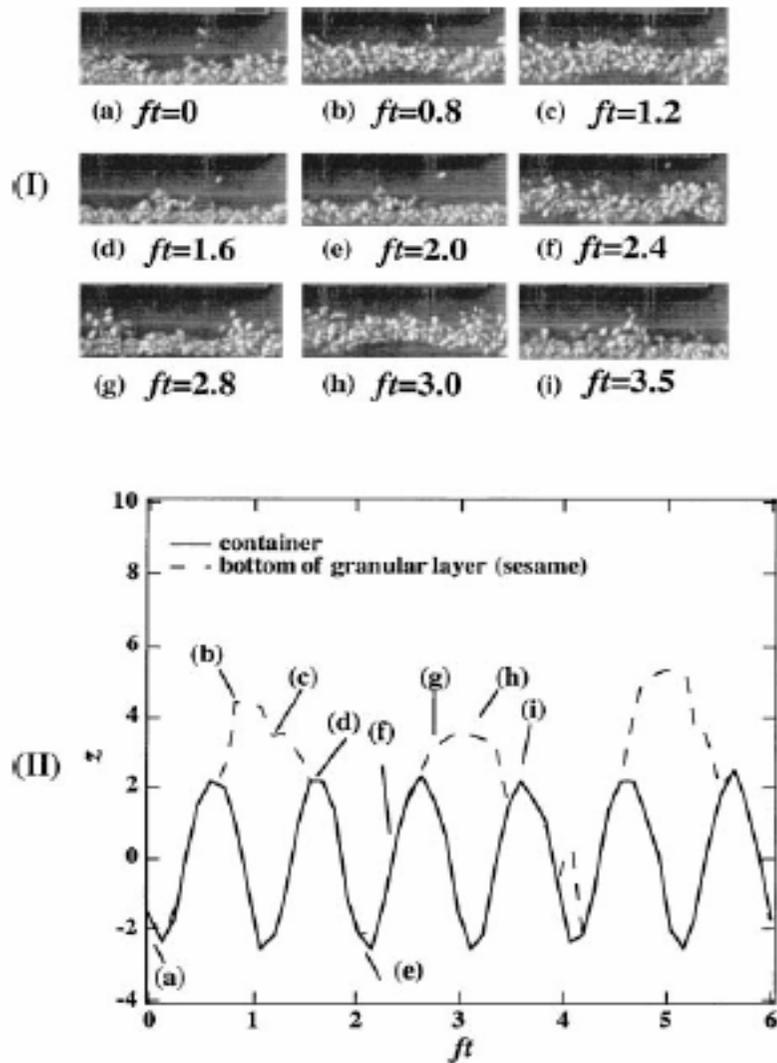


fig. 4. Relation between the container and the lower boundary of the granular layer: (I) Snapshots of the time sequence of undulations with $f = 30$ Hz, $a = 2.3$ mm and $h = 4.0$ mm (sesame layer), (II) Relation between the bottom of the container and the lower boundary of the granular layer; the alphabets (a)–(i) indicate the corresponding phases.

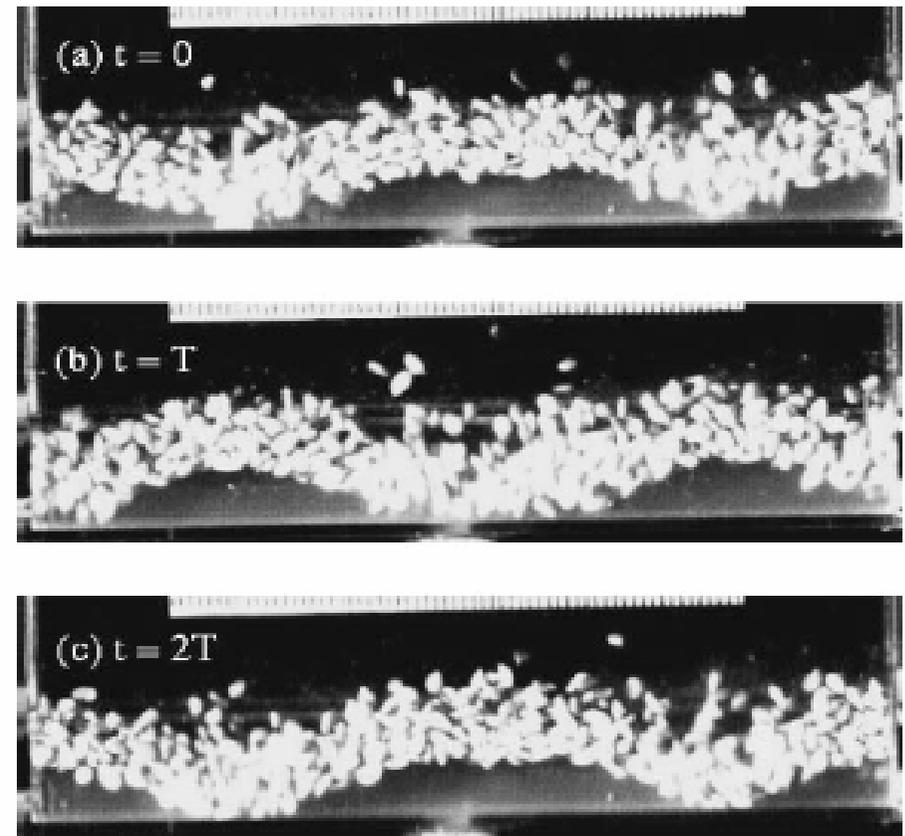


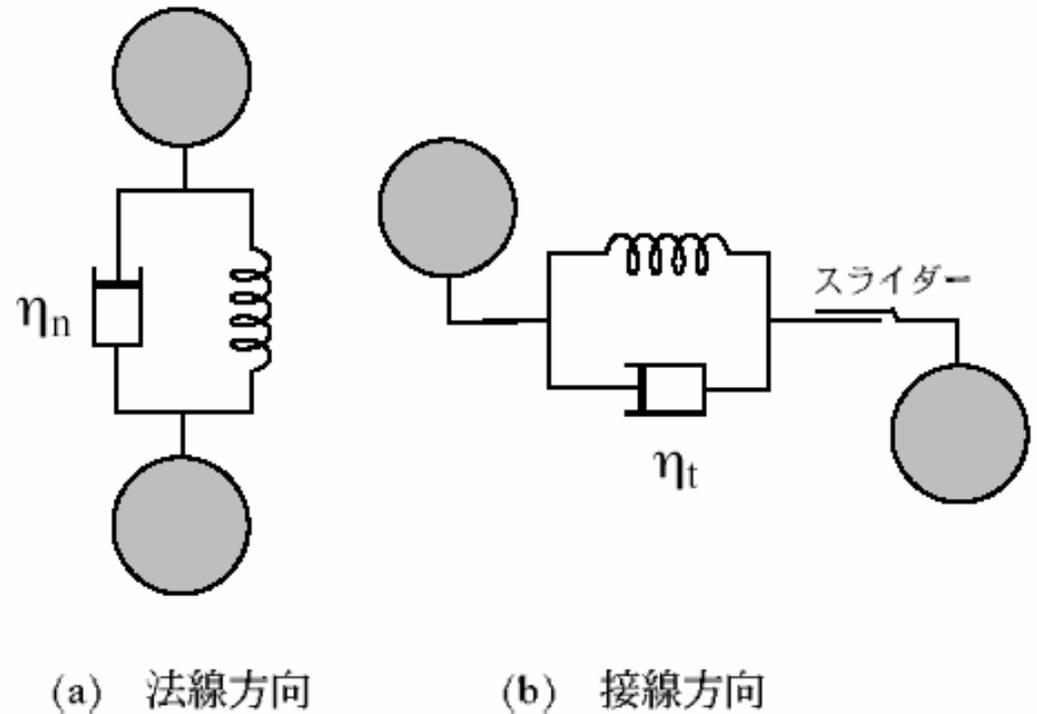
Fig. 3. Snapshots of the sesame layer at time (a) $t = 0$, (b) $t = T$ and (c) $t = 2T$.

I-B. Standard method of simulation for granular particles (DEM)

- DEM(=discrete or distinct element method) is a standard technique to simulate granular assemblies.
- This model is a kind of that for molecular dynamics simulation based on a soft sphere model.
- The model can describe both static friction and dynamical situations which is superior to high speed simulators such as inelastic hard sphere models.

Outline of DEM

- DEM includes both contact repulsive force and dynamical friction force.
- DEM includes the tangential contact force as well as the normal contact force.
- DEM usually contains the rotational motion of particles.
- For the simplicity of contact judgment we usually adopt soft spheres but we can introduce more realistic models.



Equations of motion for DEM

粒径が d , 質量 m , 慣性モーメントが I である場合に粒子の運動方程式は

$$\begin{aligned} m\ddot{\mathbf{x}}_i &= \sum_{\langle i,j \rangle} \theta(d - |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) (\tilde{\mathbf{F}}_n^{ij} + \tilde{\mathbf{F}}_t^{ij}) \\ I\dot{\boldsymbol{\omega}}_i &= \frac{d}{2} \sum_{i,j} \theta(d - |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|) (\mathbf{n} \times \tilde{\mathbf{F}}_t^{ij}) \end{aligned} \quad (3)$$

ここで $\mathbf{x}_i, \boldsymbol{\omega}_i$ は粒子 i の位置と角速度であり, 和は接触粒子対に対して取り, $\theta(x)$ はステップ関数, 即ち $x > 0$ に対して $\theta(x) = 1$, $x < 0$ に対しては $\theta(x) = 0$ であるとする. また \mathbf{n}, \mathbf{t} をそれぞれ接触粒子対の中心を結ぶ線に対して法線方向の単位ベクトル, 接線方向の単位ベクトルとし, $\tilde{\mathbf{F}}_n^{ij}, \tilde{\mathbf{F}}_t^{ij}$ はそれぞれ

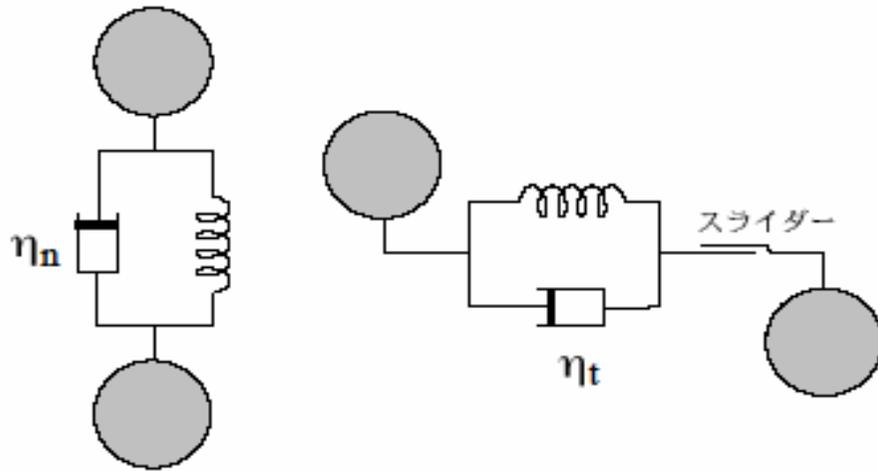
$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{F}}_n^{ij} &= \mathbf{F}_n^{ij} - \eta_n \mathbf{n} \mathbf{n} \cdot (\dot{\mathbf{x}}_i - \dot{\mathbf{x}}_j) \\ \tilde{\mathbf{F}}_t^{ij} &= \begin{cases} \mathbf{F}_{t, nsl}^{ij} & (|\mathbf{F}_{t, nsl}^{ij}| < \mu \tilde{\mathbf{F}}_n^{ij} \text{ の場合}) \\ \mu \tilde{\mathbf{F}}_n^{ij} & (\text{それ以外}) \end{cases} \\ \mathbf{F}_{t, nsl}^{ij} &= \mathbf{F}_t^{ij} - \eta_t \mathbf{t} [\mathbf{t} \cdot (\dot{\mathbf{x}}_i - \dot{\mathbf{x}}_j) + \frac{d}{2} (\omega_i + \omega_j)] \end{aligned} \quad (4)$$

で与えられる. ここで $\mathbf{F}_n^{ij}, \mathbf{F}_t^{ij}$ は (1),(2) 式に現れる $\mathbf{F}_n, \mathbf{F}_t$ の接触粒子の i, j のペアに対するものである.

DEMの問題点

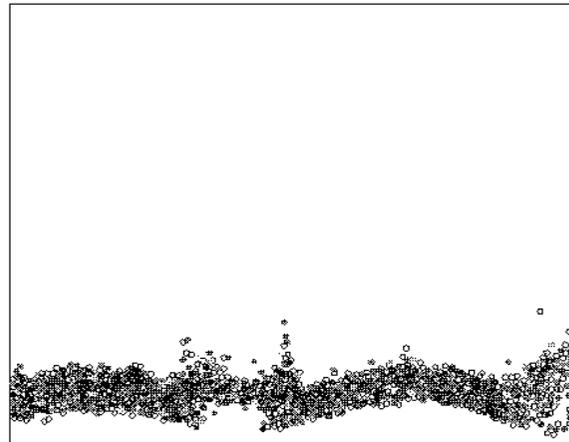
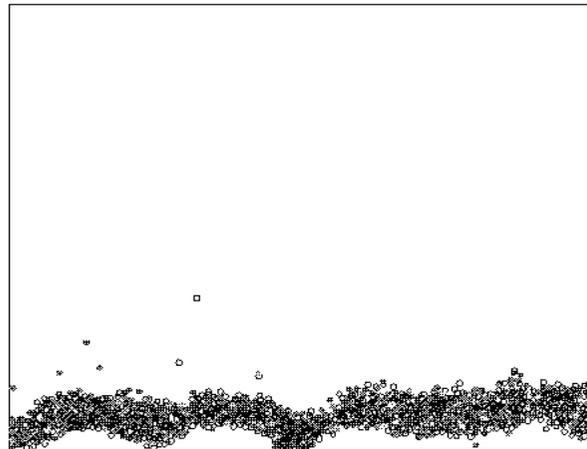
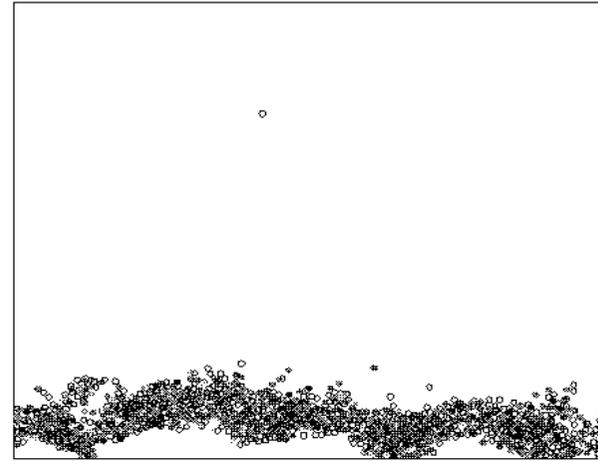
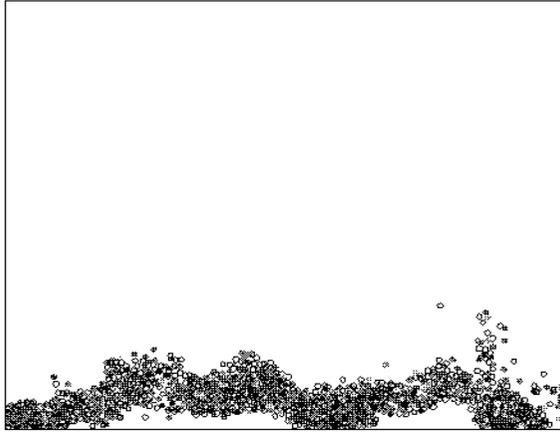
- ただでさえ多いパラメーターの中で決まらないパラメーターが多い。散逸に関するパラメーターは全く未知。
- 形状に依存する。また(後述のように)表面状態によって接触力は全く異なる。
- 大概の粉体は丸くないので接触(摩擦)力は大きく、転がりにくい。球状のモデルでは転がりすぎ。
- 遅い。スケールアップできない。
- シミュレーションできたとしても何も理解が進まない。

動的シミュレーション

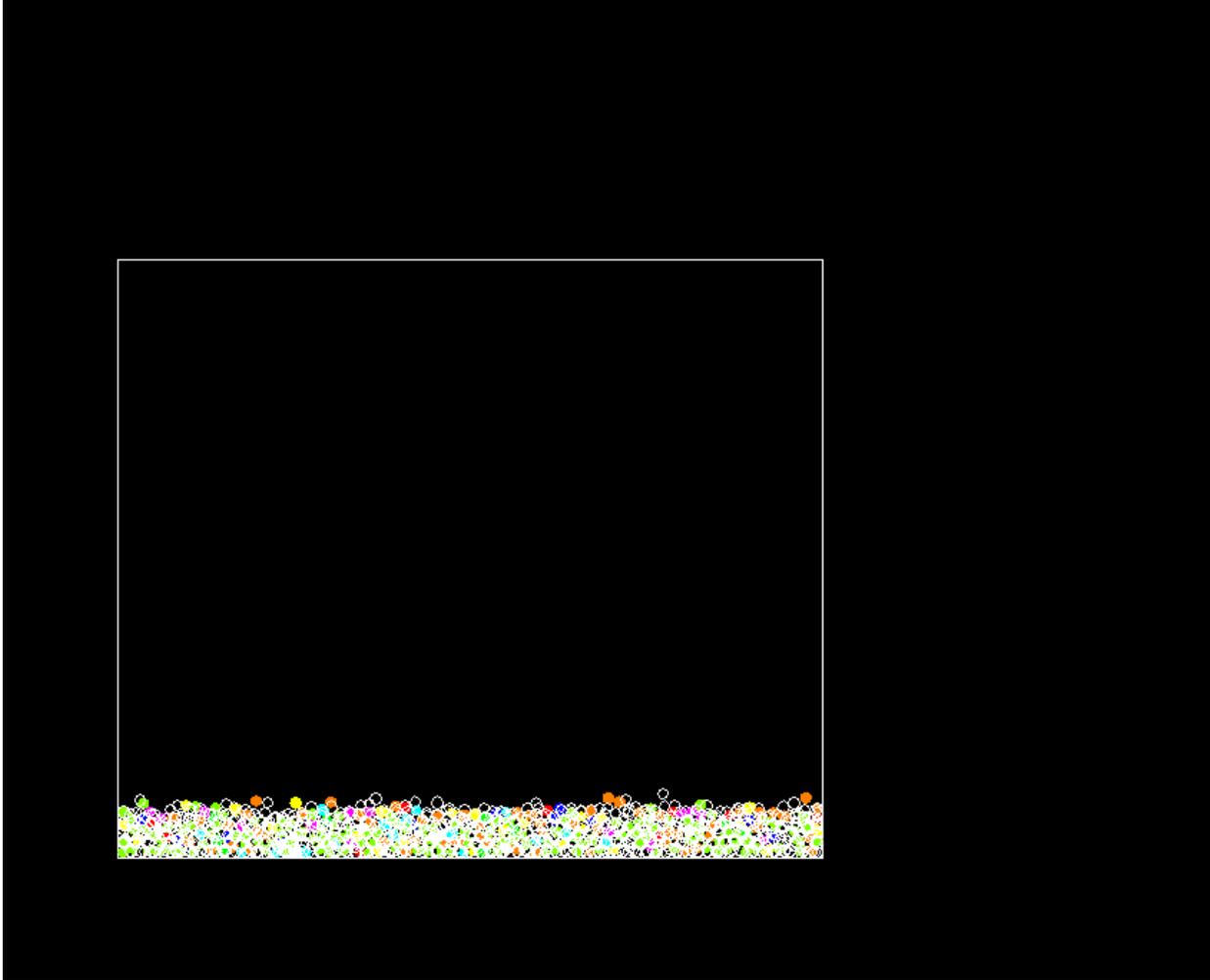


- 粉体粒子シミュレーション (DEM)
- 粒径分布 [0.8,1.0]の一様分布
- 層高 8, 横幅 90, 奥行き2.25, 粒子数 1342
- ばね定数 2×10^4 , 横ばね定数 1×10^4 , 摩擦係数 0.4
- 壁: 摩擦係数が倍、硬さも粒子の倍
- 散逸パラメータ: 1.0 (対臨界減衰), 時間刻み 2×10^{-4}
- 角振動数 2.5 振幅 1.6 時刻 1×10^3 まで
- 粒径 1 mmとすると周波数40 Hz, 振幅 2.0 mm, 加速度振幅 10
- 但し最大粒径d, 重力加速度gで無次元化

3次元DEMシミュレーションによるundulationの再現



動的シミュレーション (Movie)



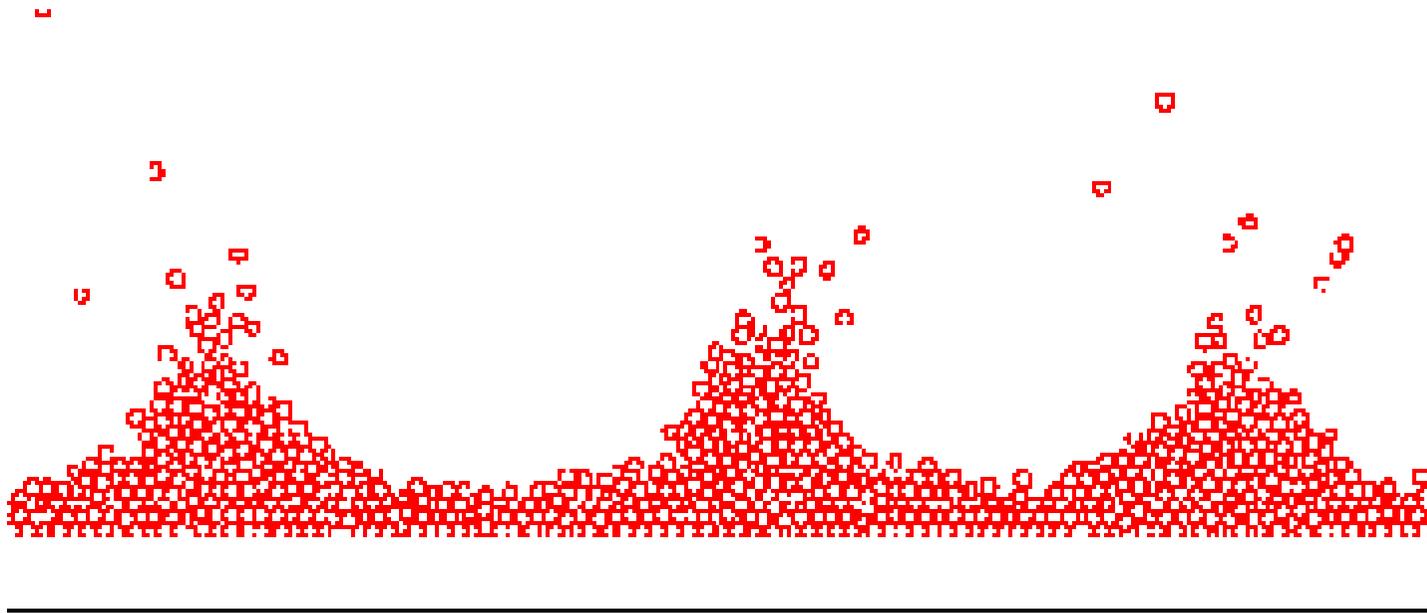
- 粉体粒子シミュレーション



- 再現される。

Ripple Formation

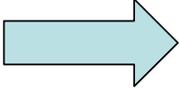
- 振動数が低く容器幅が大きい場合にはrippleになる。(容器の横壁に到達できない)



粉体物理の現状と問題点

- 各論としては重要で面白い問題が多い。応用上も重要。
- しかし教養のない物理学者には難しい。
- 結果に普遍性がないために、その結果にあまり興味を持たれない。
- 工学畑に(それも多くの学科に分散して)専門家集団が存在するので後発の物理学者にできることは多くない。
- 些細なモデルの違いで結果が大きく変わる。
 - 実験>>シミュレーション>>>>理論
- 理論物理の対象としては難しすぎる。
 - 理想的かつ簡単な問題を扱うべき。

II. 非平衡物理の現状

- Boltzmann  線形応答理論 (枠組みの完成)
 - 入れ物を計算する。
 - 臨界現象  輸送係数の異常 (Mode Coupling, 動的RG)
 - Dense Gas の輸送係数の有限性
 - 新しい方向を探る
 - Pattern formation (1980-1992)
 - Chaos (1977-1990)
 - 複雑系 (1990-2000)
 - 各論 (粉体も含めて)、五十年一日の如く生物物理

II-A 非平衡の本質： 熱力学の不可逆性

$$(T; X) \rightarrow (T'; X') \Leftrightarrow S(T'; X') \geq S(T; X)$$

$S(T; X)$:entropy

T :intensive variable

X :quantive variable

a :adiabatic operation

等温 (Clausius の定義)

$$\Delta S = \frac{Q_{max}(T; X \rightarrow X')}{T} \geq \frac{\Delta Q}{T}$$

ΔS :エントロピーの変化

$Q_{max}(T; X \rightarrow X')$:最大吸熱量

ΔQ :一般の吸熱量

エントロピーは増える (減らないといったほうが正しい。) \Rightarrow 不可逆過程

力学：時間反転対称性 \Rightarrow 可逆

熱力学的自然観と力学的自然観

1880 エネルギー派 (熱力学原理主義者)

E.Mach , W.Ostwald , P.Duhem

「分子は存在しない」

「力学はいらない」

原子論者との戦い

統計力学：原子・分子と熱力学を繋ぐ学問

→ 1902:Gibbs 非平衡を切り離す

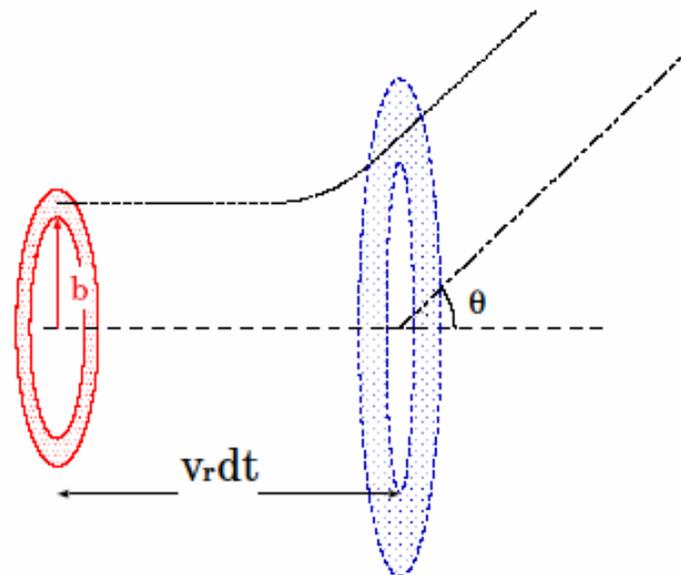
本来の (統計力学の) 目的: 力学集団 熱力学の不可逆性を導く
分子・原子の存在を示す

Ludwig Boltzmann

Boltzmann の目的：熱力学第2法則を力学的に証明したい

1866 試み(その1)

1872 Boltzmann 方程式を導入 $\Rightarrow H$ 関数が時間の単調 ($H = -kS$)



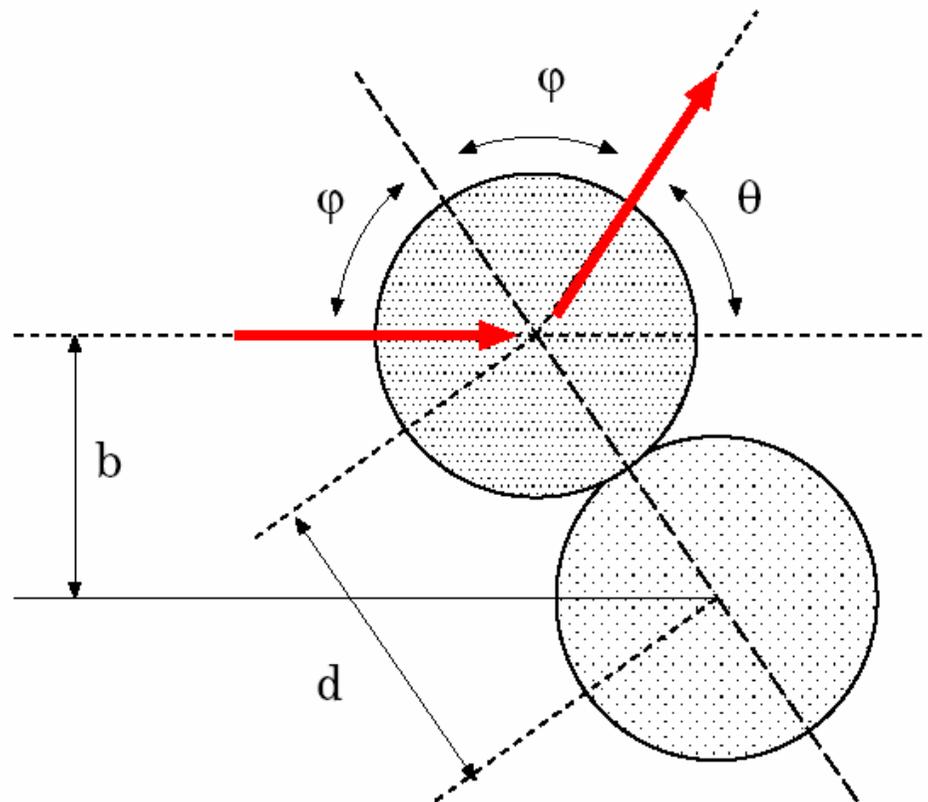
速度が $(c_1, c_1 + dc_1)$ の間にある分子と $(c, c + dc)$ との衝突で $(\theta, \theta + d\theta)$ に散乱される確率

Boltzmann方程式の導出

$$f(\mathbf{c})d\mathbf{c}f(\mathbf{c}_1)d\mathbf{c}_1v_rI(v_r, \theta)2\pi \sin \theta dt 2\pi b db$$

ハードコア分子のとき

$$I(v_r, \theta) = \frac{d^2}{4}, \quad 2\pi \int_0^\pi d\theta \sin \theta I(v_r, \theta) = \pi d^2$$



H定理(1)

H 定理はエントロピー増加則を'力学的'に示す定理。(そもそも分布関数 f を導入している時点で力学的にないといえるのだが...)

$$H \equiv \int \int dcd\mathbf{r} f \ln f \Leftrightarrow s = -k \sum_i p_i \ln p_i \quad (\text{Shannon entropy})$$

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \int \int \int \int d\mathbf{r} d\sigma d\mathbf{c} d\mathbf{c}_1 v_r (\ln f + 1) (f' f'_1 - f f_1) \\ &= \frac{1}{4} \int \int \int \int d\mathbf{r} d\sigma d\mathbf{c}_1 d\mathbf{c} v_r (f' f'_1 - f f_1) \left(\ln \left(\frac{f f_1}{f' f'_1} \right) \right) \end{aligned}$$

ここで $y \equiv f f_1, x \equiv f' f'_1$ とおくと

$$G(x, y) = (y - x) \ln \left(\frac{y}{x} \right) \leq 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dH}{dt} \leq 0$$

Boltzmann方程式

$$\left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_c = \int d\mathbf{c}_1 2\pi b db v_r (f' f'_1 - f f_1)$$
$$\frac{d}{dt} f(\mathbf{r}(t), \mathbf{c}(t), t) = \frac{\partial f}{\partial t} + \dot{\mathbf{r}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \dot{\mathbf{c}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}}$$
$$= \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}_{ex}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}}$$

したがって、

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{c} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}_{ex}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{c}} = \int d\mathbf{c}_1 2\pi b db v_r (f' f'_1 - f f_1)$$

Boltzmann equation

H定理(2)

平衡分布

$$\ln f_{eq} = A + m\mathbf{B} \cdot \mathbf{c} + \beta \frac{1}{2} m c^2$$

$$f_{eq} \propto \exp \left[\frac{\beta}{2} m c^2 + m\mathbf{B} \cdot \mathbf{c} + m\mathbf{B} \cdot \mathbf{c} \right]$$

$$\propto \exp \left[\beta \frac{1}{2} m (\mathbf{c} - \langle \mathbf{c} \rangle)^2 \right], \langle \mathbf{c} \rangle : \text{定数}$$

つまり、 $\frac{dH}{dt} = 0$ が成立するのは系が平衡状態にあるときであり、その平衡状態での分布関数は Maxwell 分布である。

問題点

問題点

- Loschmidt(1876) 力学的に可逆であれば考えているプロセスの逆プロセスが存在するはずである。
 - ⇒ 速度を一挙に反転させればエントロピーは減ることも可能。
 - ⇒ 平衡状態が常に保たれているわけではない。
- Zermelo(1896) 1890 Poincaré 再帰定理 力学系は有限時間で初期状態に回帰する
 - ↓
 - H 関数がある時間領域で減少してもいずれ増加して元に戻る

計算機実験によるLoschmidtの反論の実証

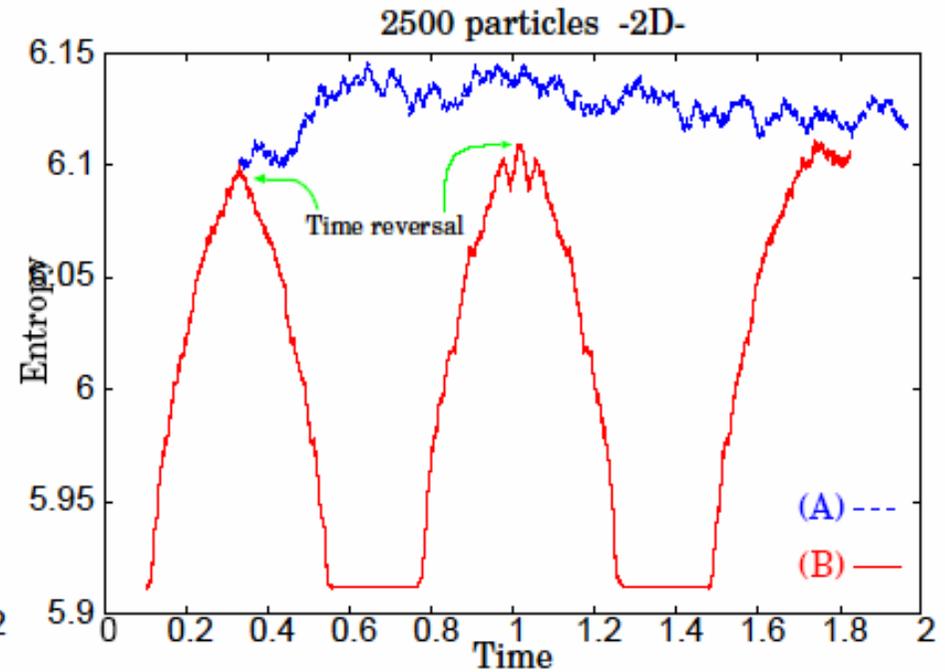
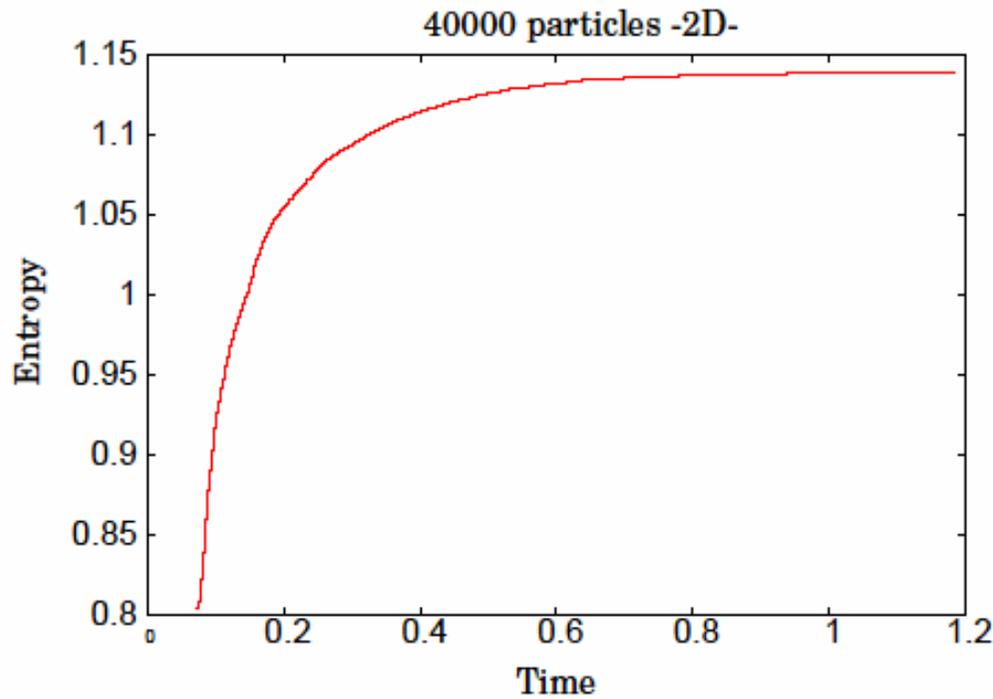


図 1: Entropy の時間発展 : 40000 粒子
のとき

図 2: Entropy の時間発展 : 2500 粒子
のとき、(A):順時間、(B):時間反転。

Boltzmannの再反論

- Loschmidt はとてもありそうにない初期条件が存在することを指摘したのみ



初期条件の尤もらしさが重要

- Zermelo に対しては
再帰時間 \gg 宇宙年齢
- 実際には統計力学はこの問題を完全に解決していない。
- 平衡統計力学はこの問題を回避してアンサンブルの理論を構成したが、非平衡統計力学は不可逆性の問題に正面から取り組む必要がある。

力学と統計力学は整合するか。

Liouville の定理

$$\Delta\Gamma_t = \Delta\Gamma_0 \quad : \quad \Delta\Gamma_t = \Delta\mathbf{q}_t \Delta\mathbf{p}_t \quad \text{位相体積要素}$$

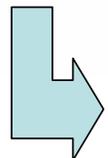
確率保存

$\rho(\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t, t)$: 確率分布、 \mathbf{q}_t : 位置、 \mathbf{p}_t : 運動量、 t : 時間

$$\rho(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t_0) = \rho(\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t, t)$$

Gibbs エントロピーの時間発展

$$\begin{aligned} S_{Gibbs}(t) &= -k \int \rho(\mathbf{q}_t, \mathbf{p}_t, t) \ln \rho(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t_0) d\Gamma_t \\ &= -k \int \rho(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t_0) \ln \rho(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, t_0) d\Gamma_0 \\ &= S_{Gibbs}(t_0) \end{aligned}$$



エントロピーを増やすためには粗視化が必要

粗視化とエントロピーについての直感的考察

☆ 自由の逡減、粗視化

大自由度系

- ・ 系 + 環境 ; 系と環境の間のやりとり'熱'
- ・ 観測 ; tracer particle(s)、他の粒子の動きは無相関にみえる

情報の粗視化

分解能に限界がある

$\Delta\Gamma_t = \Delta\Gamma_0$ (位相体積の保存体積)

混合性があるとする (軌道拡大率が正)

(古典) エントロピー

$$S(t) = f \ln \frac{\Delta\Gamma(t)}{(2\pi\hbar)^s}$$

混合性 + 分解能の限界 \Rightarrow エントロピーの増大

粗視化についてのイメージ

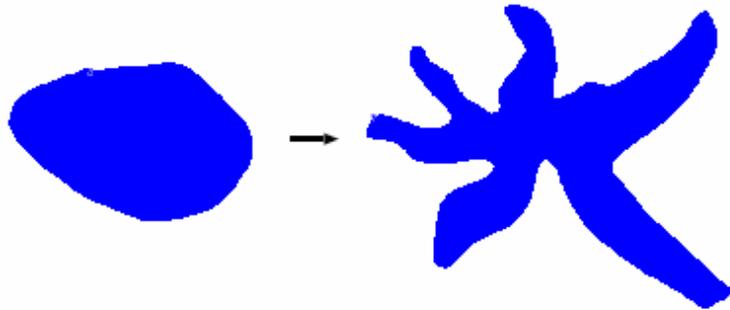


図 3: 位相体積の時間発展：体積は変わらないが細くなる

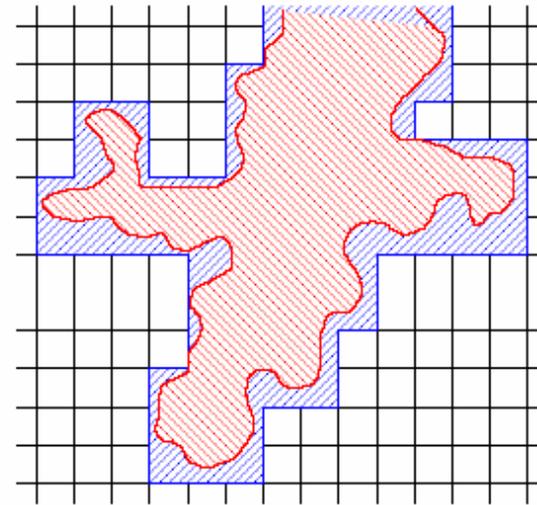


図 4: 位相体積の粗視化 (デジタル化)：有効位相体積が (図の青斜線部だけ) 増加したように見える

☆ 初期条件を完全に設定することはできない
(初期条件の取り方によるとエントロピーが減るようになる)

尤もらしい分布をとる (選ぶ)

→ エントロピーは、ほぼ確実に増える。

II-B: Langevin方程式とFokker-Planck方程式

ブラウン粒子の位置を $X(t)$ としよう。その運動は

$$\zeta \frac{dX}{dt} = -\frac{\partial U_0(X)}{\partial X} + F(t) \quad (1.6)$$

という式に近似的に従う。ここで ζ は散逸を表す抵抗係数、 $U_0(X)$ はポテンシャルである。 $F(t)$ はランダムな揺動力であり、次の条件を充たすものとする：

$$\langle F(t) \rangle = 0, \quad \langle F(t)F(t') \rangle = 2\zeta k_B T \delta(t - t') \quad (1.7)$$

ここで k_B はボルツマン定数であり、 T は温度である。また $\langle f(F) \rangle$ は確率変数 F による平均を表す。(1.7) 式の意味するところは無相関に撃力がブラウン粒子に働くという事である。(1.7) 式を充たす最も簡単で普遍的な F の分布はガウス分布である。そのときは高次の相関は全て消える。従って (1.6), (1.7) 式に従い、高次の相関がないプロセスをガウス (Gauss) 過程とも呼ぶ。また (1.7) 式は揺動力と散逸を結ぶ関係式なので揺動散逸定理と呼ばれる非平衡物理の基本法則の一表現となっている。¹

ここで (1.6) を微小時間間隔 Δt で積分し、(1.7) を利用すると

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta X \rangle}{\Delta t} = -\frac{1}{\zeta} \frac{\partial U_0}{\partial X}, \quad \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta X^2 \rangle}{\Delta t} = \frac{2k_B T}{\zeta} \quad (1.8)$$

を得る。但し $\Delta X = X(t + \Delta t) - X(t)$ である。また $\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \langle \Delta X^n \rangle / \Delta t = 0$ ($n \geq 3$) も容易に示す事ができる。

Fokker-Planck 方程式の導出

一方、確率分布 $P(X, t)$ が過去と無相関に時間発展するとする。このとき X から $X + \Delta X$ への単位時間当たりの遷移確率 $W(X, \Delta X)$ を用いて $P(X, t)$ の時間発展は

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = -P(X, t) \int d(\Delta X) W(X, \Delta X) + \int d(\Delta X) W(X - \Delta X) P(X - \Delta X, t) \quad (1.9)$$

と書けるであろう。こうした過程をマルコフ (Markov) 過程と呼ぶ。ここで

$$f(X - \Delta X) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\Delta X)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial X^n} f(X)$$

を用いると (1.9) は

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\Delta X)^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial X^n} \int d(\Delta X) \Delta X^n W(X, \Delta X) P(X, t) \quad (1.10)$$

と書き直す事ができる。遷移確率を Δt で割ったものが単位時間当たりの遷移確率 $W(X, \Delta X)$ なので (1.10) に表れる積分は

Fokker-Planck方程式とFDT

$$\int d(\Delta X) \Delta X^n W(X, \Delta X) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Delta X^n \rangle}{\Delta t} \quad (1.11)$$

となる。今、ランジュバン方程式 (1.6) で表される確率過程を考えると (1.10), (1.11) 式から等価な発展方程式

$$\frac{\partial P(X, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial X} \left(D \frac{\partial P(X, t)}{\partial X} + \frac{1}{\zeta} \frac{\partial U_0}{\partial X} P(X, t) \right) \quad (1.12)$$

となる。この方程式はフォッカー・プランク方程式或はスモルコウスキー方程式と呼ばれる。 D は拡散係数であるが (1.7) と両立するためには

$$D = \frac{k_B T}{\zeta} \quad (1.13)$$

が必要である。この関係式はアインシュタインによって導かれたが第1種揺動散逸定理の最も簡単な形を与えている。 [9]

安定性

前節で述べたランダムウォークから拡散方程式²を導く事や諸々の統計的性質は容易に説明できるが、紙数の関係で省かざるを得ない。ここではその不可逆性を紹介しよう。今ヘルムホルツの自由エネルギー F を

$$F = \int dX P(X, t) (k_B T \ln P(X, t) + U_0(X)) \quad (1.14)$$

を導入する。言うまでもなく第1項はエントロピー $-S$ に温度をかけたものである。 F の時間微分は (1.12) 式を用いて

$$\dot{F} = -\frac{1}{\zeta} \int dX P(X, t) (k_B T \ln P(X, t) + U_0(X))^2 \leq 0 \quad (1.15)$$

となる。但し (1.15) の導出には確率の保存 $\int dX P(X, t) = 1$ と部分積分及び積分境界で P が 0 になることを用いている。[11]

このようにランジュバン方程式は自由エネルギーが減少するように時間変化し、不可逆性を持つ。また自由エネルギーの変化がないときは平衡分布

$$P_{eq}(X) \propto \exp\left[-\frac{U_0(X)}{k_B T}\right] \quad (1.16)$$

を充たす。ここで右辺に運動エネルギーが含まれていないのはランジュバン方程式 (1.6) が過減衰の方程式だからである。従ってランジュバン方程式は平衡への緩和を表す方程式と考えるが良い。³

加速度効果

(1.6) 式はある意味で過減衰の方程式である。実際にはブラウン粒子の慣性の効果もあるであろう。従ってより一般には

$$M\ddot{X} + \zeta\dot{X} = -\frac{\partial U_0}{\partial X} + F(t) \quad (1.17)$$

と表される。但し M は質量である。この方程式と等価な確率微分方程式はクラマース (Kramers) 方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} P(X, P, t) = \left\{ -\frac{\partial}{\partial X} \frac{P}{M} + \frac{\partial}{\partial P} \frac{\partial U_0}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial P} \zeta \left(\frac{P}{M} + k_B T \frac{\partial}{\partial P} \right) \right\} P(X, P, t) \quad (1.18)$$

として知られる。この方程式の平衡分布は

$$P_{eq}(X, P) \propto \exp \left[-\frac{1}{k_B T} \left(\frac{P^2}{2M} + U_0 \right) \right] \quad (1.19)$$

ランジュバン方程式の導出

質量 M のブラウン粒子の位置、運動量を $\{X, P\}$ とし、それ以外の質量 m の熱浴粒子の位置、運動量を $\{x_j, p_j\}$ ($j = 1, \dots, N$) とする。この系の Hamiltonian は

$$H = \frac{P^2}{2M} + \sum_{j=1}^N \frac{p_j^2}{2m} + U(X, \{x_j\})$$
$$U(X, \{x_j\}) = U_0(X) + \sum_{j=1}^N \frac{m\omega_j^2}{2} \left\{ x_j - \frac{\gamma_j}{m\omega_j^2} a(X) \right\} \quad (1.20)$$

と書き表されるとしよう。これは外場中のポテンシャル $U_0(X)$ の他に熱浴の自由度が固有振動数 ω_j , 結合の強さ γ_j で線形に絡み付いたものである。

運動方程式は古典運動量の自明な関係を考慮して

$$M\ddot{X} = -\frac{\partial U_0}{\partial X} + a'(X) \sum_{j=1}^N \gamma_j \left\{ x_j - \frac{\gamma_j}{m\omega_j^2} a(X) \right\},$$
$$m\ddot{x}_j = -m\omega_j^2 x_j + \gamma_j a(X) \quad (1.21)$$

となる。但し $a'(X) = da(X)/dX$ である。(1.21) の第2式は x_j に対する2階の線形常微分方程式なので X を含んだ形で解く事ができる。その結果は

$$x_j(t) - \frac{\gamma_j}{m\omega_j^2} a(X(t)) = -\frac{\gamma_j}{m\omega_j^2} \int_0^t dt' \cos[\omega_j(t-t')] \frac{da(X(t'))}{dt'}$$
$$+ \left\{ x_j(0) - \frac{\gamma_j}{m\omega_j^2} a(X(0)) \right\} \cos(\omega_j t) + \dot{x}_j(0) \frac{\sin(\omega_j t)}{\omega_j} \quad (1.22)$$

一般化Langevin方程式と粗視化

となる。この式を X の式に代入すると

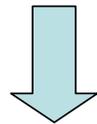
$$M\ddot{X} = -\frac{\partial U_0(X)}{\partial X} - \int_0^t dt' \zeta(t-t') \frac{da(X(t'))}{dt'} + F(t) \quad (1.23)$$

を得る。但し

$$\begin{aligned} \zeta(t) &= a'(X) \sum_{j=1}^N \frac{\gamma_j^2}{m\omega_j^2} \cos(\omega_j t), \\ F(t) &= a'(X) \sum_{j=1}^N \gamma_j \left[\left\{ x_j(0) - \frac{\gamma_j}{m\omega_j^2} a(X(0)) \right\} \cos(\omega_j t) + \dot{x}_j(0) \frac{\sin(\omega_j t)}{\omega_j} \right] \end{aligned} \quad (1.24)$$

となる。

この式は可逆



粗視化が必要

- ①初期条件に最も確からしい分布を取る
- ②メモリー効果を切断し、マルコフ近似を取る

III. Boltzmann方程式とその応用

- 気体論が非平衡の基本
 - 粒子の接触がないので最も簡単かつ汎用性がある
- Boltzmann方程式の応用を調べることは重要
 - III-A. Boltzmann方程式と流体力学
 - III-B. Burnett order solution and its application(金賢得、早川)
 - III-C. 非弾性ガスの統計力学
 - III-D. 現実的な粉体ガスとその統計力学(河原田、早川)
 - 新しいLangevin方程式の応用

III-A. Boltzmann方程式と流体力学

位置 \mathbf{r} , 速度 \mathbf{c} をもつ粒子の分布関数 $f(\mathbf{c}, \mathbf{r}, t)$ の従う Boltzmann 方程式は

$$\partial_t f + (\mathbf{c} \cdot \nabla) f = J[f, f] = \int d\mathbf{c}_1 \mathcal{J}(f, f_1 \rightarrow f', f_1') \quad (1)$$

と書ける。但し外力はないとする。ここで $J[f, f] = \int d\mathbf{c}_1 \mathcal{J}(f, f_1 \rightarrow f', f_1')$ は分布関数が衝突前後で f, f_1 から f', f_1' に変化することを表す衝突積分である。

Boltzmann 方程式は複雑な積分、微分方程式なので一般に解を求めることは容易ではない。しかし流体力学スケール L , 平均自由行程 l , 粒径 d の間にスケールの分離 $L \gg l \gg d$ が成立する場合は衝突における保存量の満たす連続方程式 (流体力学方程式) を系統的に導出することが可能である。

簡単のために気体分子は全て同じ質量、粒径を持ち、内部自由度はないと仮定する。稀ガスをイメージすればよいが、多くの議論では相互作用もハードコアであると単純化する。衝突保存量は質量、運動量、エネルギーである。すなわち m_i, \mathbf{c}_i ($i = 1, 2$) を衝突する 2 粒子の質量と速度すると保存則

$$m_1 + m_2 = m_1' + m_2' \quad (2)$$

$$m(\mathbf{c}_1 + \mathbf{c}_2) = m(\mathbf{c}_1' + \mathbf{c}_2') \quad (3)$$

$$\frac{1}{2}m(\mathbf{c}_1^2 + \mathbf{c}_2^2) = \frac{1}{2}m(\mathbf{c}_1'^2 + \mathbf{c}_2'^2) \quad (4)$$

流体力学変数と流体方程式

$$n = \int d\mathbf{c} f d\mathbf{c} \quad (6)$$

$$n\mathbf{u} = \int d\mathbf{c} \mathbf{c} f \quad (7)$$

$$\frac{3}{2}nkT = \int d\mathbf{c} \frac{1}{2}m(\mathbf{c} - \mathbf{u})^2 f \quad (8)$$

がそれぞれ流体力学変数となっている。

(1) 式を直接積分すると

$$\partial_t n + \int d\mathbf{c} (\mathbf{c} \cdot \nabla) f = \partial_t n + \nabla \cdot (n\mathbf{u}) = 0 \quad (9)$$

を得る。この式は質量の保存則に他ならない。

(1) 式に \mathbf{c} をかけて積分すると

$$\partial_t n\mathbf{u} + n\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{n} \nabla \cdot P_{ij} \quad (13)$$

エネルギー方程式は (1) 式に $mc^2/2$ をかけて積分することで得られる。 $\mathbf{w} = \mathbf{c} - \mathbf{u}$ とすると

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{3}{2}nkT \right) = -\nabla \cdot \mathbf{q} - \frac{1}{m} \nabla_i u_j P_{ij} - \frac{3}{2}nkT \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (16)$$

となる。ここで $D/Dt = \partial_t + \mathbf{u} \cdot \nabla$ である。

Pressure tensor and heat current : C-E method

$$P_{ij}[\mathbf{r}, t|f] = \frac{n}{\beta} \delta_{ij} + \int d\mathbf{v} D_{ij}(\mathbf{V}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t),$$

$$\mathbf{q}[\mathbf{r}, t|f] = \int d\mathbf{v} \mathbf{S}(\mathbf{V}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t), \quad (12)$$

$$D_{ij}(\mathbf{V}) \equiv m \left(V_i V_j - \frac{1}{3} V^2 \delta_{ij} \right), \quad \mathbf{S}(\mathbf{V}) \equiv \left(\frac{m}{2} V^2 - \frac{5}{2\beta} \right) \mathbf{V}.$$

流体力学変数 n, \mathbf{u}, T に隷従して決まるとする :

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f[\mathbf{v}|n, \mathbf{u}, T].$$

更に 1 階の空間微分を摂動の展開パラメータ ϵ として分布関数を

$$f = f^{(0)} + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots,$$

と展開した後²¹, $\epsilon = 1$ と置く.²² 更に解の一意性を保証するために可解条件

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int d\mathbf{v} f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

$$n(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

$$\frac{3}{2} n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} m \mathbf{V}^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} m \mathbf{V}^2 f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$$

を課す.

局所平衡流体とBoltzmann方程式

ここでH定理の証明の際に述べた通り、Maxwell-Boltzmann分布

$$f_{MB} = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left[-\frac{mw^2}{2kT}\right] \quad (17)$$

が安定な平衡分布となっていることを思い出そう。ここで局所平衡分布を仮定した際にどのような流体の運動方程式、エネルギー方程式となるかを調べることは重要である。このとき

$$P_{ij} = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int d\mathbf{c} w_i w_j \exp\left[-\frac{mw^2}{2kT}\right] = \delta_{ij} \frac{p}{m} \quad (18)$$

となる。但し圧力 p は理想気体の状態方程式 $p = nkT$ に従う。従って (13) 式は

$$\frac{D}{Dt} \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p \quad (19)$$

となる。但し $\rho = nm$ である。この (19) 式は完全流体の Euler 方程式に他ならない。

一方、平衡分布の式 (17) 式を用いると熱流 $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ であるので、(18) と組み合わせて、エネルギー方程式 (16) は

$$\frac{D}{Dt} (nkT) = -\frac{5}{2} p \nabla \cdot \mathbf{u} \quad (20)$$

となる。ここで $n = n^{-2/3} n^{5/3}$ と分割して整理すると

$$\frac{D}{Dt} (n^{-2/3} T) = 0 \quad (21)$$

となる。単原子分子の比熱比 $\gamma = 5/3$ であることを思い出し、体積 V が密度に反比例することを用いると、(21) 式は理想気体の断熱の式 $TV^{\gamma-1} = \text{const.}$ が流体と共に動く座標で成立することを意味する。

輸送係数と線形応答理論

線形化Boltzmann方程式

$$\mathcal{L}\Phi^{(1)} = f^{(0)}\left\{\left(C^2 - \frac{5}{2}\right)\mathbf{w} \cdot \nabla \ln T + 2\widehat{\mathbf{C}\mathbf{C}} : \nabla \mathbf{u}\right\} \quad (75)$$

$$\Phi^{(1)} = \mathcal{L}^{-1}f^{(0)}\left\{\left(C^2 - \frac{5}{2}\right)\mathbf{w} \cdot \nabla \ln T + 2\widehat{\mathbf{C}\mathbf{C}} : \nabla \mathbf{u}\right\} \quad (76)$$

と書ける。この(76)をストレステンソルと熱流の定義式に代入して輸送係数と見比べることで

$$\kappa = -\frac{1}{kT^2} \int d\mathbf{w} f^{(0)}(\mathbf{w}) j_x(\mathbf{w}) \mathcal{L}^{-1} j_x(\mathbf{w}) \quad (77)$$

$$\eta = -\frac{1}{kT} \int d\mathbf{w} f^{(0)}(\mathbf{w}) p_{xy}(\mathbf{w}) \mathcal{L}^{-1} p_{xy}(\mathbf{w}) \quad (78)$$

と書き換えられる。ここで

$$p_{xy} = m w_x w_y, \quad j_x = \left(\frac{1}{2} m w^2 - \frac{5}{2} kT\right) w_x \quad (79)$$

はそれぞれ1粒子あたりのストレステンソルの xy 成分と熱流の x 成分である。さらに \mathcal{L} は保存量以外に対して負の固有値をもつことと他の粒子との相関はないことを考慮すると(77),(78)は

$$\kappa = \frac{1}{kT^2 V} \int_0^\infty dt \langle J_x(0) J_x(t) \rangle \quad (80)$$

$$\eta = \frac{1}{kTV} \int_0^\infty dt \langle \Pi_{xy}(0) \Pi_{xy}(t) \rangle \quad (81)$$

但し

$$J_x(t) \equiv e^{Lt} \sum_{i=1}^N \left(\frac{mw_i^2}{2} - \frac{5}{2}kT \right) \quad \Pi_{xy}(t) = e^{Lt} \sum_{i=1}^N mw_{x,i}w_{y,i} \quad (82)$$

である。但しここでの添字の i は粒子につけたものである。これらの表現はより一般に成立する Green-Kubo 公式の例となっている。

詳細は省略するが、ハードコア系の計算の結果、熱伝導率と粘性率は以下の通り:

$$\kappa = \frac{75}{64d^2} \sqrt{\frac{k^3 T}{\pi m}} \quad \eta = \frac{5}{16d^2} \sqrt{\frac{kmT}{\pi}}$$

尚、熱伝導率と粘性率の定義は以下で与えられる:

$$\mathbf{q}^{(1)} = -\kappa \nabla T$$

$$P_{ij} = p\delta_{ij} - \eta \left(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla_k u_k \right) - \chi \nabla_k u_k \delta_{ij}$$

III-B. Burnett order solution of Boltzmann equation (with H-D. Kim)

- The distribution function for hard spheres is expanded as

$$f_1 = f_1^{(0)} + f_1^{(1)} + f_1^{(2)} + \dots = f_1^{(0)} (1 + \phi_1^{(1)} + \phi_1^{(2)} + \dots).$$

$f_1^{(0)}$ is the local Maxwellian distribution function, ν

$$f_1^{(0)} = n(\mathbf{r}) \left(\frac{m}{2\pi\kappa T(\mathbf{r})} \right)^{\frac{3}{2}} \exp \left[- \frac{m\mathbf{v}_1^2}{2\kappa T(\mathbf{r})} \right],$$

- To solve the Boltzmann equation Burnett assumed

$$f = f^{(0)} \left\{ 1 - \frac{4J_x}{5b_{11}n\kappa T} \left(\frac{m}{2\kappa T} \right)^{\frac{1}{2}} \sum_{r \geq 1} r! b_{1r} c_x \Gamma \left(r + \frac{5}{2} \right) S_{\frac{3}{2}}^r(\mathbf{c}^2) \right. \\ \left. + \frac{4096mJ_x^2}{5625b_{11}^2 n^2 \kappa^3 T^3} \left[\sum_{r \geq 2} r! b_{0r} \Gamma \left(r + \frac{3}{2} \right) S_{\frac{1}{2}}^r(\mathbf{c}^2) \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{r \geq 0} r! b_{2r} \left(2c_x^2 - c_y^2 - c_z^2 \right) \Gamma \left(r + \frac{7}{2} \right) S_{\frac{5}{2}}^r(\mathbf{c}^2) \right] \right\}, \quad (39)$$

Results (1)

b_{0r}

$r \leq 7$
4.380×10^{-1}
-5.429×10^{-2}
-4.098×10^{-3}
-3.184×10^{-4}
-2.087×10^{-5}

b_{1r}

$r \leq 7$
1.025
4.892×10^{-2}
3.715×10^{-3}
2.922×10^{-4}
2.187×10^{-5}
1.492×10^{-6}
8.322×10^{-8}

b_{2r}

$r \leq 7$
-3.320×10^{-2}
-1.276×10^{-1}
6.414×10^{-2}
5.521×10^{-3}
4.214×10^{-4}
3.106×10^{-5}
1.861×10^{-6}

Results (2)

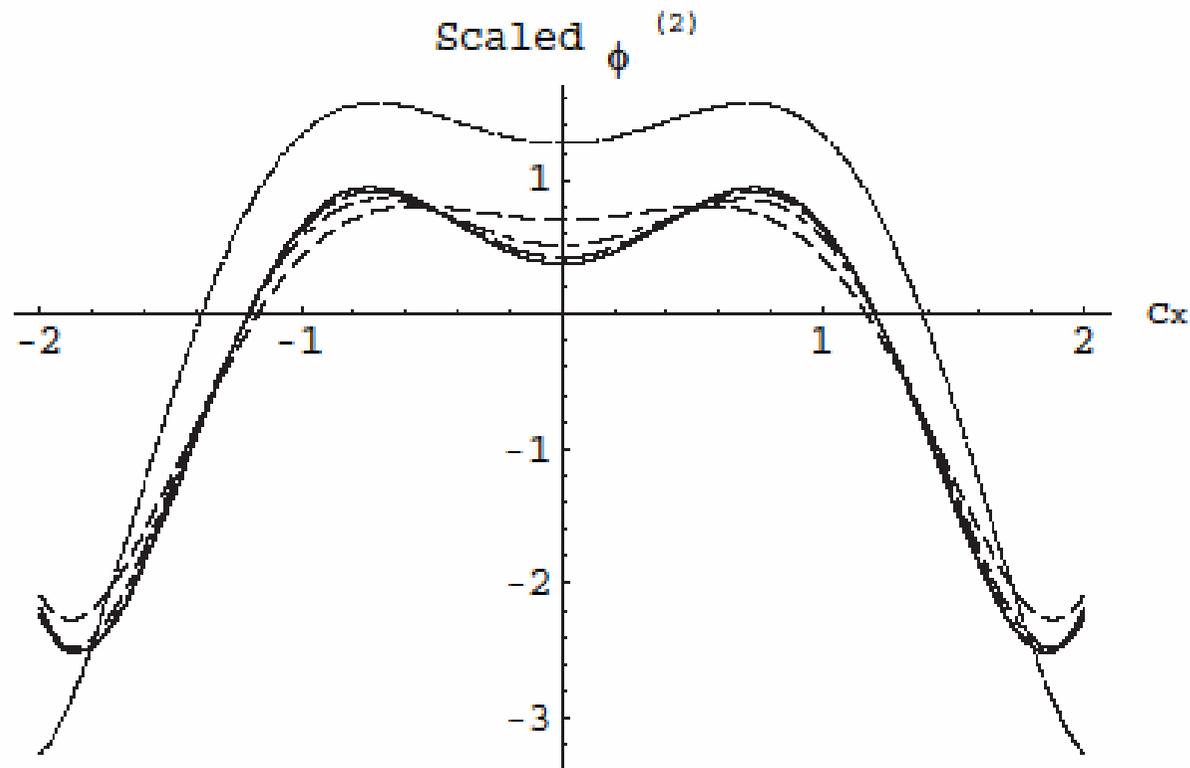
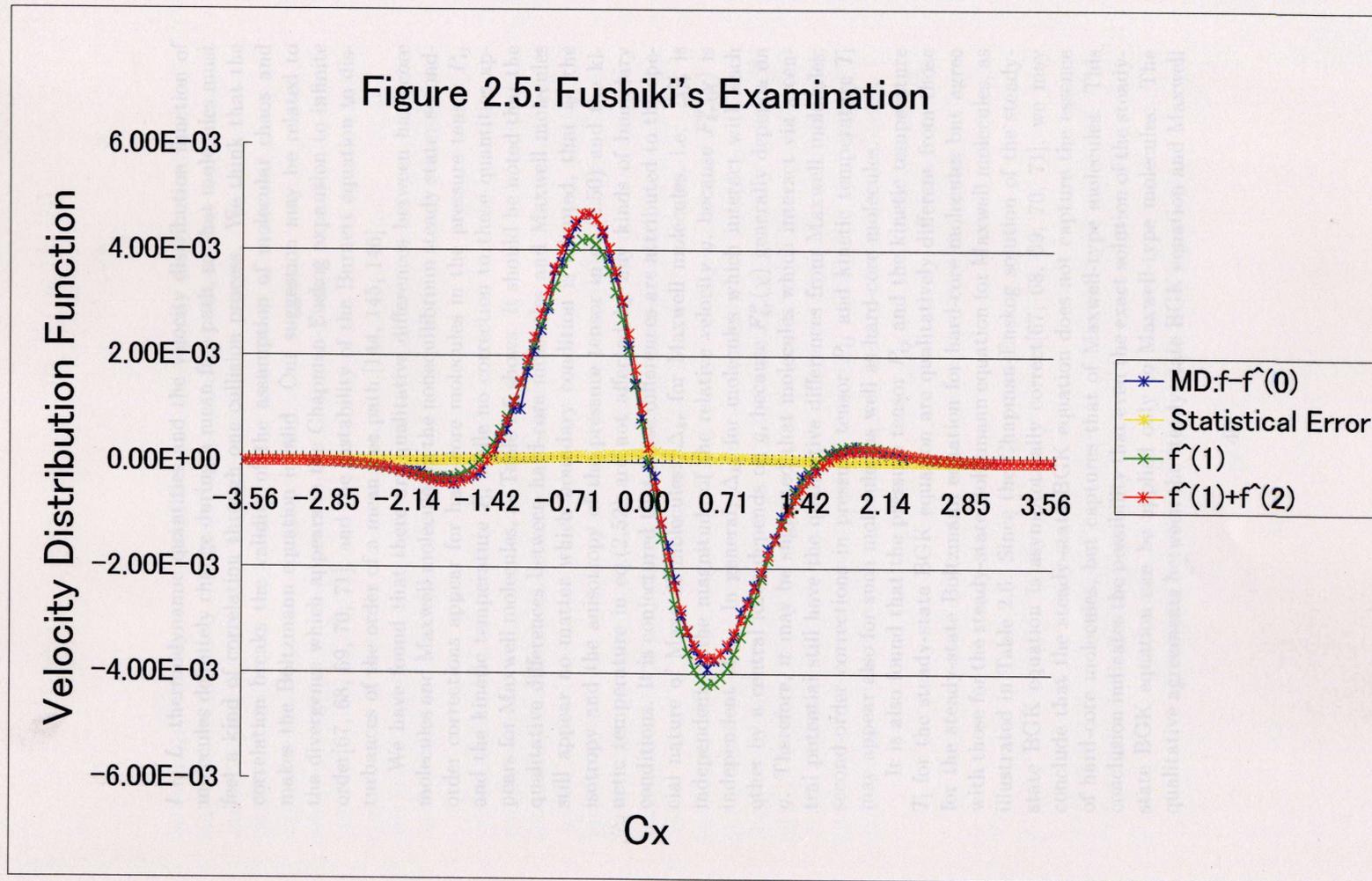


Fig. 3. Comparison of the scaled $\phi^{(2)}$ s for hard-core molecules with the scaled $\phi^{(2)}$ for Maxwell molecules. The dashed line, the dash-dotted line, the long-dashed line and the solid line correspond to the scaled $\phi^{(2)}$ s for hard-core molecules with 4th, 5th, 6th and 7th approximation b_{0r} s and b_{2r} s, respectively. The dotted line is the scaled $\phi^{(2)}$ for Maxwell molecules. Note that we put $c_y = c_z = 0$.

Comparison between the Burnett solution with MD



Results (3)

- This suggests that there are no universal properties as expected by SST or extended thermodynamics.
- Thermodynamic quantities exhibit qualitative differences among hard spheres, Maxwell molecules(=BGK model) and information theory.

TABLE III: The numerical constants for the macroscopic quantities: the precise values for information theory, the 7th Sonine approximation values for hard-core molecules and the exact values for Maxwell molecules.

	λ_P^{xx}	λ_P^{yy}	λ_{T_x}	λ_{T_y}	λ_S
information theory	$\frac{12}{25}$	$-\frac{6}{25}$	$\frac{6}{25}$	$-\frac{3}{25}$	$-\frac{1}{5}$
hard-core molecules	-4.600×10^{-2}	2.300×10^{-2}	-2.300×10^{-2}	1.150×10^{-2}	-2.035×10^{-1}
Maxwell molecules	0	0	0	0	$-\frac{1}{5}$

Thermodynamic quantities

- Pressure tensor

$$P_{ij} = n\kappa T \left[\delta_{ij} + \lambda_P^{ij} \frac{mJ_x^2}{n^2\kappa^3 T^3} \right],$$

- Kinetic temperature

$$\begin{aligned} \frac{n\kappa T_i}{2} &\equiv \left(\frac{2\kappa T}{m} \right)^{\frac{5}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dc \frac{mc_i^2}{2} f \\ &= \frac{n\kappa T}{2} \left[1 + \lambda_{T_i} \frac{mJ_x^2}{n^2\kappa^3 T^3} \right], \end{aligned}$$

- Shanon's entropy

$$\begin{aligned} S &\equiv -\kappa \left(\frac{2\kappa T}{m} \right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} dc f \log f \\ &= -n\kappa \log \left[n \left(\frac{m}{2\pi\kappa T} \right)^{\frac{3}{2}} \right] + \frac{3}{2} n\kappa + \lambda_S \frac{mJ_x^2}{n\kappa^2 T^3}. \end{aligned}$$

Application to chemical reaction

- From our result we can calculate chemical reaction rate under the heat conduction. Note that the Burnett order is essential for the calculation.
- In Present's model, the rate for chemical reaction is

$$R = \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{v}_1 \int d\Omega \int f f_1 g \sigma(g),$$

- Here the cross section is

$$\sigma(g) = \begin{cases} 0 & g < \sqrt{\frac{4E^*}{m}} \\ \frac{d^2}{4} \left(1 - \frac{4E^*}{mg^2}\right) & g \geq \sqrt{\frac{4E^*}{m}} \end{cases},$$

The result of calculation of reaction rate

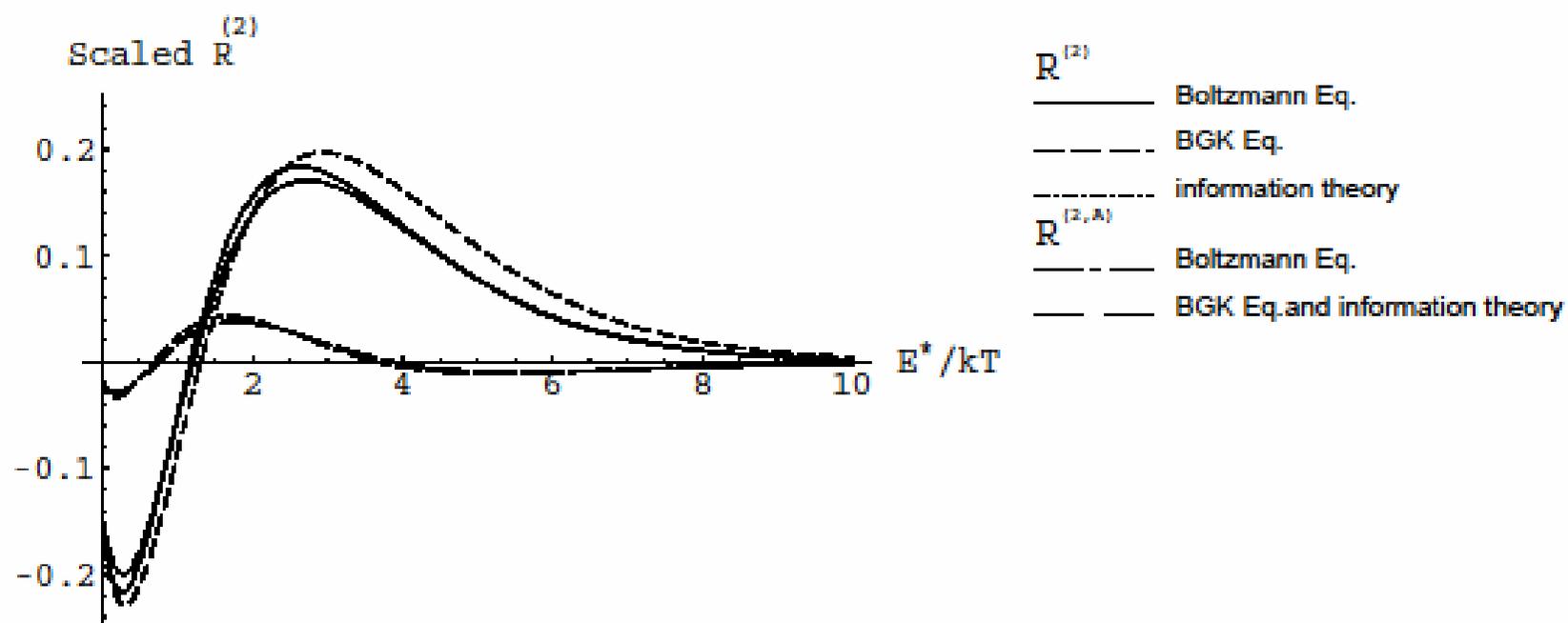
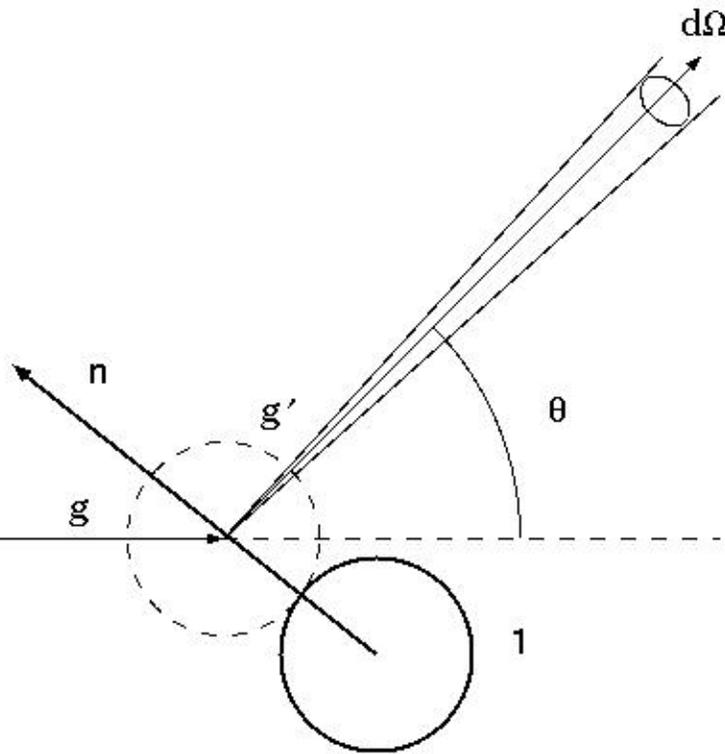


FIG. 1: Scaled $R^{(2)}$ compared to scaled $R^{(2,A)}$ as a function of E^*/kT for the line-of-centers model.

Summary and Discussion for III-B

- We have obtained a systematic perturbative solution of Boltzmann equation at Burnett order.
- The solution is useful for the test of extended thermodynamic argument or the calculation of chemical reaction.
- The effect of boundaries is crucial in this problem. (in progress)
- The correlation effects may not be negligible. We should check it.

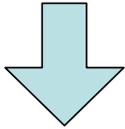
III-C. 非弾性衝突をする粒子系の統計力学



- 統計力学の基本は気体論
- 非弾性衝突をする気体はどのような統計則に従うか
- 統計的定常状態は保てないので外力で補う必要(空気中のサスペンション等)

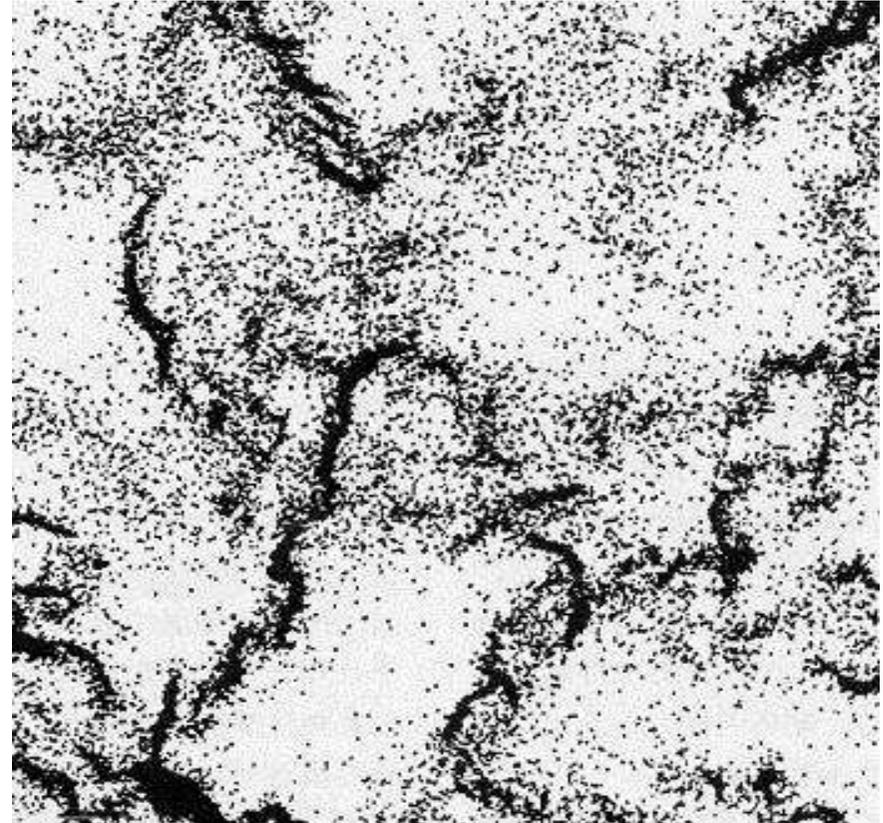
非弾性ガスの特徴

- 一様状態が不安定



構造形成

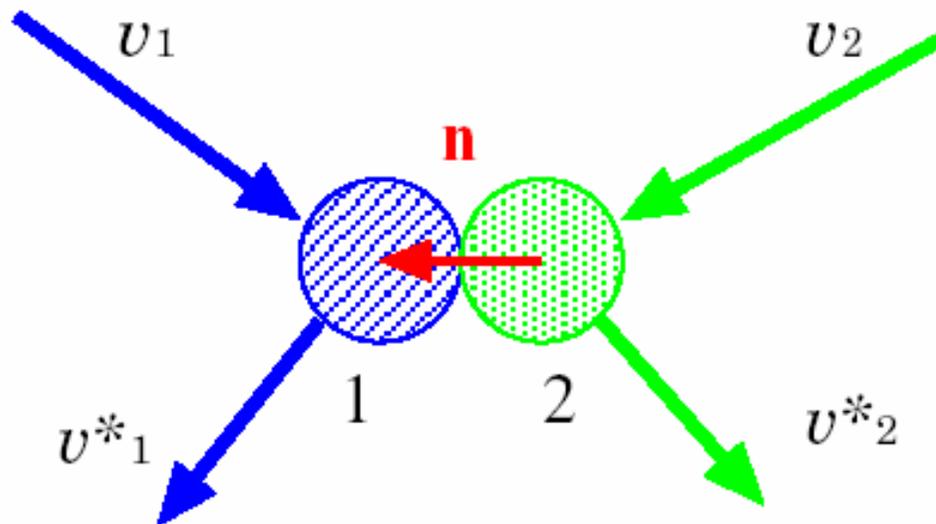
- 長距離相関がある
- エネルギー散逸によって運動状態が維持できない
- 容易に実験できない



Goldhrisch and Zannetti (1993)

非弾性衝突するガス

$$v_{12,n}^* = -ev_{12,n}, \quad (0 < e \leq 1, \text{ : 反発係数})$$



- エネルギーを失う。
- 速度の方向が揃ってくる。

したがってshear modeはつねに不安定 (河原(九大理))

Haff's law

系の(運動)エネルギー。

$$E(t) \equiv \frac{1}{N} \sum_i^N \frac{m\mathbf{v}_i^2}{2} = \frac{d}{2} T(t)$$

衝突回数が小さいうちは、エネルギーはHaffの法則に従う。

$$\frac{dE}{dt}(t) = -2\omega\gamma E(t) \Leftrightarrow E(t) = E_0 e^{-2\gamma_0\tau}$$

$\gamma_0 \equiv (1 - e^2)/2d$: 一様冷却の減衰率

τ : 1粒子当たりの平均衝突回数, ($d\tau = \omega(t)dt$)

Chapman-Enskog method for inelastic gases

摂動のゼロ次解は

$$\partial_t^{(0)} f^{(0)} = J[f^{(0)}, f^{(0)}]. \quad (3.23)$$

で決まる. ここで通常次のスケールリングを仮定する:

$$f^{(0)} = v_0(t)^{-3} \bar{f}(\mathbf{V}/v_0(t)), \quad v_0(t) \equiv \sqrt{\frac{2T}{m}} \quad (3.24)$$

この仮定は粉体温度の冷却はあるがそれでスケールすると分布関数は変わらないという事を期待している. 従って $f^{(0)}$ を求める偏微分方程式 (3.23) は $\bar{f}(\mathbf{c})$ を求める常微分方程式に帰着できる. ハードコア系では (3.23), (3.24) 式は解けないが収束の早い関数列で展開した近似解を用いることが多い. またゼロ次で圧力テンソルと熱流はそれぞれ $P_{ij}^{(0)} = p\delta_{ij}$, $\mathbf{q}^{(0)} = \mathbf{0}$ と決まり, ζ も同様に計算できる. その結果前節で述べた様に温度は外力がなければ

$$T^{-1} \partial_t^{(0)} T = -\zeta^{(0)} \quad (3.25)$$

にしたがって緩和する. このことから $\zeta^{(0)} = 2\gamma_0\omega$ であることが分かる.

摂動の1次解は

$$\begin{aligned} (\partial_t^{(0)} + L)f^{(1)} &= f^{(0)}(\nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{V} \cdot \nabla \ln n) + (\partial_T f^{(0)}) \left(\frac{2T}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} - \mathbf{V} \cdot \nabla T \right) \\ &+ \left(\frac{\partial}{\partial V_i} f^{(0)} \right) [-(mn)^{-1} \nabla_i p + \mathbf{V} \cdot \nabla u_i]. \end{aligned} \quad (3.26)$$

続き

から決まる. 但し線形演算子 L は

$$L f^{(1)} = -J[f^{(0)}, f^{(1)}] - J[f^{(1)}, f^{(0)}]. \quad (3.27)$$

で決まる. このとき解の形を

$$f^{(1)} = \bar{\mathbf{A}}(\mathbf{V}) \cdot \nabla \ln T + \bar{\mathbf{B}}(\mathbf{V}) \cdot \nabla \ln n + \bar{C}_{ij}(\mathbf{V}) \nabla_i u_j. \quad (3.28)$$

と仮定し, (3.26) 式を

$$(\partial_t^{(0)} + L) f^{(1)} = \mathbf{A} \cdot \nabla \ln T + \mathbf{B} \cdot \nabla \ln n + C_{ij} \nabla_j u_i. \quad (3.29)$$

と書けば各係数間, 例えば $\bar{\mathbf{A}}$ と \mathbf{A} の関係を求めればよい問題に帰着する. そうすることで圧力テンソルと熱流の1次の表式

$$P_{ij}^{(1)} = -\eta(\nabla_i u_j + \nabla_j u_i - \frac{2}{3} \delta_{ij} \nabla \cdot \mathbf{u}) \quad (3.30)$$

$$\mathbf{q}^{(1)} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n, \quad (3.31)$$

に現われる粘性率 η , 熱伝導率 κ 及び新たに現われた輸送係数 μ を決める事が出来る. 勿論 μ は $e \rightarrow 1$ でゼロになる量である. また同じ計算を更に高次に進める事で一様状態の安定性も議論することができる.

Evaluation of transport coefficients

$$\eta^*(\alpha) \equiv \frac{\eta(\alpha)}{\eta_0} = \left[\nu_{\eta}^*(\alpha) - \frac{1}{2} \zeta^*(\alpha) \right]^{-1},$$

$$\zeta^*(\alpha) = \frac{5}{12} (1 - \alpha^2) \left[1 + \frac{3}{32} c^*(\alpha) \right],$$

$$\kappa^*(\alpha) \equiv \frac{\kappa(\alpha)}{\kappa_0} = \frac{2}{3} \left[\nu_{\kappa}^*(\alpha) - 2 \zeta^*(\alpha) \right]^{-1} [1 + c^*(\alpha)],$$

$$c^*(\alpha) = \frac{32(1 - \alpha)(1 - 2\alpha^2)}{81 - 17\alpha + 30\alpha^2(1 - \alpha)},$$

$$\mu^*(\alpha) \equiv \frac{n}{T \kappa_0} \mu(\alpha)$$

$$\nu_{\eta}^*(\alpha) = \left[1 - \frac{1}{4} (1 - \alpha)^2 \right] \left[1 - \frac{1}{64} c^*(\alpha) \right],$$

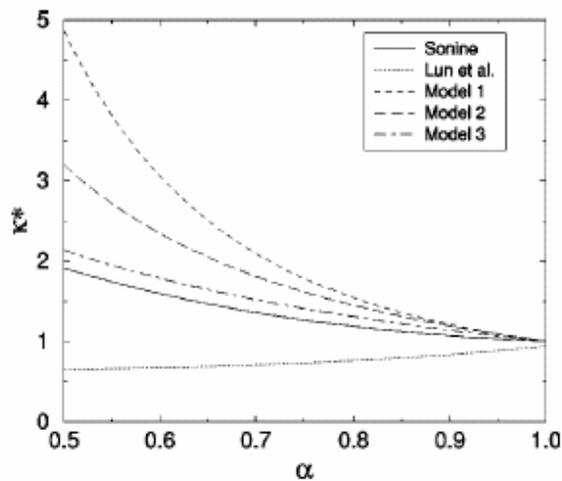
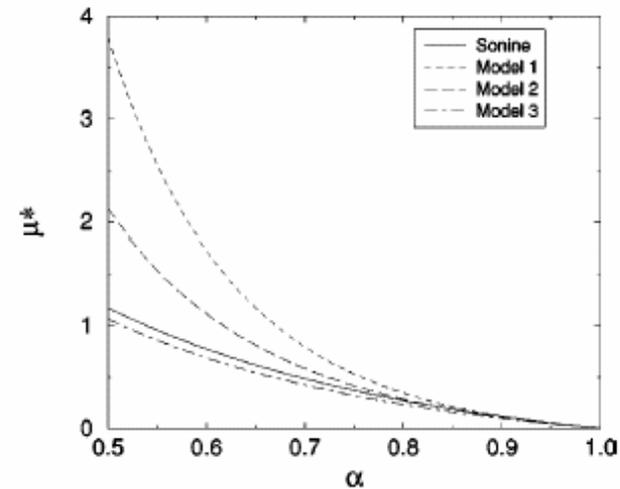
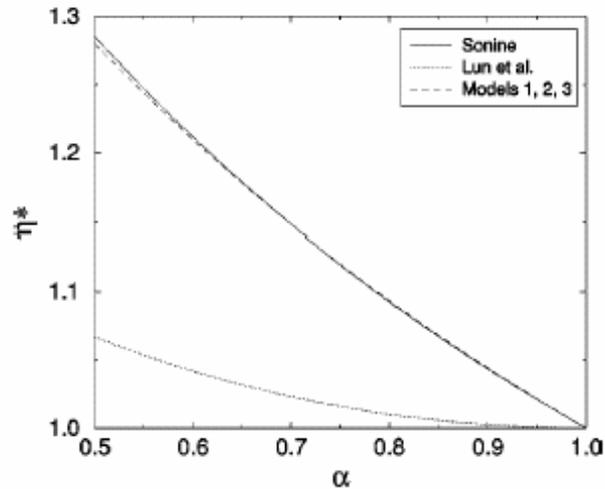
$$= 2 \zeta^*(\alpha) \left[\kappa^*(\alpha) + \frac{1}{3} \frac{c^*(\alpha)}{\zeta^*(\alpha)} \right]$$

$$\nu_{\kappa}^*(\alpha) = \nu_{\mu}^*(\alpha) = \frac{1}{3} (1 + \alpha)$$

$$\times \left[1 + \frac{33}{16} (1 - \alpha) + \frac{19 - 3\alpha}{1024} c^*(\alpha) \right].$$

$$\times [2 \nu_{\mu}^*(\alpha) - 3 \zeta^*(\alpha)]^{-1}.$$

輸送係数の計算結果(はねかえり係数依存性)



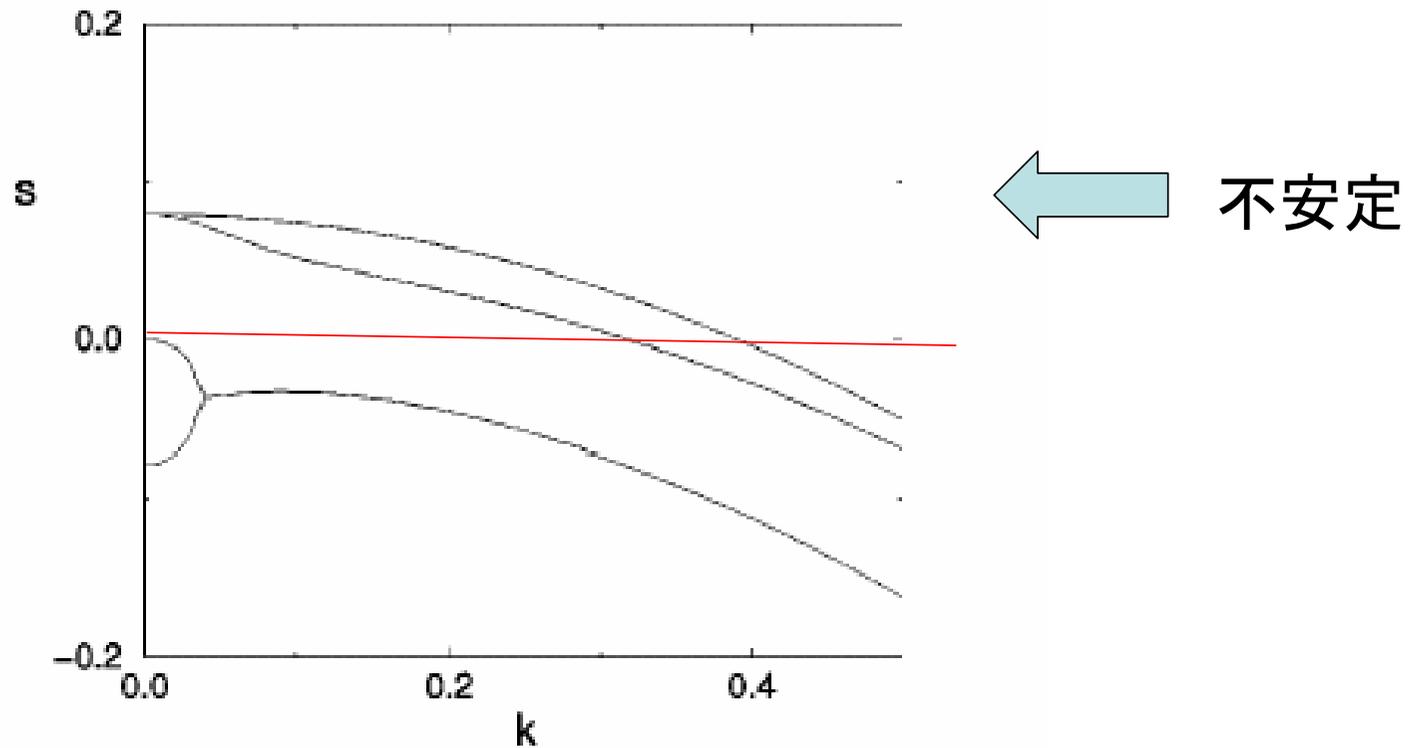
The results are quantitatively accurate.

The result is inconsistent with the prediction by Green-Kubo formula!

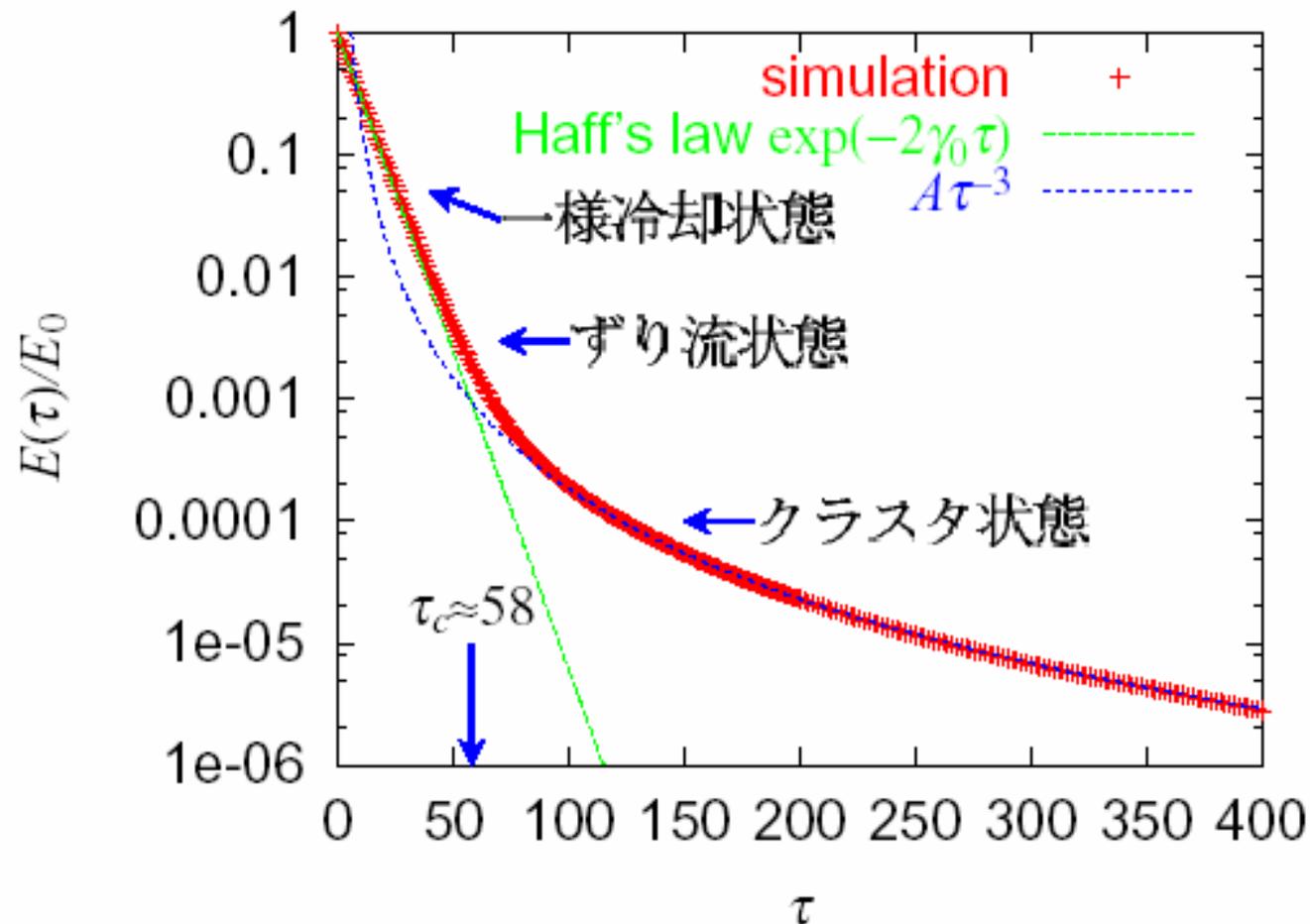
Green-Kubo formula can be used only elastic case.

The linear stability analysis for uniform state

- As suggested the shear mode is always unstable.
- Other three modes are degenerated but one of three is unstable,



Beyond Haff's law



$N = 1 \times 10^6, e = 0.80, n = N/V = 0.40, \sigma = 1$ 、直線はHaffの一様冷却則。長時間での振舞いとこの交点より $\tau_c \approx 58$ 。

(河原(九大理)の3次元シミュレーションより)

Many Body Effects in Granular Gases

- Correlation effects are always important in granular gases, because uniform states are unstable.
- Intrinsic long-range correlation plays important roles.
- The velocity correlation function is defined by

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V} \int d^d \mathbf{r}' \langle u_{\alpha}(\mathbf{r} + \mathbf{r}', t) u_{\beta}(\mathbf{r}', t) \rangle$$

そのために上記の $G_{\alpha\beta}$ 及びそのフーリエ変換 $S_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t)$ を

$$\begin{aligned} G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, t) &= \hat{r}_{\alpha} \hat{r}_{\beta} G_{\parallel}(r, t) + (\delta_{\alpha\beta} - \hat{r}_{\alpha} \hat{r}_{\beta}) G_{\perp}(r, t), \\ S_{\alpha\beta}(\mathbf{k}, t) &= \hat{k}_{\alpha} \hat{k}_{\beta} S_{\parallel}(k, t) + (\delta_{\alpha\beta} - \hat{k}_{\alpha} \hat{k}_{\beta}) S_{\perp}(k, t) \end{aligned} \quad (3.33)$$

と書く. ここで \hat{k}_{α} , \hat{r}_{α} は \mathbf{k} , \mathbf{r} の方向の単位ベクトルの α 成分を表す. また (3.33) 式の添字 \parallel , \perp はそれぞれ縦方向 (圧縮に対する) 相関, 横方向 (ずりに対する) 相関を表す. また次元解析から相関長 ξ を $\xi \equiv \sqrt{\nu/\omega\gamma_0}$ で導入できる. 但し $\nu = \eta/\rho$ は動粘性率である. ここで $\gamma_0 \propto 1 - e^2$ から ξ は $e \rightarrow 1$ で発散することに注意して欲しい. $e \rightarrow 1$ の極限で相関が発散することは注目に値する.

BBGKY hierarchy

ここで N -体分布関数を $\rho(\Gamma, t) = \rho(x_1, x_2, \dots, x_N, t)$ としよう. 但し $x_i = \{\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i\}$ である. この ρ の従うリウービル (Liouville) 方程式を

$$[\partial_t + \mathcal{L}^{(0)}(\Gamma)]\rho(\Gamma, t) = \sum_{i < j} T(ij)\rho(\Gamma, t) \quad (3.34)$$

と書く. ここで $\mathcal{L}^0_i = \mathbf{v}_i \cdot \nabla$, $\mathcal{L}^{(0)} = \sum_{i=1}^N \mathcal{L}^0_i$ で $T(ij)$ は 2 体衝突オペレーターである. s -粒子分布関数を $f_{12\dots s} \equiv \frac{N!}{(N-s)!} \int dx_s \dots dx_N \rho(\Gamma, t)$ とすると s -体分布関数は次のような BBGKY ヒエラルキー²³を構成する:

$$\begin{aligned} (\partial_t + \mathcal{L}^0_1)f_1 &= \int dx_2 T(12)f_{12} \\ (\partial_t + \mathcal{L}^0_1 + \mathcal{L}^0_2 - T(12))f_{12} &= \int dx_3 [T(13) + T(23)]f_{123} \end{aligned} \quad (3.35)$$

ここでは 2 体分布関数で話を終えたが 1 体分布には 2 体分布の情報が必要で, 2 体分布には 3 体分布の情報が必要となるのでいつまでも閉じた形の相関関数が得られない多体問題ではお馴染みの方程式系である.

Long range correlation

$S_{\perp}(k, t)$ が

$$S_{\perp}(k, t) = \frac{T}{mn} \left\{ 1 + \frac{\exp[2\gamma_0\tau(1 - k^2\xi_{\perp}^2)] - 1}{1 - k^2\xi_{\perp}^2} \right\} \quad (3.36)$$

となる. ここで τ は1粒子当たりの平均衝突回数で測った時間である. また ξ_{\perp} は横方向の速度相関長であり動粘性率 $\nu = \eta/\rho$ を用いて $\xi_{\perp} \sim \xi = \sqrt{\nu/\omega\gamma_0}$ で見積もられる.²⁵ この(3.36)式の逆フーリエ変換をすると

$$G_{\perp}(r) \sim r^{-3} \quad (3.37)$$

という長距離相関が生じる. この長距離相関は $e \neq 1$ で現われる非平衡系に特徴的なものである. 因みに2次元系では(3.36)式には変更はないが(3.37)式のべきの指数は-2となる. また $G_{\parallel}(r)$ も $G_{\perp}(r)$ から計算可能であり同様の長距離相関を持つ. 図3.2に示す通り理論とシミュレーションの結果は非常に良い.

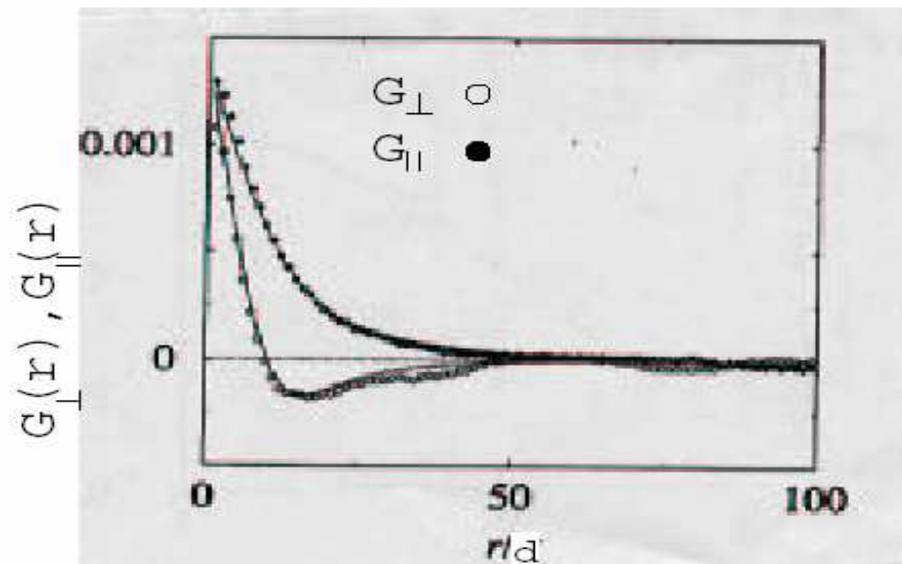
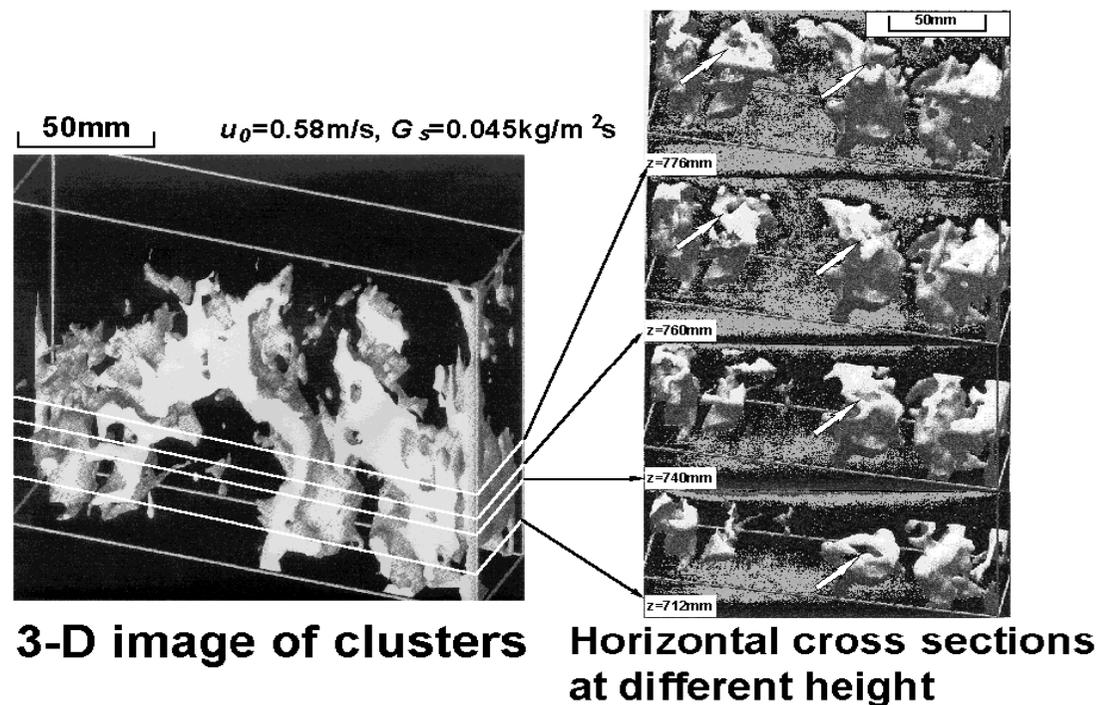


図 3.2: 2次元の理論(実線)とシミュレーション(データ)による相関関数 $G_{\perp}(r)$ (白抜きで示したデータ)と $G_{\parallel}(r)$ を T/m のユニットで表現したもの. パラメータは $e = 0.9$, 及び面積占有率は0.4である. [20]

Driven Granular Gases by Heat Bath

- 熱浴で励起された非弾性ガス ← サスペンションの簡単なモデルであり定常化する
- 高速流動層として応用上も重要（非弾性衝突＋流体）



Model and framework

- We start from the inelastic Boltzmann equation

$$(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) f = J[f, f] + \underline{L_{FP}} f,$$

where $J[f, f]$ is

$$J[f, h] = \sigma^{d-1} \int d\hat{\sigma} \int d\mathbf{v}_1 \Theta(\mathbf{g} \cdot \hat{\sigma}) \mathbf{g} \cdot \hat{\sigma} \\ \times (e^{-2b^{-1}} - 1) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) h(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t)$$

$\mathbf{g} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_1$ is the relative velocity and

$$b^{-1} \mathbf{g} = \mathbf{g} - \frac{1+e}{e} (\mathbf{g} \cdot \hat{\sigma}) \hat{\sigma},$$

where e is the restitution constant.

The Fokker-Planck operator L_{FP} is defined through

$$L_{FP} = \gamma_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot [\mathbf{V} + \frac{T_B}{m} \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}}],$$

where the first and the second terms represent friction and the activation.

Hydrodynamic variables are ($\mathbf{V} = \mathbf{v} - \mathbf{u}$)

$$n(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t),$$

$$n(\mathbf{r}, t) \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \mathbf{v} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t),$$

$$\frac{d}{2} n(\mathbf{r}, t) T(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{v} \frac{1}{2} m \mathbf{V}^2 f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t),$$

The loss of energy in each collision is

$$\Delta E = -\frac{1 - e^2}{4} m (\mathbf{g} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2,$$

Thus, the macroscopic loss of the energy appears as

$$\int d\mathbf{v} \frac{1}{2} m V^2 J(f, f) = -\frac{nd}{2} T \zeta[f, f]$$

The balance equations for hydrodynamic variables are

$$D_t n + n \nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

$$D_t u_i + (mn)^{-1} \nabla_j P_{ij} = 0,$$

$$\begin{aligned} D_t T + \frac{2}{dn} (P_{ij} \nabla_j u_i + \nabla \cdot \mathbf{q}) + T \zeta \\ = 2\gamma_0 (T_B - T), \end{aligned}$$

where $P_{\{ij\}}$ and \mathbf{q} are the pressure tensor and heat flux, respectively.

Homogeneous States

- The basic solution is that for homogeneous state. We assume

$$f(\mathbf{v}, t) = nv_0(t)^{-d} \tilde{f}(\mathbf{c}, \tau), \quad \mathbf{c} = \mathbf{V}/v_0(t)$$

with $d\tau = \omega_E dt$ and $v_0(t) = \sqrt{2T/m}$.

Here ω_E is Enskog's collision frequency given by

$$\omega_E = \frac{d+2}{4} \nu_0 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \Omega_d n \sigma^{d-1} v_0.$$

The scaling form of the inelastic Boltzmann equation is given by

$$\begin{aligned} \frac{\Omega_d}{\sqrt{2\pi}} \partial_\tau \tilde{f}(\mathbf{c}, \tau) &= \tilde{J}[\tilde{f}, \tilde{f}] + \left(\frac{\hat{\gamma}}{\theta} - \frac{\mu_2}{d} \right) \frac{\partial}{\partial \mathbf{c}} \cdot (\mathbf{c} \tilde{f}(\mathbf{c}, \tau)) \\ &+ \frac{\hat{\gamma}}{2\theta} \frac{\partial^2}{\partial c^2} \tilde{f}(\mathbf{c}, \tau) \end{aligned} \quad (28)$$

where $\theta \equiv T/T_B$. Here we note the distribution function and

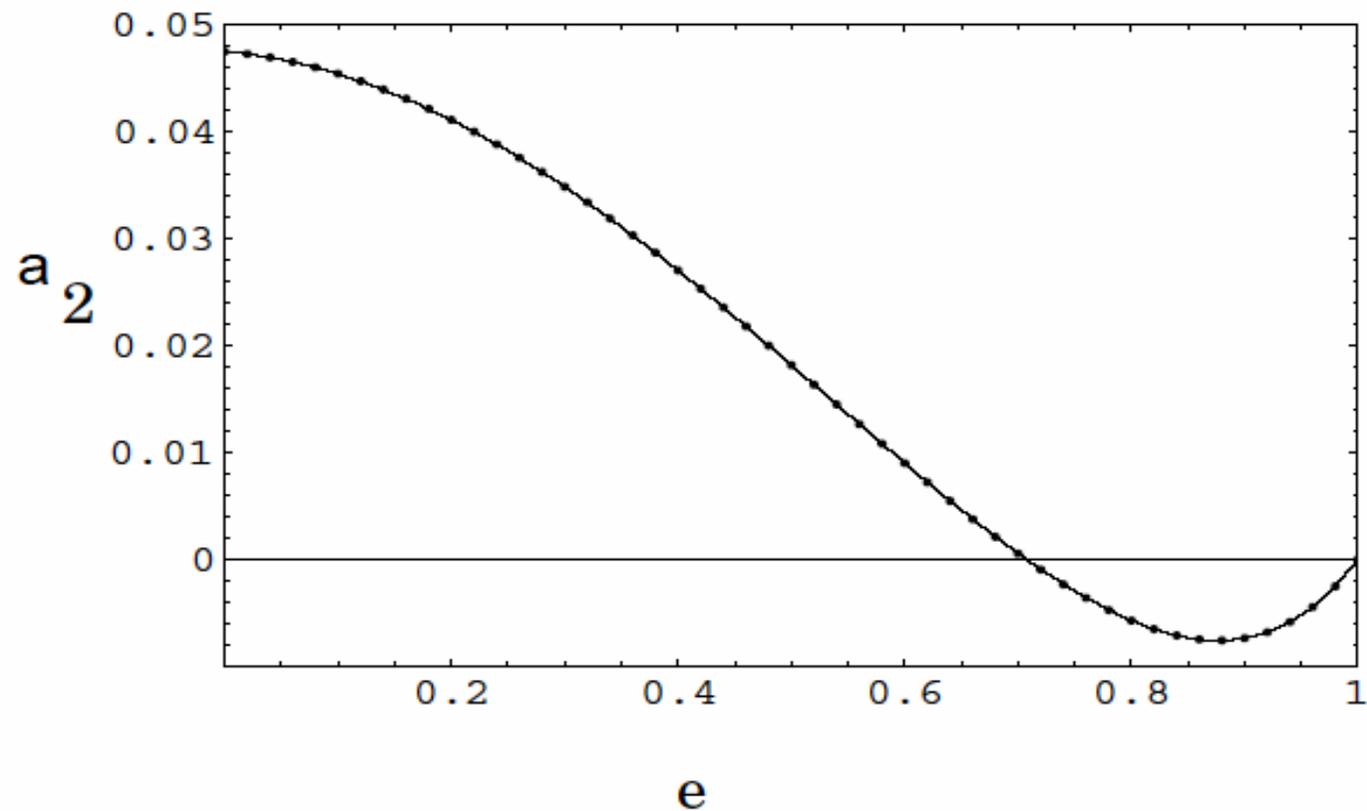
$$\mu_k \equiv - \int d\mathbf{c} c^k J[\tilde{f}, \tilde{f}]$$

are the function of

$$a_2 \equiv \frac{d}{d+2} \frac{\langle V^4 \rangle}{\langle V^2 \rangle^2} - 1 \quad \langle V^k \rangle \equiv \frac{1}{n} \int d\mathbf{V} V^k f(\mathbf{V}, t)$$

a_2 and θ can be obtained as the functions of time and e .

The steady value of a_2 is plotted as a function of e .



Transport coefficients

The transport coefficients such as viscosity and heat conductivity are introduced as

$$P_{ij}^{(1)} = -\eta \Delta_{ijkl} \nabla_k u_l \quad \mathbf{q}^{(1)} = -\kappa \nabla T - \mu \nabla n,$$

where $\Delta_{ijkl} \equiv \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} - \frac{2}{d} \delta_{ij} \delta_{kl}$.

These are obtainable. For example, the viscosity is given by

$$\eta^* \equiv \frac{\eta}{\eta_0} = \frac{2\gamma^* + 1}{\gamma^*(1 + \theta^{-1}) + \nu_{\eta}^* - \zeta^*/2}$$

where $\gamma^* = \gamma/\nu_0$, $\nu_{\eta}^* = \nu/\nu_0$ and $\zeta^* = \zeta/\nu_0$. $\eta_0(\hat{\gamma})$

Is the viscosity of $e=1$.

Results (1)

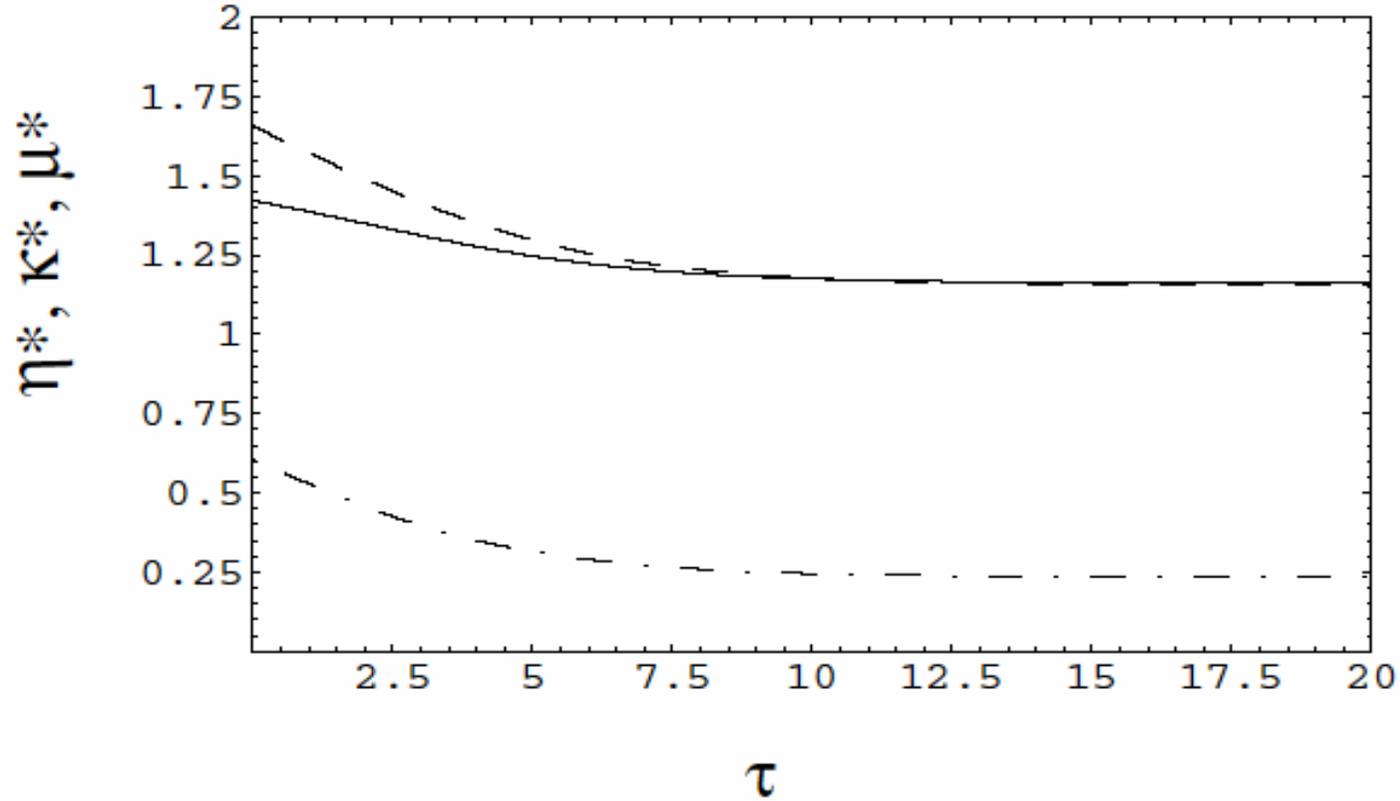


FIG. 2: The time evolution of η^* (solid line), κ^* (dashed line) and μ^* (dot-dashed line) for $e = 0.9$, $d = 3$, $\hat{\gamma} = 0.1$ and $\theta(0) = 2$.

Results (2)

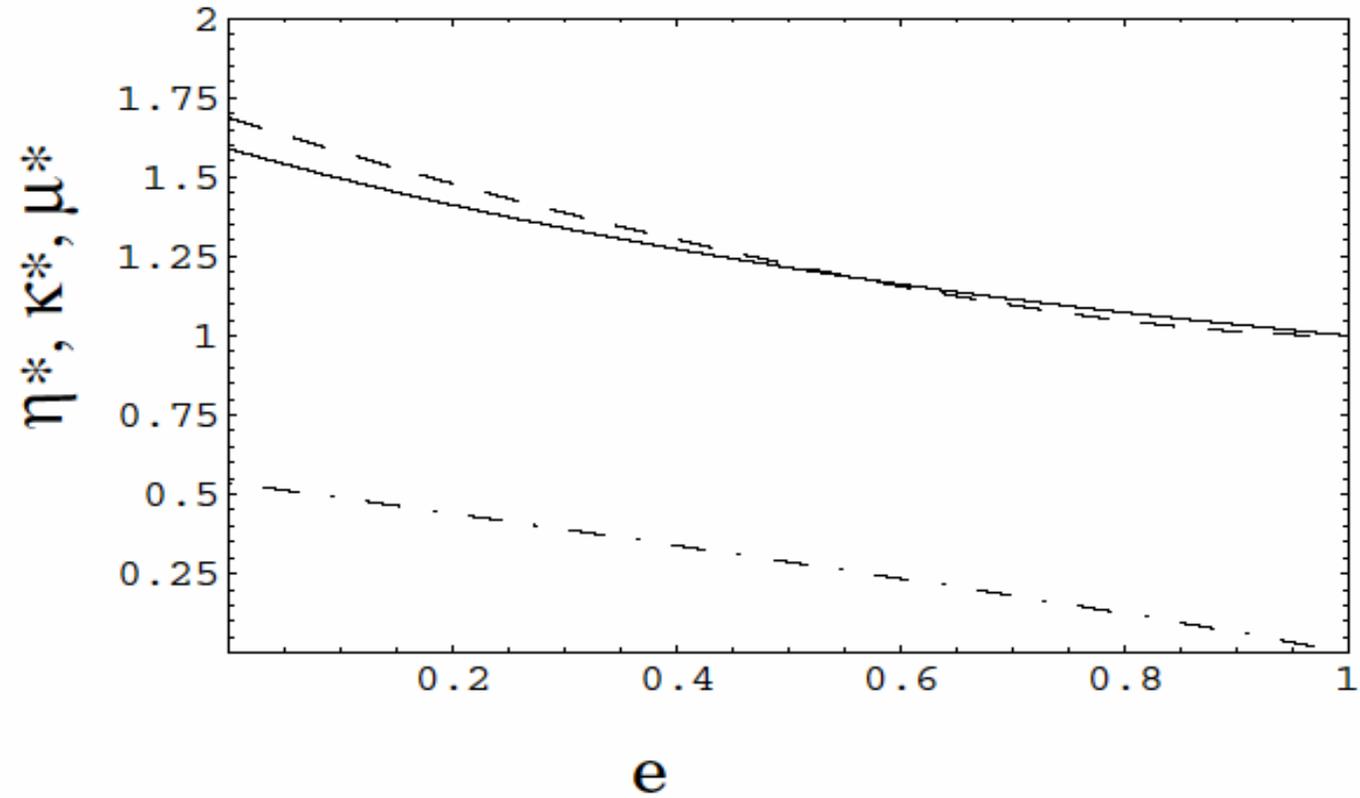
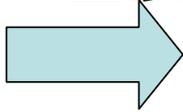
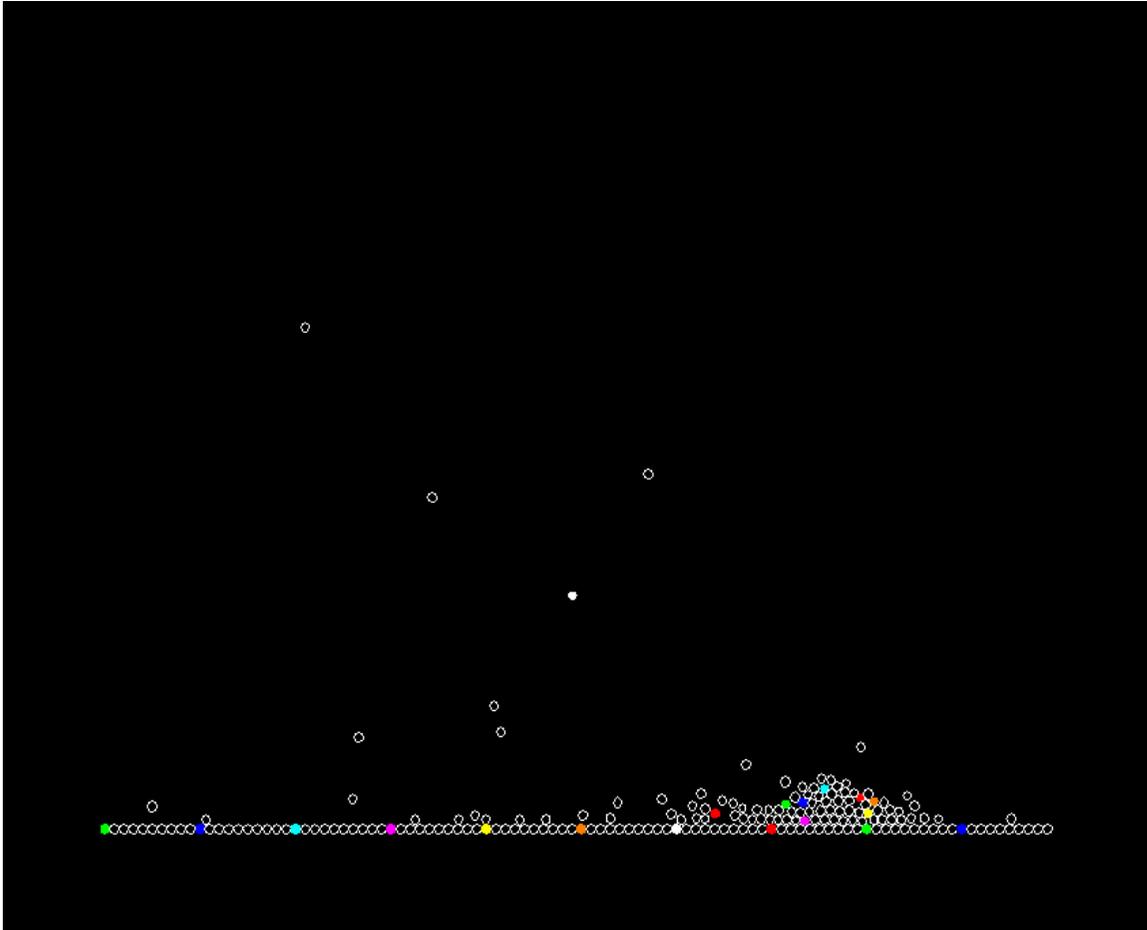


FIG. 3: The steady values of η^* (solid line), κ^* (dashed line) and μ^* (dot-dashed line) for $e = 0.9$, $d = 3$, $\hat{\gamma} = 0.1$.

一様状態の線形安定性(in progress)

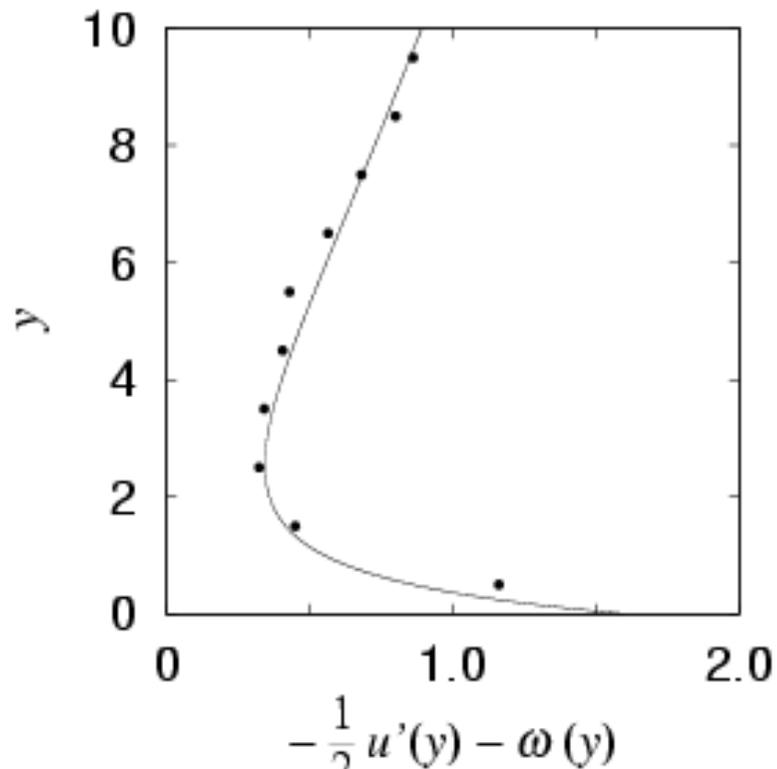
- 弱い熱浴: usual instabilities
- 中位の熱浴
 - shear modeは低波長側で常に不安定($e < 1$)
 - 残りの温度、圧縮、密度モードは熱浴の導入で安定化し得る。  渦の発生のみ
- 強い熱浴
 - 安定化
- 定量的評価はまだやっていない。
- 相関効果を論じる必然性がある。(in progress)

Application of granular gas kinetic theory for flow on a slope or in a pipe



- Collisional granular flow is similar to granular gases.
- In the vicinity of the boundary, rotation of particles is excited,
- This flow can be characterized by micropolar fluid mechanics.

Validity of micropolar gas-kinetic theory



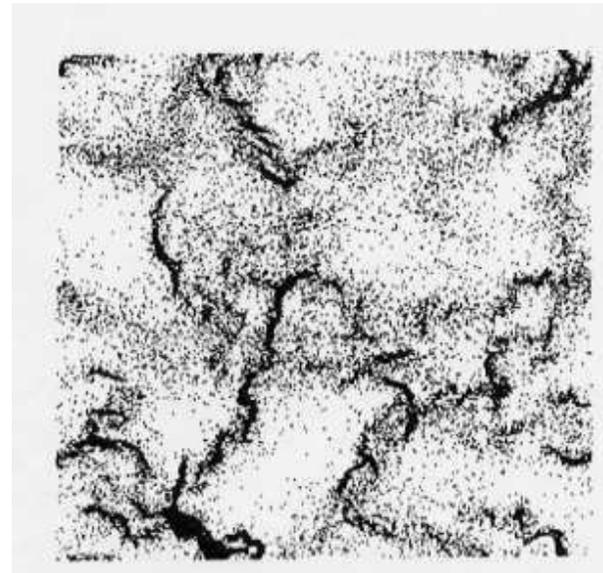
- Figure shows comparison between MD simulation and analytic expression of micropolar fluid mechanics for intrinsic spin field.
- Agreement is almost perfect.
- Unfortunately, the effect of spins to translational velocity is not large.
- See, N.Mitarai, HH and H. Nakanishi, PRL 88, 174301 (2002).

III – D. Experimental Accessible Granular Gases and its Statistical Mechanics (with A. Kawarada)

- Motivation
- Purpose
- Simulation setup
- Simulation Result and Analysis
- Discussion
- Conclusion

Motivation

- Granular gas is easiest model of granules.
- There are many researches by theoretical and numerical methods.
- Most of systems cannot be regarded as idealistic granular gases.



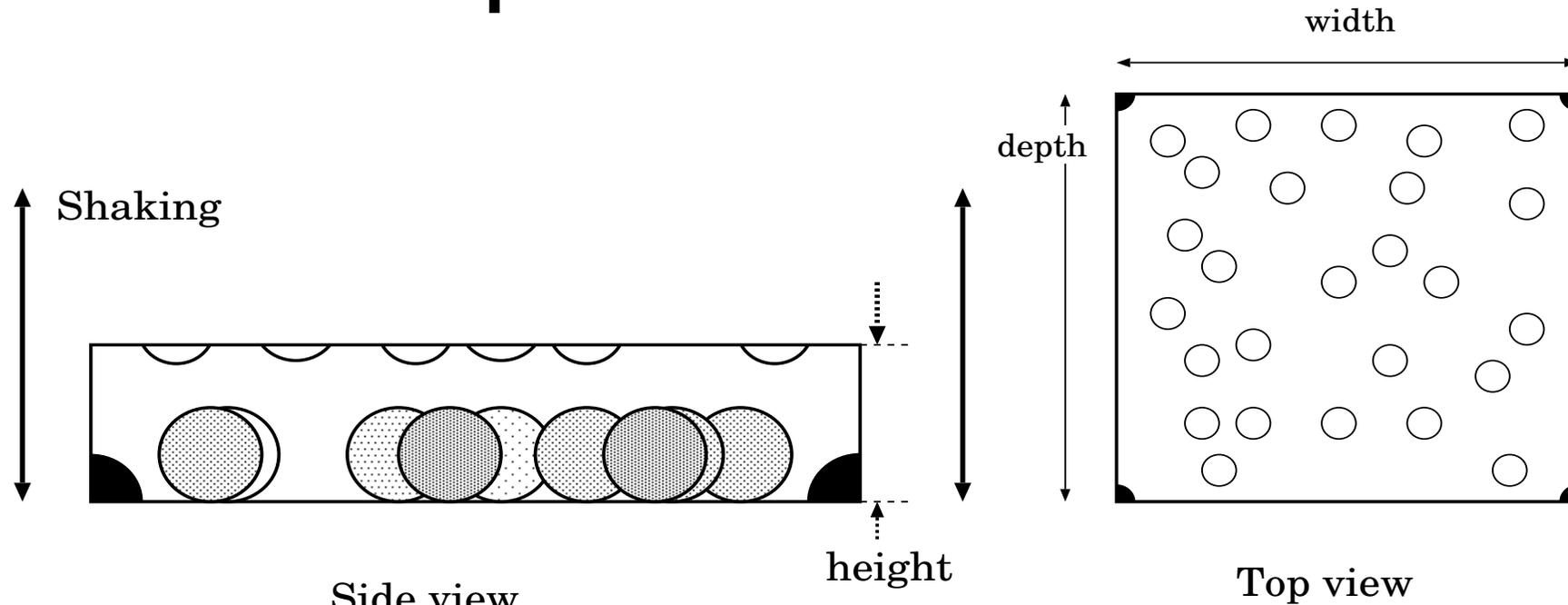
Clustering of granular gases

I.Goldhirsch and G.Zanetti, Phys. Rev.Lett.
70,1619(1993)

Purpose

- We propose an experimental accessible system of granular gases.
- We find characteristic behavior of velocity distribution function (VDF) in such systems.
- We make a theory for the system.
- Parts of the contents in this section has been accepted for publication in J. Phys. Soc.Jpn. (cond-mat/0404633)

Setup of our Simulation



Side view

Top view

Fixed spherical particles (scatters): 3500, 10500, 35000

Free spherical particles : 1000, 3000, 10000

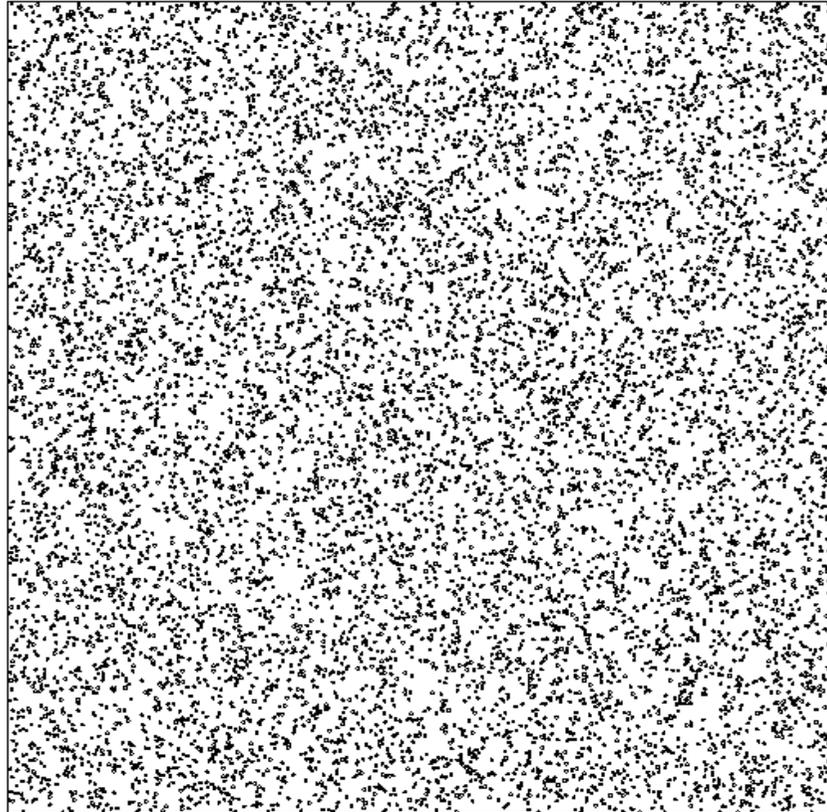
Container size : height = $1.8d$, width = depth = $110d$, $198.1d$, $330d$ [d: diameter of particle]

Area fraction : 0.06 **Volume fraction** 0.02

Amplitude: $1.2d$, **Frequency:** $0.5\sqrt{g/d}$, **Acceleration amplitude:** 11.5

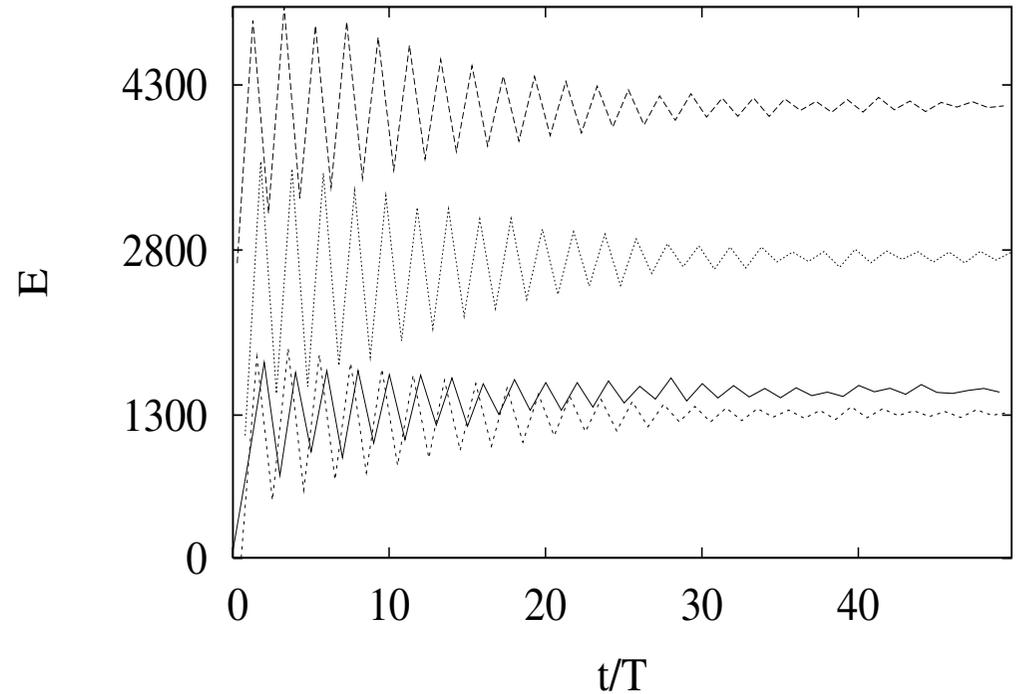
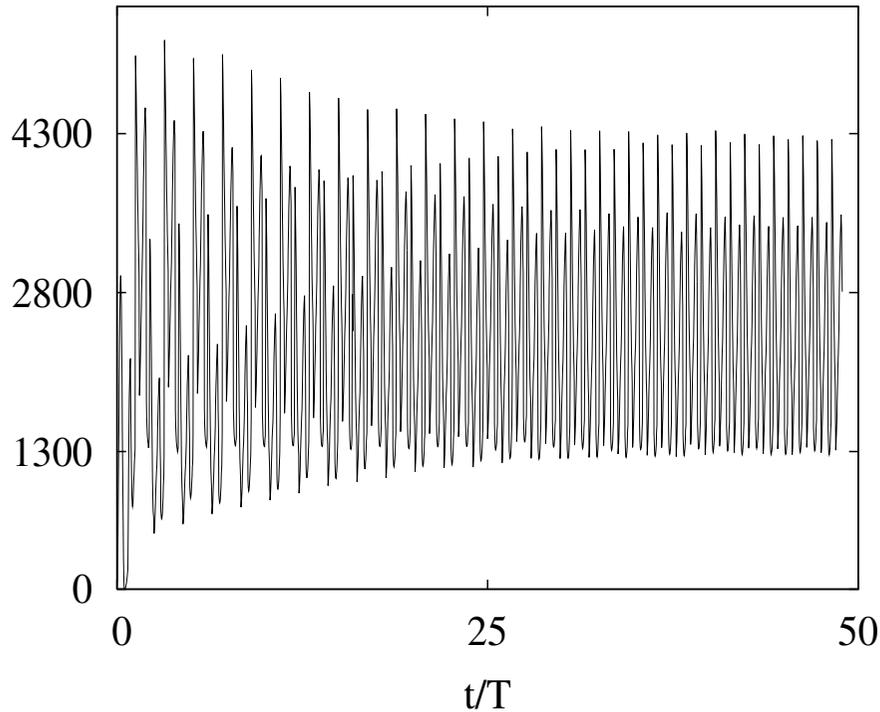
Quasi-two dimension

Simulation Result and Analysis



step= 1000.
step= shaking

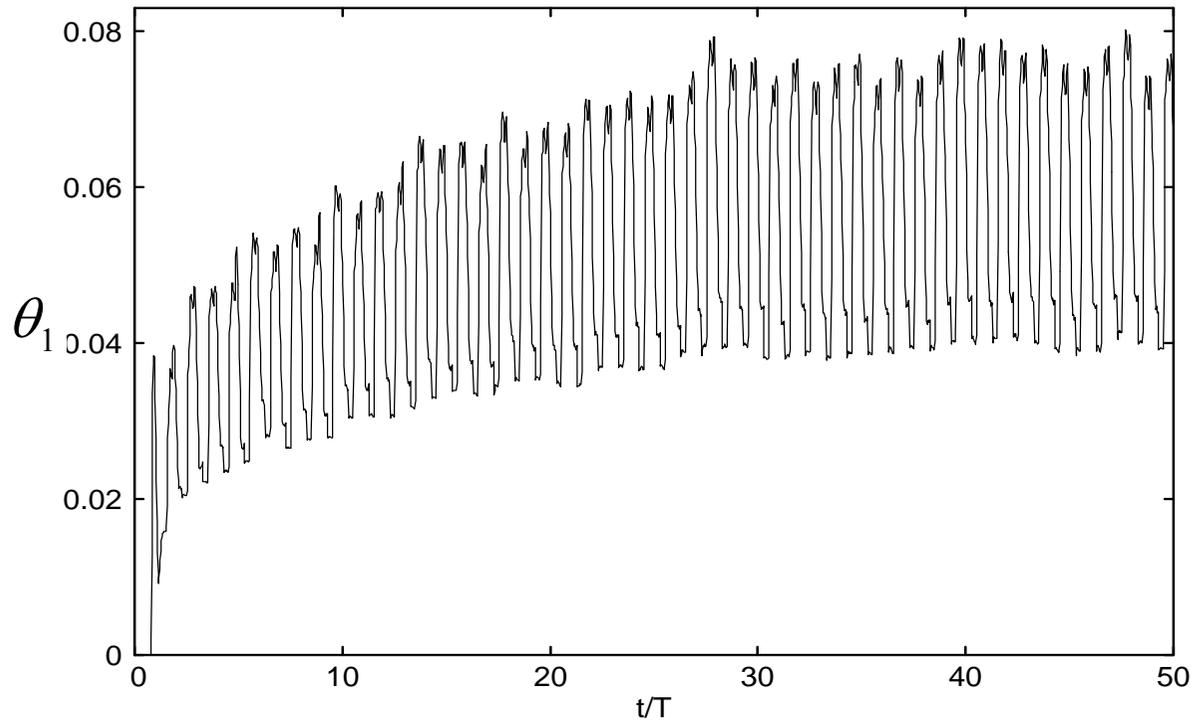
Energy



(a) ——— (b) - - - - - (c) ····· (d) - ·····

The system reaches a statistical **“steady state”** after about 25 cycles of the oscillation.

Granular temperature

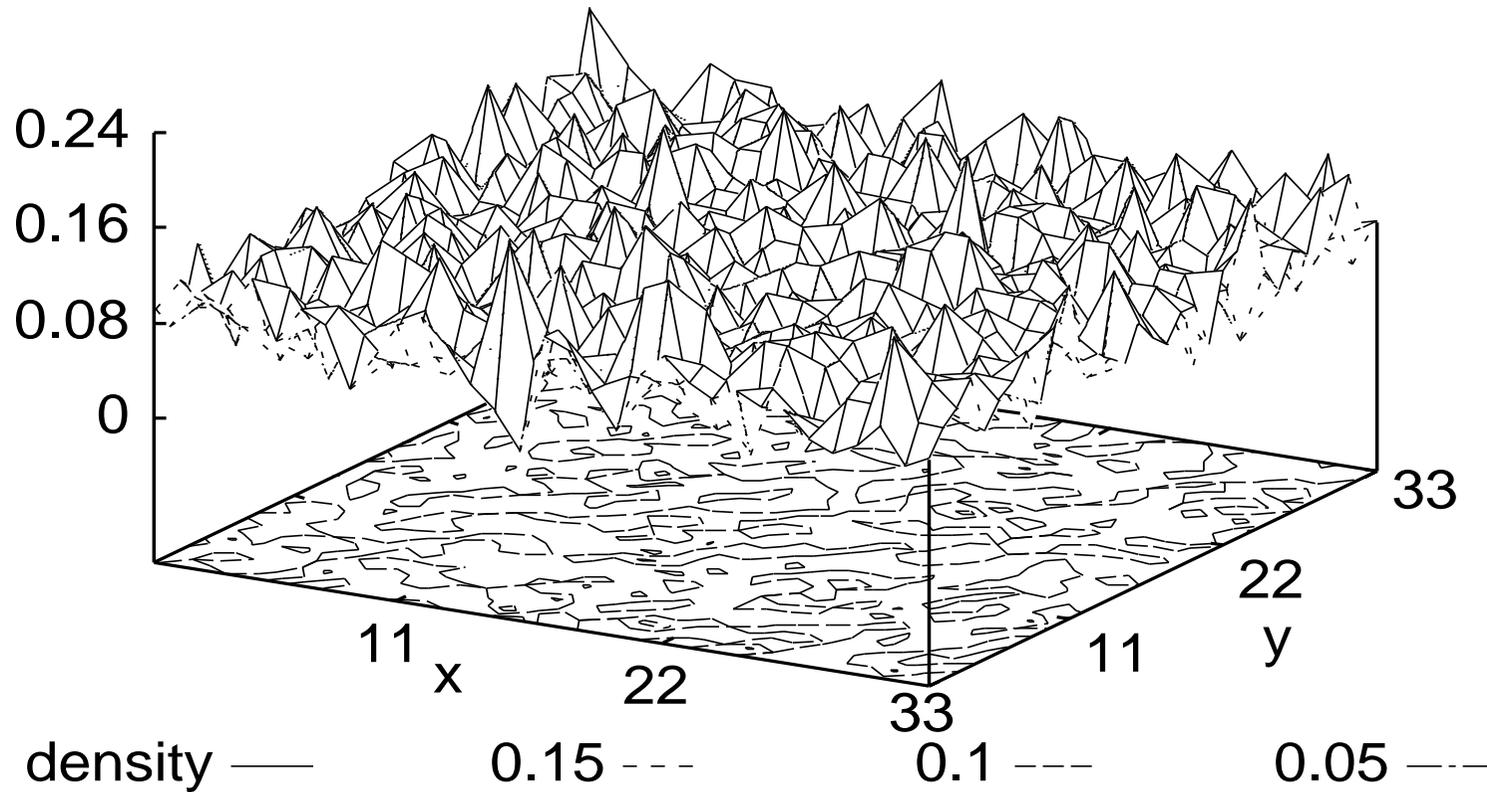


$$\theta_d = \frac{1}{dN} \sum_{i=1}^N m (V_i(t) - V_0(t))^2$$

$$V_0(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_i(t)$$

The velocity fluctuation reaches the statistical
“steady state” .

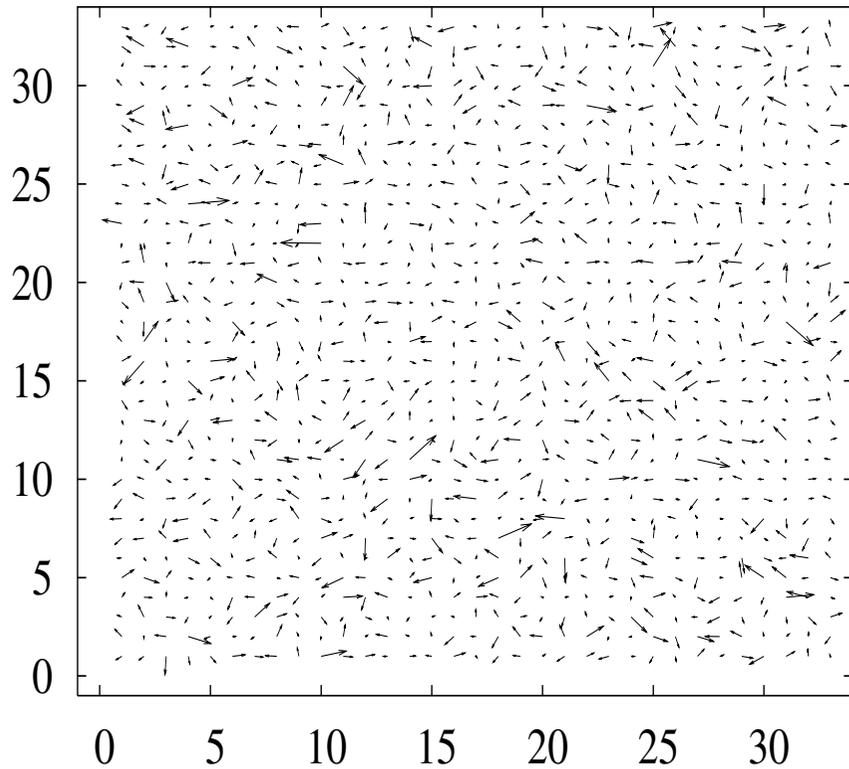
Density



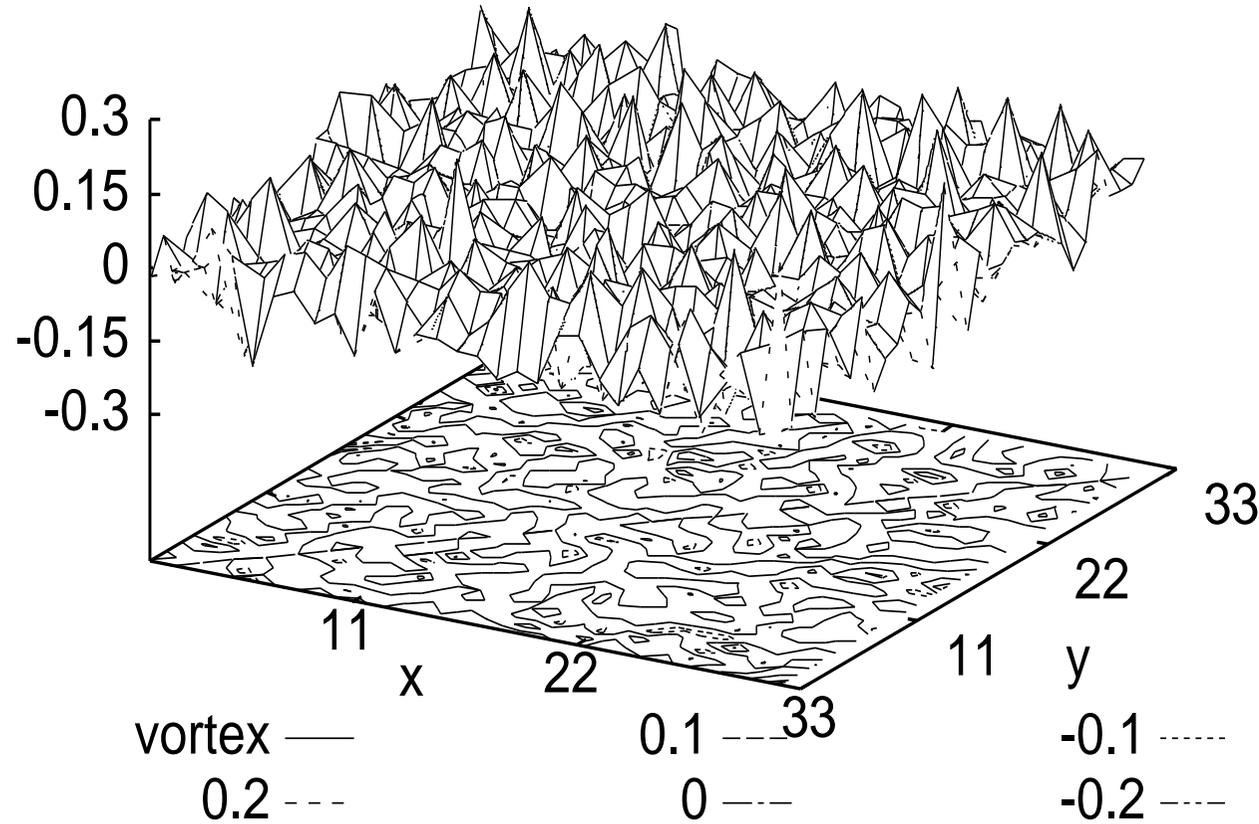
Density: at 45 period

The system does **not have** any definite **clusters**

Vortex and Velocity filed



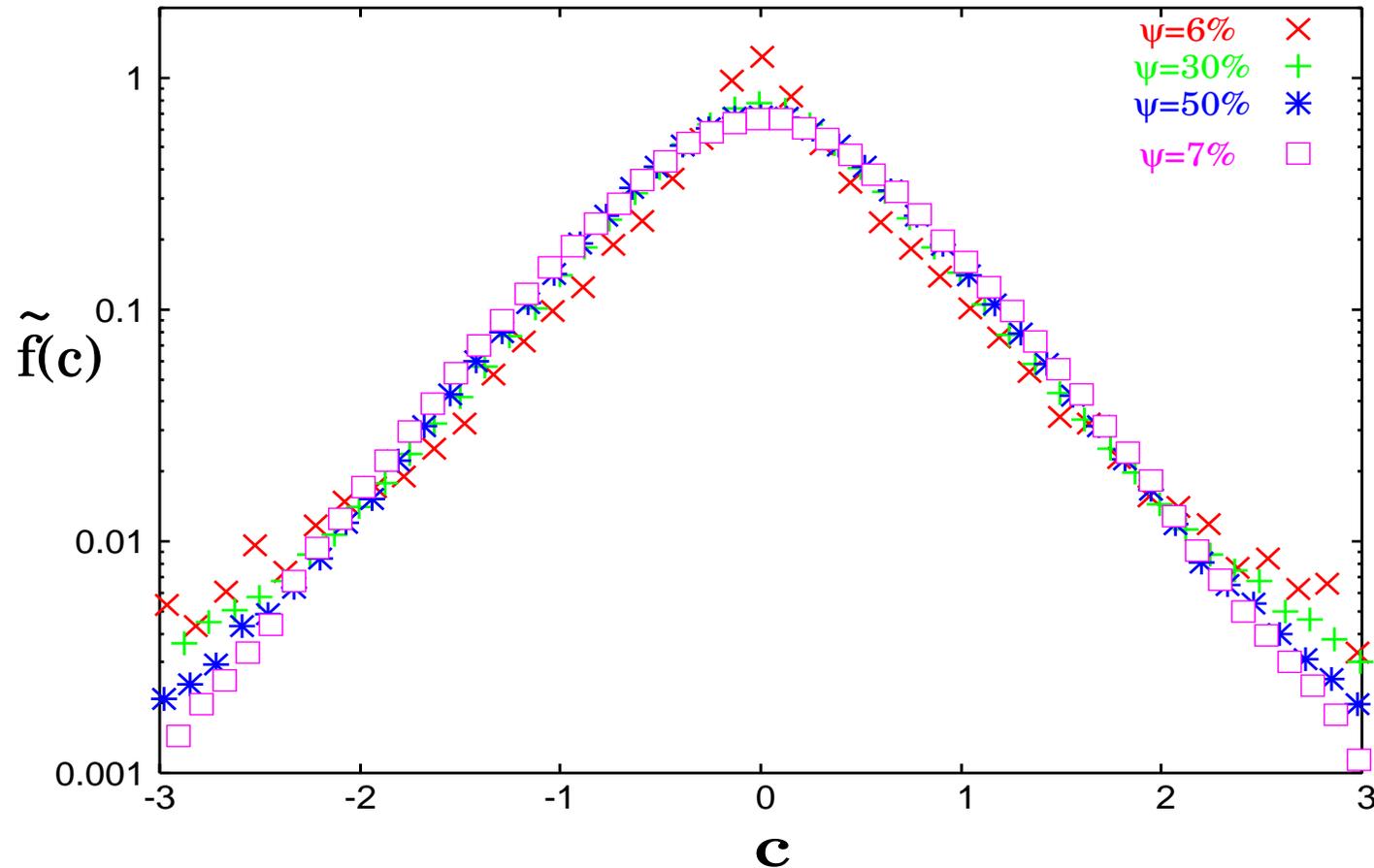
Velocity filed: at 46 period



Vortex: at 46 period

The system does **not have** any systematic **flows**

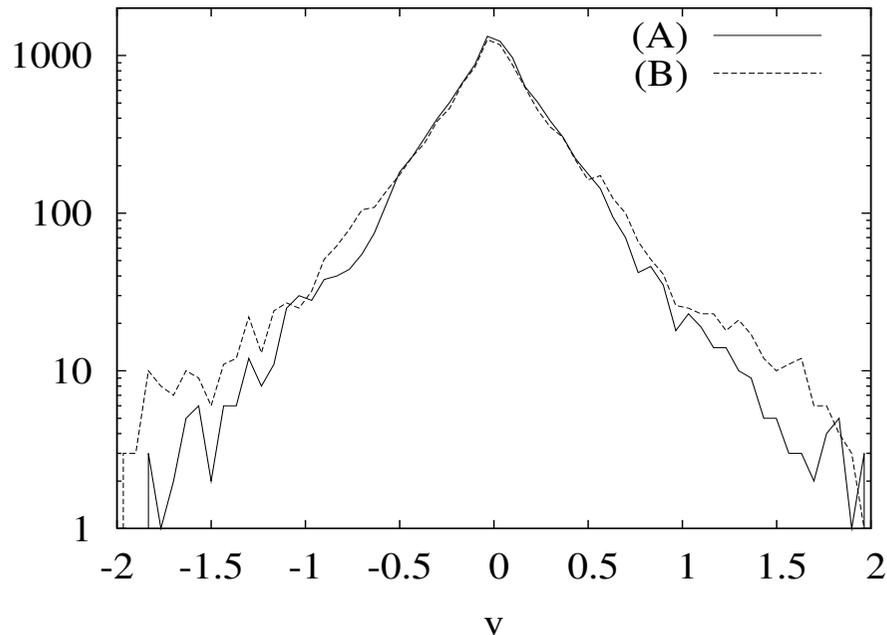
Velocity Distribution Function (VDF) various area fraction



$$f(\mathbf{v}, t) = n v_0(t)^{-2} \tilde{f}(\mathbf{v}/v_0), \mathbf{v}/v_0 = \mathbf{c}$$

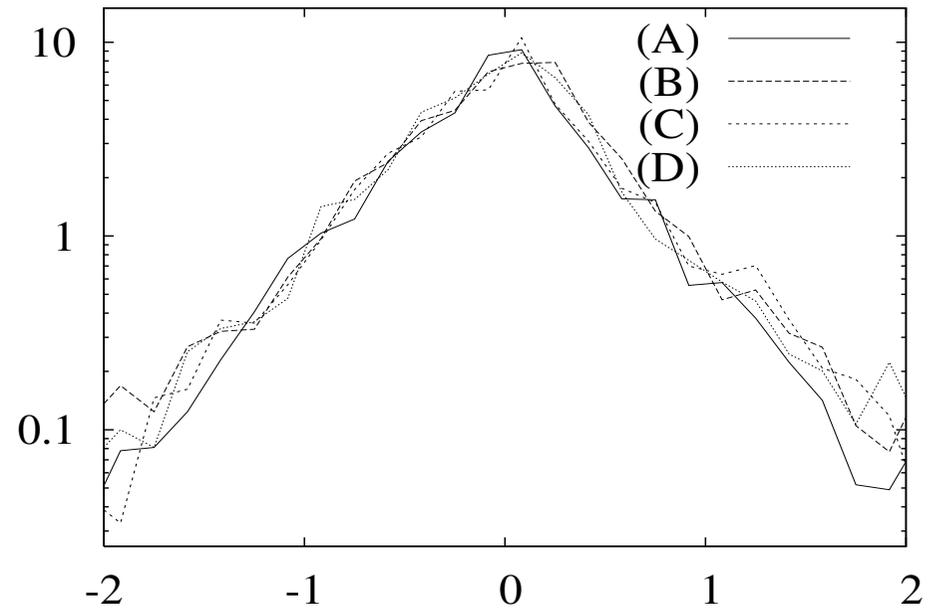
Velocity Distribution Function (VDF)

Dependence on time



Phase: (A) π 、(B) $3\pi/2$

Dependence on space



(A) corner、(B)(C) along wall、(D) center。

**A little dependence on time and space exists
at high energy tail.**

Flatness (FN)

Table I. Flatnesses(FN) under the several conditions. See the text in detail.

	Number of particles	Fractions(%)		FN		
		Area	Volume			
		20	7.4	6.90		
		30	11	6.26		
		40	15	5.67		
		50	19	5.36		
		<hr/>				
3.0×10^3		6.0	2.2	9.57		
		10	3.7	8.13		
		20	7.4	7.03		
		30	11	6.34		
		40	14	5.64		
		50	18	5.27		
		<hr/>				
		1.0×10^4	7.2	2.6	6.85	
		free-cooling	1.0×10^4	7.2	2.6	4.20

$$FN \equiv \frac{\langle c^4 \rangle}{\langle c^2 \rangle^2}$$

VDF in the cooling process is nearly Gaussian.

VDF can be approximated by an exponential function.

VDF without Coulomb's friction

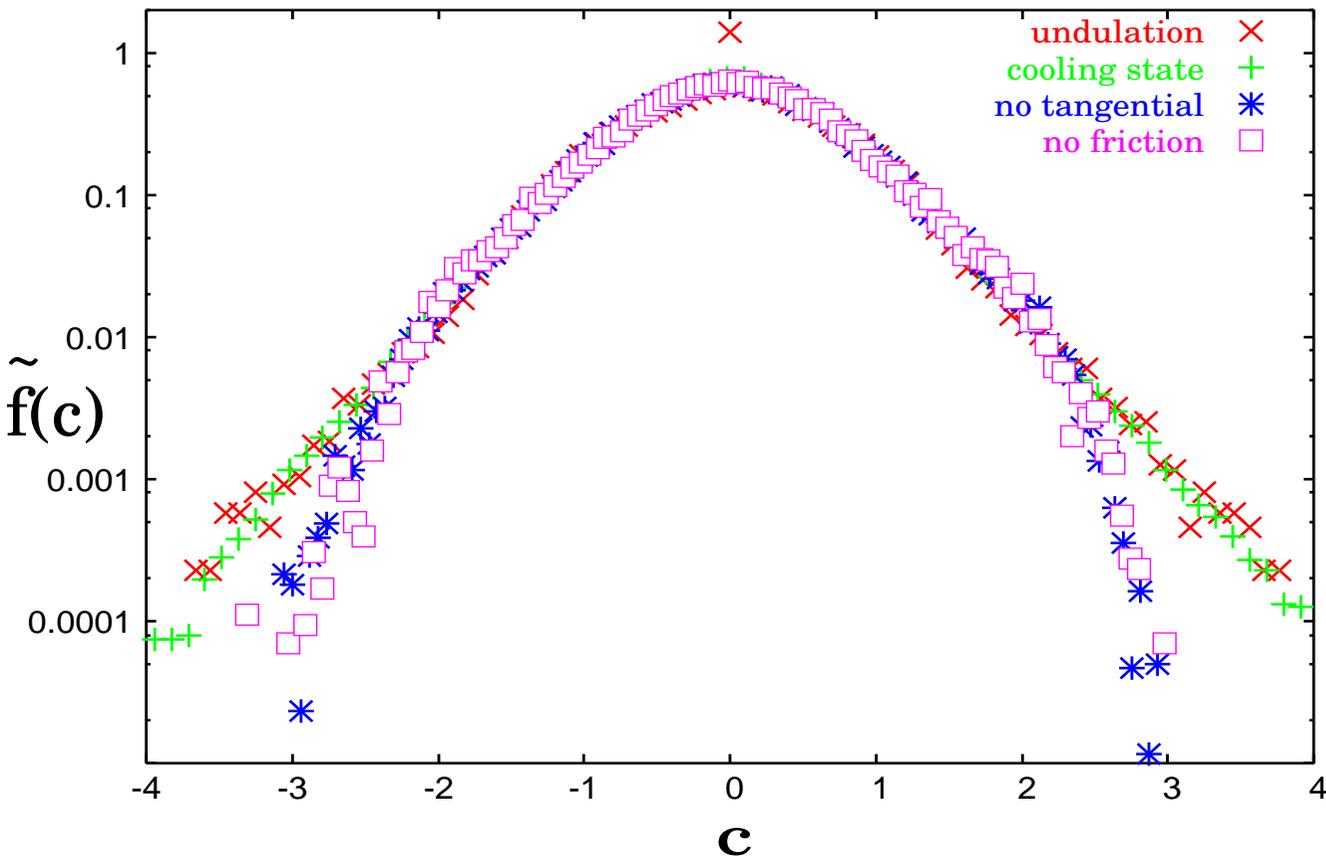


Table I. Flatnesses(FN) under the several conditions. See the text in detail.

	Number of particles	Fractions(%)		FN
		Area	Volume	
free-cooling	1.0×10^4	7.2	2.6	4.20
no tangential	1.0×10^3	6.5	2.4	3.26
	3.0×10^3	6.0	2.2	3.43
no friction	1.0×10^3	6.5	2.4	3.27
	3.0×10^3	6.0	2.2	3.43

The essence to produce the large flatness in VDF is **Coulomb's friction**.

Analysis VDF

- Langevin equation

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\gamma \frac{\mathbf{u}}{u} + \boldsymbol{\eta}$$

- Fluctuation-dissipation relation

$$\langle \eta_\alpha(t) \rangle = 0, \langle \eta_\alpha(t) \eta_\beta(t') \rangle = 2D \delta_{\alpha\beta} \delta(t-t')$$

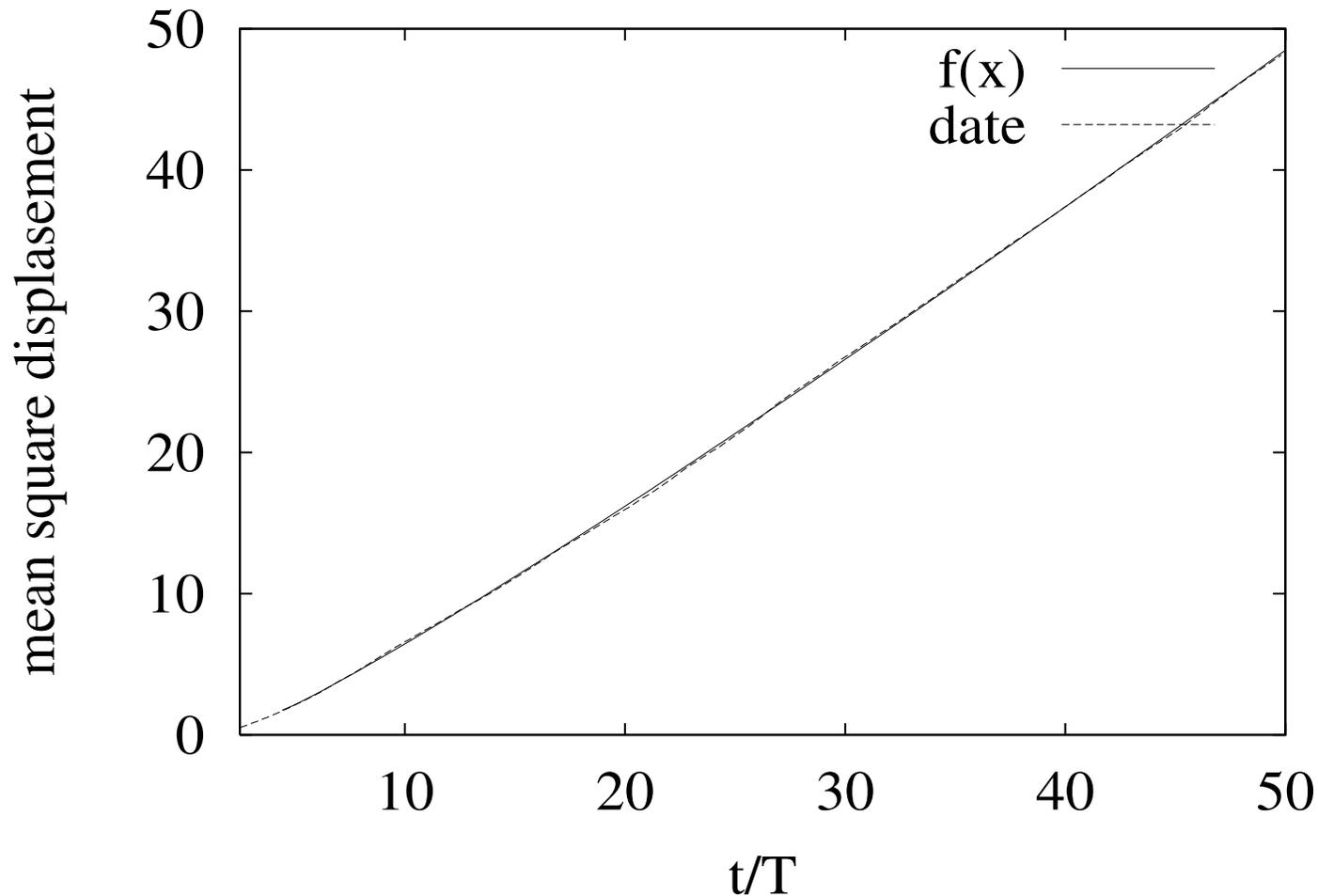
- Fokker-Planck (Kramers equation)

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)}{\partial t} = \left\{ \frac{\gamma}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \frac{\mathbf{u}}{u} + D \frac{\partial^2}{\partial u^2} \right\} P(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$$

- Solution (Steady state) $\therefore P_{st}(\mathbf{u}) = 2 \sqrt{\frac{m}{3T}} \exp\left[-\sqrt{\frac{3m}{T}} u\right]$

The langevin equation with Coulomb's friction law obey the exponential VDF.

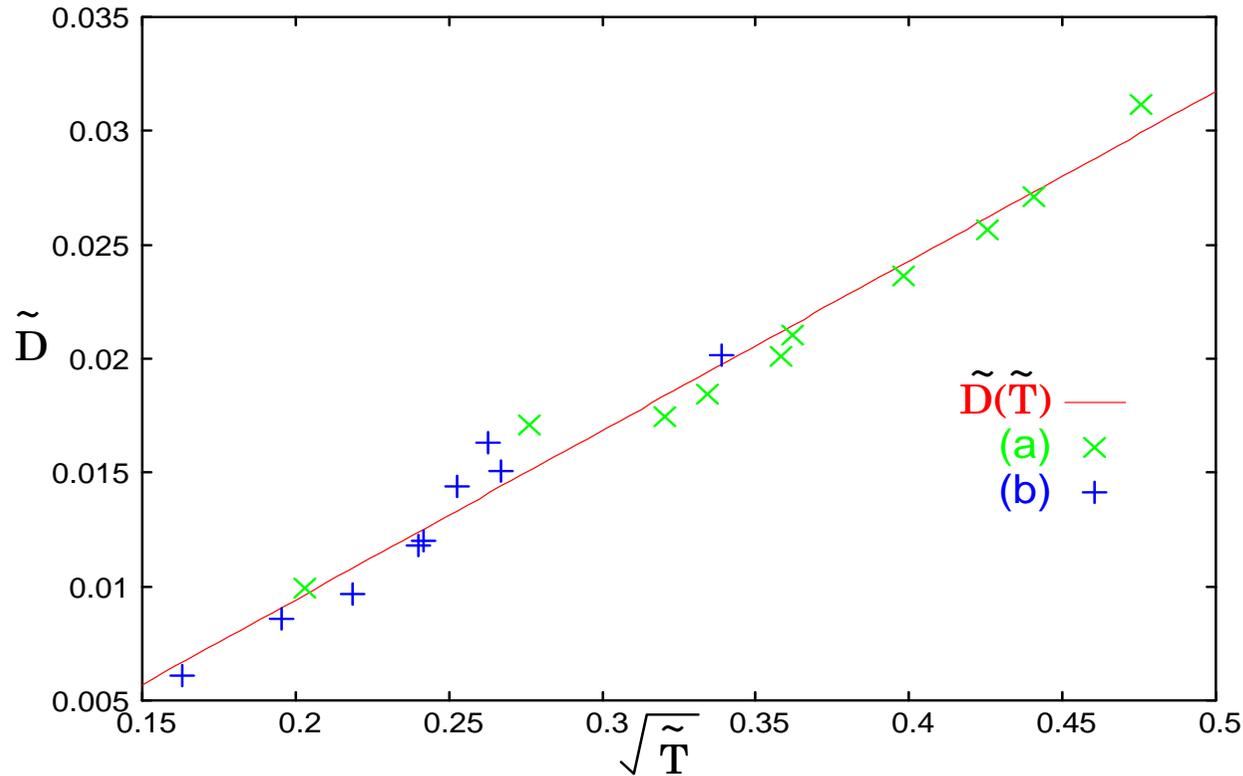
Diffusion coefficient



$$\langle (r(t) - r(0))^2 \rangle \approx Dt^a$$
$$a = 1.094 \pm 0.002403$$
$$(t \geq 100)$$

The diffusion coefficient is evaluated from the relation $\langle (r(t) - r(t_0))^2 \rangle = 4D(t - t_0)$

Fluctuation-Dissipation Relation



Particle number: (a)3000 ,(b)1000

Fitting function

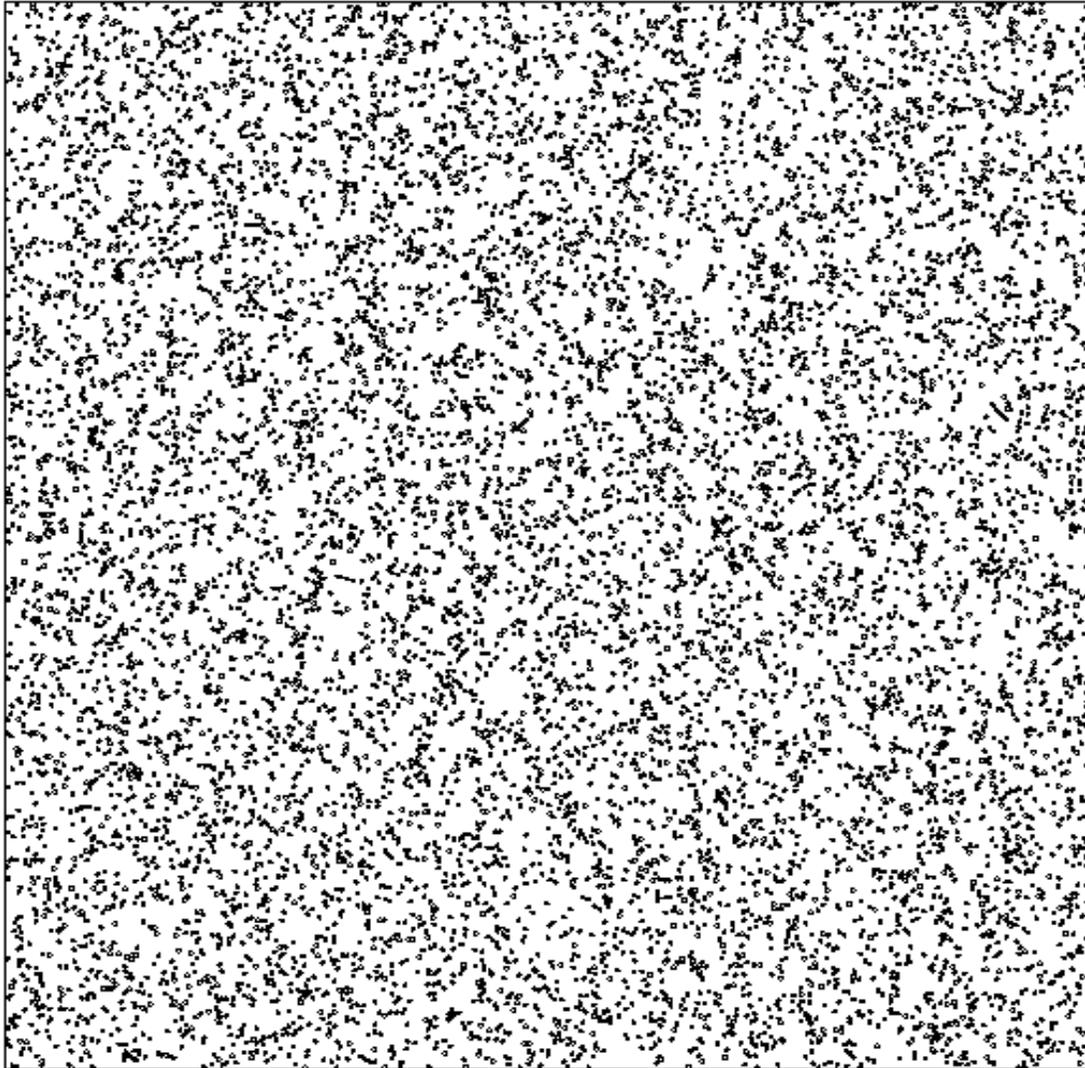
$$\tilde{D} = 0.0735 \tilde{T}^{0.452} - 0.0007$$

$$\tilde{D} = 0.0744 \sqrt{\tilde{T}} - 0.0054$$

$$D = \gamma \sqrt{T/3m} \Rightarrow \gamma = 0.129 \text{ g}$$

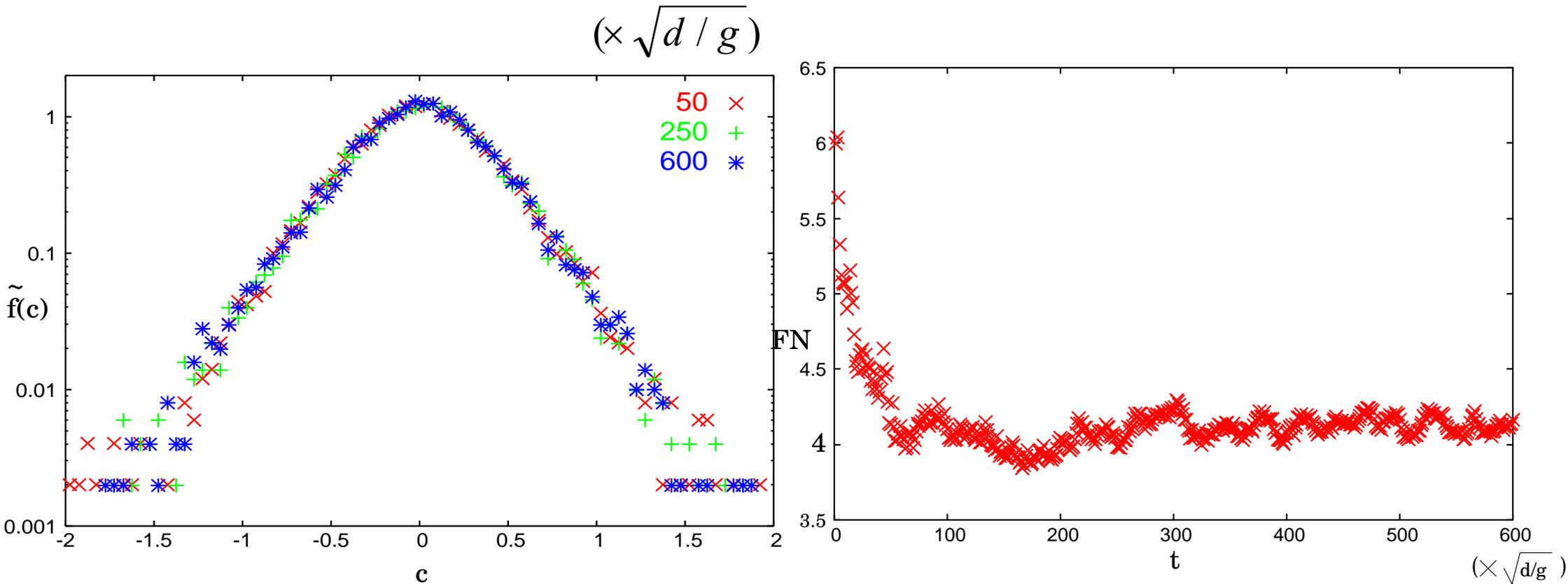
The friction γ is independent of T.

Free-Cooling state



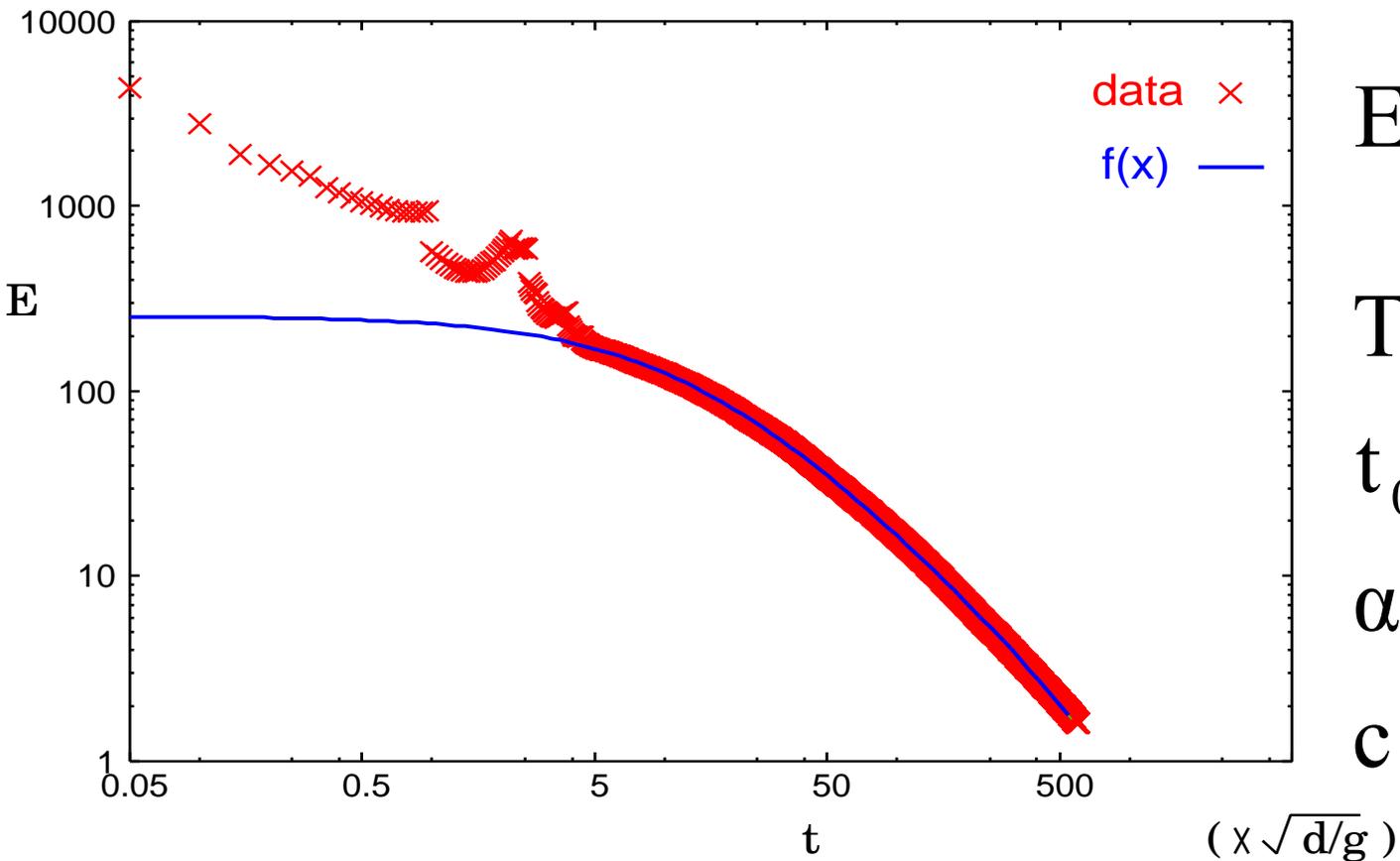
step= 200.
step= shaking

VDF in a free-cooling state



VDF in cooling process is independent of time

Energy decay



$$E(t) = \frac{T(0)}{(1 + t/t_0)^\alpha} + c$$

$$T(0) = 255.0 \pm 0.6295$$

$$t_0 = 267.0 \pm 2.399$$

$$\alpha = 1.267 \pm 0.004988$$

$$c = -0.4764 \pm 0.0307$$

Energy decay is slower than Haff's law .

Coulomb 摩擦のある系の Langevin 方程式の性質

既に述べた通り Langevin 方程式は

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\zeta\mathbf{v} + \mathbf{F} \quad (1)$$

と書ける。ここで \mathbf{F} はランダム力で

$$\langle F_\alpha(t) \rangle = 0, \quad \langle F_\alpha(t)F_\beta(t') \rangle = 2\zeta kT\delta(t-t') \quad (2)$$

とおける。このモデルが平衡状態に緩和し、その平衡状態が Maxwell-Boltzmann 分布で記述できることはよく知られている。また揺動散逸定理他の重要な性質を示す非平衡現象を記述する最も基本的なモデルとなっている。

最近、様々な手法に則って線形の Langevin 方程式を非線形領域に拡張しようという試みがなされている。その一つは時間と共に変化するポテンシャル中を運動する粒子の記述の試みである。研究の結果、その系は Einstein の関係式が破れるなど非自明な性質を持つことが明らかになりつつある。

Coulomb's fluid

粉体絡みで最近、筆者が見つけた有効 Langevin 方程式に

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\gamma \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} + \frac{\mathbf{F}_{ex}}{m} + \boldsymbol{\eta} \quad (3)$$

というのがある。ここで $\gamma = \mu g$ で、 \mathbf{F}_{ex} は外力である。またランダム力 $\boldsymbol{\eta}$ は

$$\langle \eta_\alpha(t) \rangle = 0, \quad \langle \eta_\alpha(t) \eta_\beta(t') \rangle = 2D \delta_{\alpha,\beta} \delta(t - t'), \quad (4)$$

を充たすとしよう。このモデルも通常の Langevin 方程式と同様に確率分布関数 $P(\mathbf{v}, t)$ に対する Fokker-Planck 方程式

$$\frac{\partial P(\mathbf{v}, t)}{\partial t} + \frac{\mathbf{F}_{ex}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} P(\mathbf{v}, t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} \cdot \left(\gamma \frac{\mathbf{v}}{|\mathbf{v}|} P(\mathbf{v}, t) + D \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} P(\mathbf{v}, t) \right). \quad (5)$$

この系の定常状態の統計的性質を通常の平衡統計力学とその線形補正から予言されるものと著しく異なっている。外力を $\mathbf{F}_{ex} = mg\hat{z}$ として \hat{z} となす角を θ とする 2次元極座標で

$$g \left[\cos \theta \frac{\partial P}{\partial v} + \frac{\sin^2 \theta}{v} \frac{\partial P}{\partial \cos \theta} \right] = \gamma \left\{ \frac{P}{v} + \frac{\partial P}{\partial v} \right\} + D \left[\frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial v} + \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] P, \quad (6)$$

VDF

ここで $v = |\mathbf{v}|$ である. 分布関数を

$$P(v, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(v) \cos n\theta = P_0(v) + P_1(v) \cos \theta, \quad (7)$$

と展開する (6) 式から $\eta \equiv \gamma/D$ として

$$P_0(v) = f(v)e^{-\eta v} \quad (8)$$

とおくと

$$P_1(v) = \frac{D}{g} f'(v)e^{-\eta v}, \quad (9)$$

となることが分かる。結局解くべき方程式は

$$f''' + \left(\frac{1}{v} - \eta\right) f'' - \left(\frac{1}{v^2} + \epsilon\eta^2\right) f' + \epsilon\eta^3 f = 0, \quad (10)$$

に帰着する。但し $\epsilon = (g/\gamma)^2$ である。

VDF (2)

$\epsilon \ll 1$ の場合は

$$f(v) = \frac{2\pi}{\eta^2} [1 + \epsilon f^{(1)} + \epsilon^2 f^{(2)} + \dots]. \quad (11)$$

と展開できる。注目すべきは $\epsilon = 0$, 即ち外場がないときはガウス分布ではなく、指数関数分布が平衡分布となることである。 $f^{(1)}$ は

$$f^{(1)}(v) = c_0 \left\{ G_{23}^{31} \left(\eta v \left| \begin{array}{ccc} 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 \end{array} \right. \right) - (\eta v + \ln v)(\gamma + \ln v) - \eta v(\ln v - 1) - \frac{1}{2}(\ln v)^2 \right\} + \frac{\eta^2}{2} v^2 \quad (12)$$

となる。ここで

$$c_0 = \frac{3}{\delta - \frac{\pi^2}{12} - 1 + \frac{\gamma^2}{2} + \gamma \ln \eta + (\ln v)^2/2} \quad (13)$$

で $\delta \simeq 1.64549\dots$ この分布関数を用いると外場がかかったときの $\langle v \rangle = \mu m g$ という易動度 μ は

$$\mu = \frac{\pi T}{2m^2 \gamma} (4 - 3c_0) \quad (14)$$

となる。但し

$$D = \gamma \sqrt{\frac{T}{3m}} \quad (15)$$

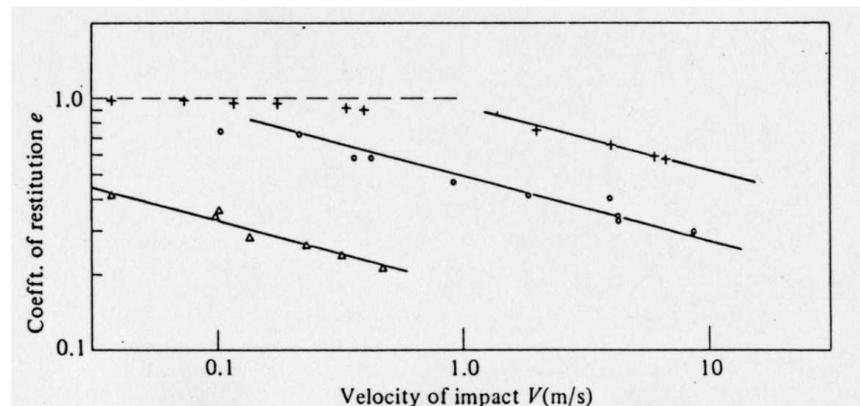
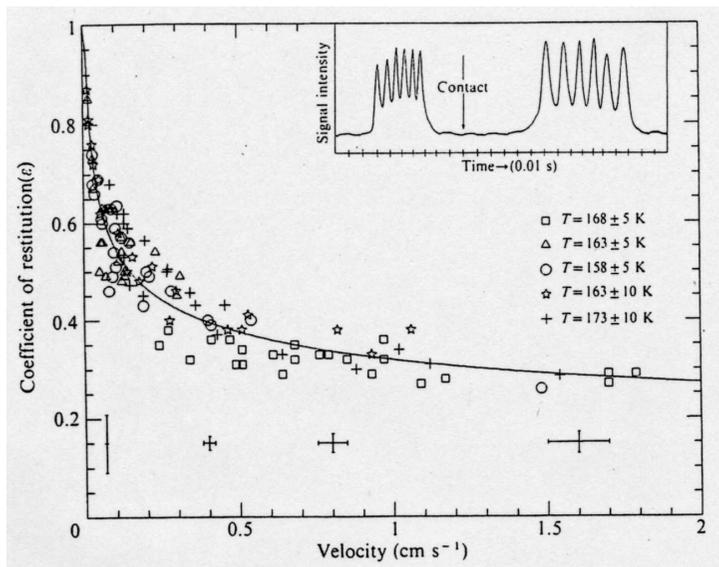
Discussion

- 日本宇宙フォーラムでは宇宙環境実験の対象として粉体を重視している。
 - 9月に微小重力物理の代表例として粉体物理の紹介をする。
 - 実験の申請も佐野さん(東大)と一緒にやっている。
 - ヒアリングが来週ある。
- 宇宙物理との絡み:小惑星物理や惑星のリング形成における非弾性ガス物理の役割

IV. Physics of Inelastic collisions by elastic materials (Kuninaka & HH)

Inelastic collisions are characterized by the

coefficient of restitution defined by $e = -v_r / v_i$



Plastic deformation

Quasi-static region

$$1 - e \propto v^{1/5}$$

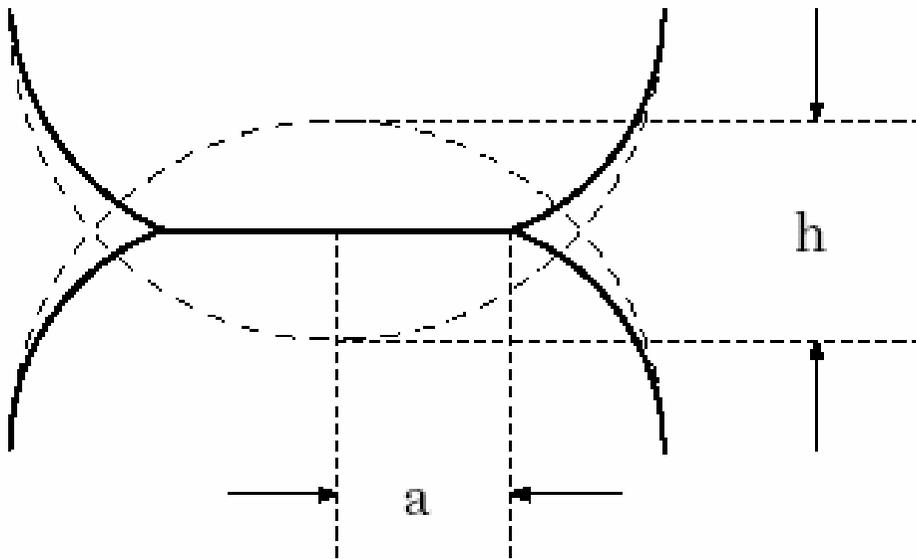
$$e \propto v^{-1/4}$$

非弾性衝突の物理

- 巨視的物体の非弾性衝突は散逸や不可逆性の起源を考えるのに適した現象(かもしれない)。
- 粉体物理の最も基礎的なプロセス
- 非弾性衝突自体あまりよく研究されているとは言い難い
 - 正面衝突でののはねかえり係数の衝突速度依存性
 - ななめ衝突でののはねかえり係数
 - $e > 1$ となる異常な現象

IV-A. 準静的な衝突理論

- Hertzの接触理論
 - 圧縮量 h と弾性力 F_{el} の関係



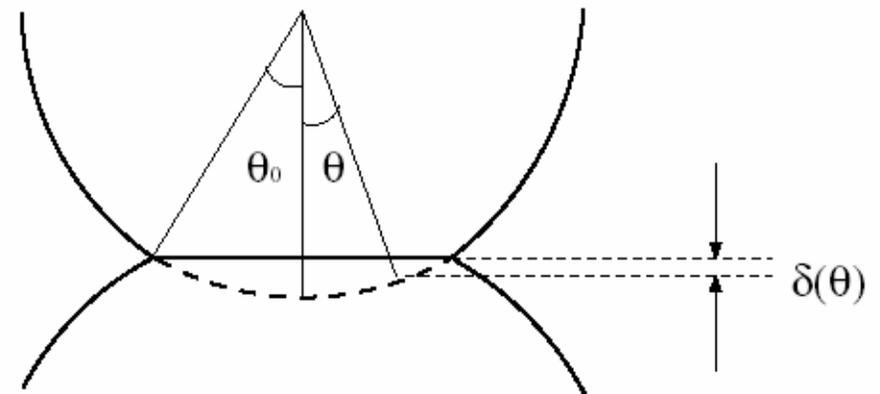
$$F_{el} = \frac{h^{3/2}}{D} \left(\frac{RR'}{R+R'} \right)^{1/2}$$

$$D = \frac{3}{4} \left(\frac{1-\sigma_0^2}{Y} + \frac{1-\sigma_0'^2}{Y'} \right)$$

R, R' : 半径: Y, Y_0 : Young 率,
 σ_0 , ポアソン比

One point lesson for Hertzian contact theory

ここで紹介したヘルツの接触理論を正確に導出するには弾性論の面倒な計算が必要であるが近似的には以下に紹介する方法で導くことが可能である。弾性接触は第0近似では図に示すように半径 R の球の先端部だけが潰れた状態であり、その変形が反発力を生むと考えられる。その際 θ_0 を球中心から接触端をのぞむ角度とすると接触半径は $a = R \sin \theta_0$, 変形 h は $h/2 = R(1 - \cos \theta_0)$ となる。また $\delta(\theta)$ を角度 θ のところでの鉛直方向の変形量とすると $\delta(\theta) = R(1 - \cos \theta)$ で与えられる。弾性体は局所的には線形ばねの系なのでこの圧縮による全変形は $\xi \equiv 2\pi \int_{-\theta_0}^{\theta_0} \delta(\theta) d\theta = 4\pi R(\theta_0 - \sin \theta_0) \simeq \frac{2}{3}\pi R\theta_0^3$ になる。但しこの描像は θ_0 が小さいときのみ有効である。一方, $h/R = 2(1 - \cos \theta_0) \simeq \theta_0^2$ から $\theta_0 \simeq \sqrt{h/R}$ となる。従って全変形 ξ は $\xi \simeq \frac{2\pi}{3\sqrt{R}} h^{3/2}$ となる。ここでばね定数 k は有効ヤング率 Y_* と比例し $k = RY_*$ という関係を仮定すると $F = k\xi \sim Y_* \sqrt{R} h^{3/2}$ という関係式を得る。



無散逸の衝突論と接触時間

尚、質量 m, m' の2粒子が弾性波速度より充分遅い相対速度 v で衝突すると散逸を無視した取扱いが可能になるだろう。ここではエネルギー保存則

$$m_{eff} \left(\frac{dh}{dt} \right)^2 + \kappa h^{5/2} = m_{eff} v^2, \quad \kappa = \frac{4}{5D} \sqrt{\frac{RR'}{R+R'}} \quad (2.4)$$

が成り立つ。ここで $m_{eff} = mm'/(m+m')$ は換算質量である。最大変形量 h_0 は dh/dt が0になるときの h であるから $h_0 = (m_{eff}/\kappa)^{2/5} v^{4/5}$ となる。衝突の継続時間 t_c は h が0から h_0 まで変形する時間の倍なので

$$t_c = 2 \left(\frac{m_{eff}^2}{\kappa^2 v} \right)^{1/5} \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^{5/2}}} = c_t \left(\frac{m_{eff}^2}{\kappa^2 v} \right)^{1/5} \sim \left(\frac{m_{eff}^2 R}{Y_*^2 v} \right)^{1/5} \quad (2.5)$$

となる。ここで数定数は定積分から $c_t = 4\sqrt{\pi}\Gamma(2/5)/5\Gamma(9/10) \simeq 2.94$ で与えられる。⁷ しかしこの取扱いでははねかえり係数 e は1にしかない。

準静的な衝突理論(2)

• 摩擦力 $F_f \sim -\sqrt{Rhd}dh/dt$

• 運動方程式 $m_{eff} \frac{d^2 h}{dt^2} + \frac{5}{2} \tilde{\kappa} \sqrt{h} \frac{dh}{dt} + \frac{5}{4} \kappa h^{3/2} = 0$

• 無次元 ($h = h_0 x, t = (h_0/v) \tau$)

$$\ddot{x} + \zeta \sqrt{x} \dot{x} + \frac{5}{4} x^{3/2} = 0; \quad \zeta \equiv \frac{5}{2} \tilde{\kappa} \left(\frac{v}{\kappa^3 m_{eff}^2} \right)^{1/5}$$

初期条件 $x = 0, \dot{x} = 1$ として無次元化された衝突時刻 τ_c での $\dot{x} = u$ を求める問題に帰着する. 内部散逸がないので接触後離れた状態では変形は残らず $x(\tau_c) = 0$ である. (2.8) 式から容易に

$$u^2 - 1 = -2\zeta \int_0^{\tau_c} \sqrt{x} \dot{x}^2 d\tau \quad (2.9)$$

準静的な理論

を摂動として扱おうと (2.4) 式の解を右辺の x に代入できる. よって $\tau < \tau_c/2$ では $\dot{x} = \sqrt{1 - x^{5/2}}$ となり

$$u^2 - 1 \simeq -4\zeta \int_0^1 dx [x(1 - x^{5/2})]^{1/2} = -\frac{8}{5}\zeta B\left(\frac{3}{5}, \frac{3}{2}\right) \quad (2.10)$$

となる. ここで $B(3/5, 3/2) = \Gamma(3/5)\Gamma(3/2)/\Gamma(21/10) \simeq 1.26125$ はベータ関数である. $u^2 = e^2$ なのではねかり係数 e は

$$e \simeq 1 - 1.009\zeta = 1 - 1.009\bar{\kappa} \left(\frac{v}{\kappa^3 m_{eff}^2} \right)^{1/5} \quad (2.11)$$

となる. この様にはねかえり係数は1から速度の1/5乗に比例して低下すると考えられている. この結果の妥当性は実験的にもある程度確認され, 標準的な考え方として受け入れられている.

IV-B 弾性円盤の数値シミュレーション

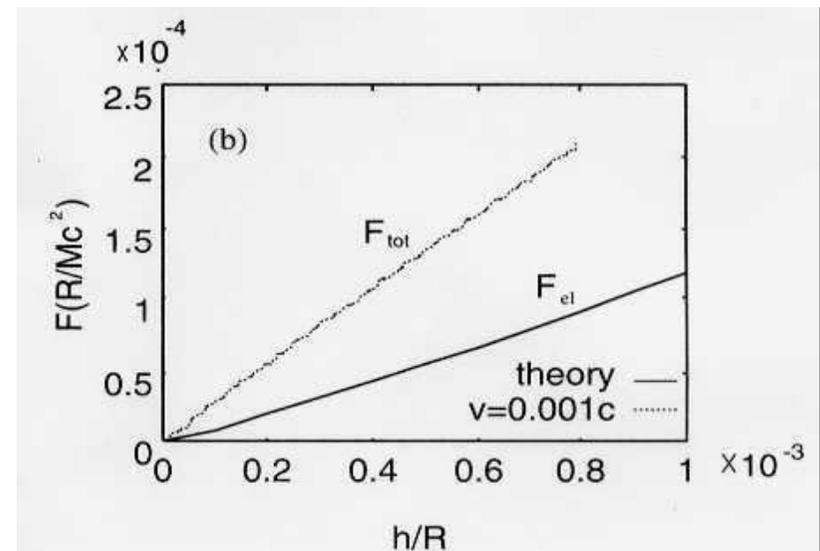
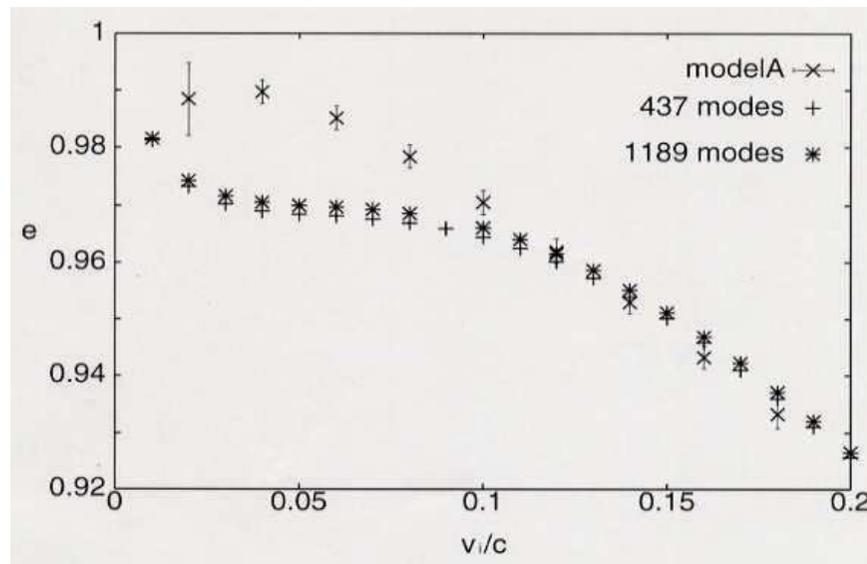
これまでの研究： 一体問題（衝突物体のみで壁の内部自由度なし）
法線方向のはねかえり係数の変化

Hisao Hayakawa and Hiroto Kuninaka

"Simulation and theory of the impact of two-dimensional elastic disks"

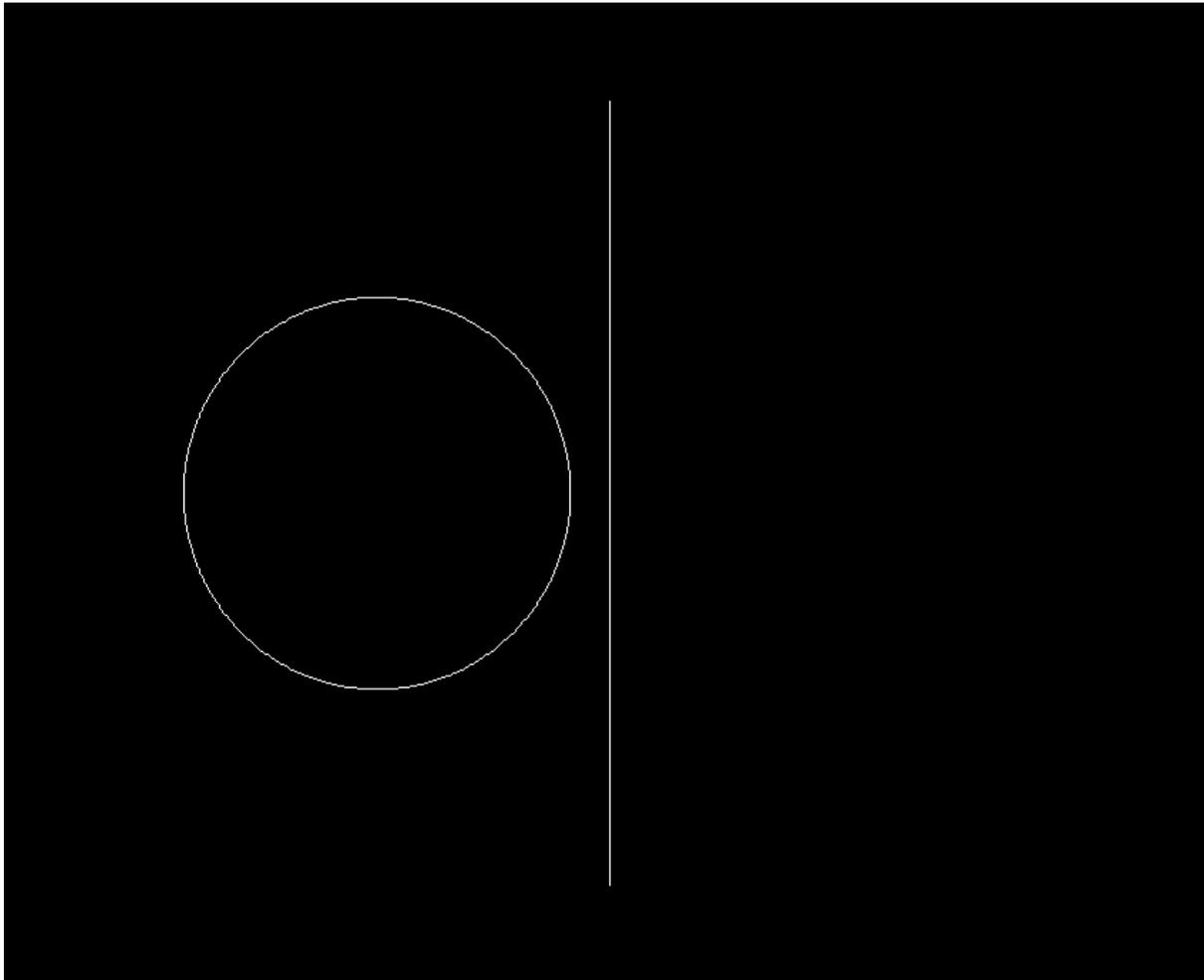
Chem. Eng. Sci. 57 (2002) 239-252

: 正面衝突時の衝突速度と法線方向のはねかえり係数の解析

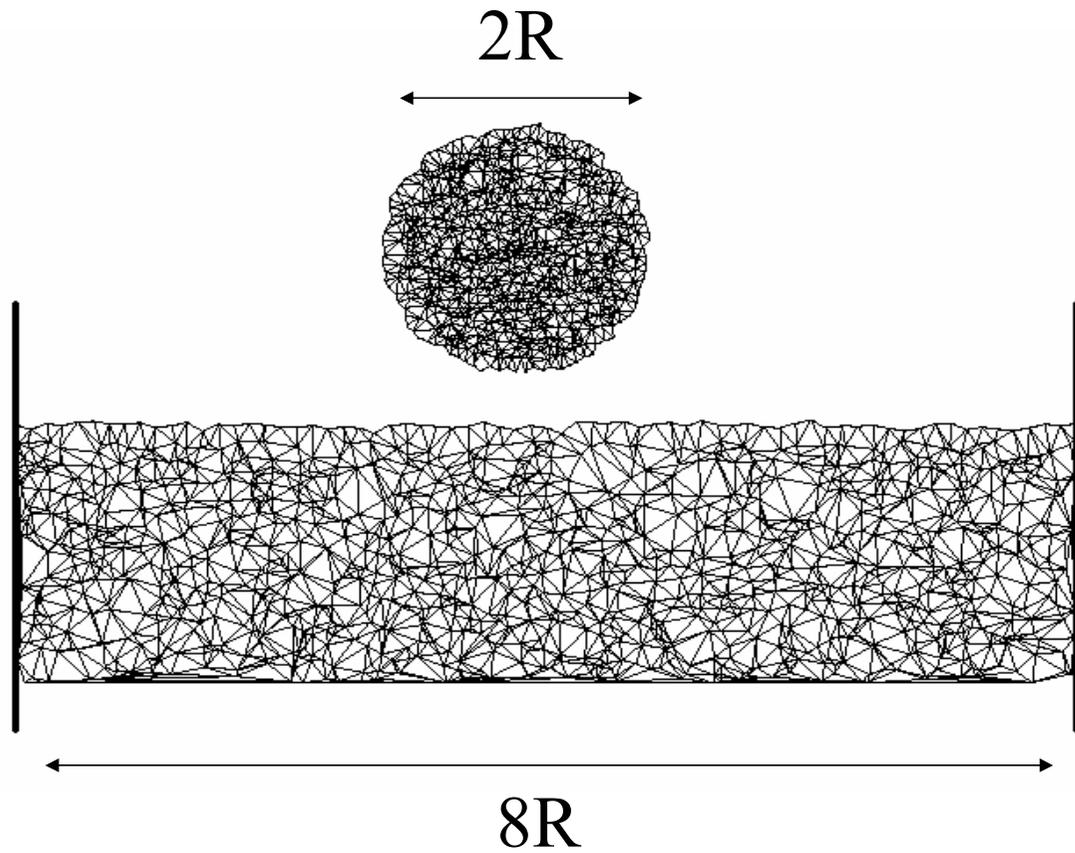


等温完全弾性体モデルでは不十分

An example of simulation of inelastic collision
by a completely elastic disk and a wall.



壁と円盤の衝突モデル(無散逸)



質点数: 円盤は1600で、
一様乱数で初期配置

質点間相互作用:

$$V(x) = \frac{1}{2}k_1x^2 + \frac{1}{4}k_2x^4 \quad (k_2/k_1 \cong 10^{-3})$$

(x は自然長からの変位)

ポアソン比: $\nu \cong 7.5 \times 10^{-2}$

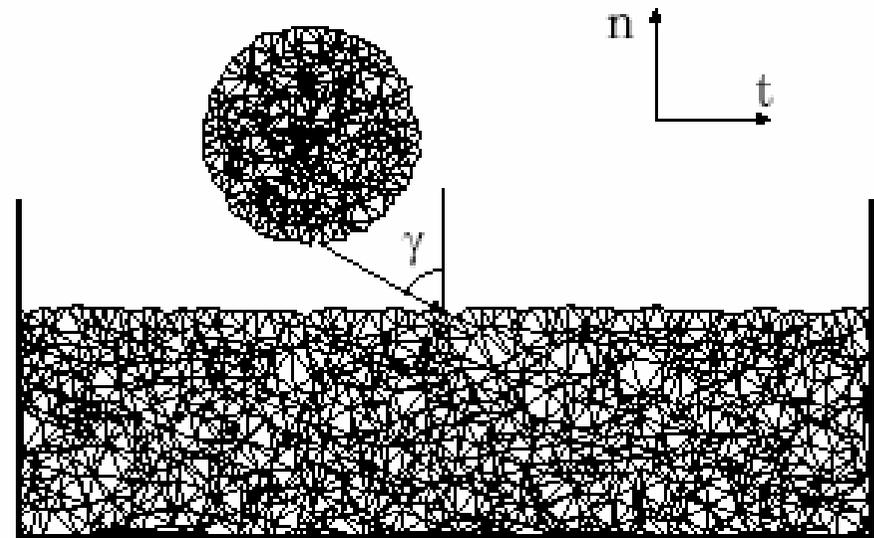
$$\text{(円盤の並進エネルギー)} = \text{(円盤の並進エネルギー)} + \text{(内部振動)}$$

衝突前

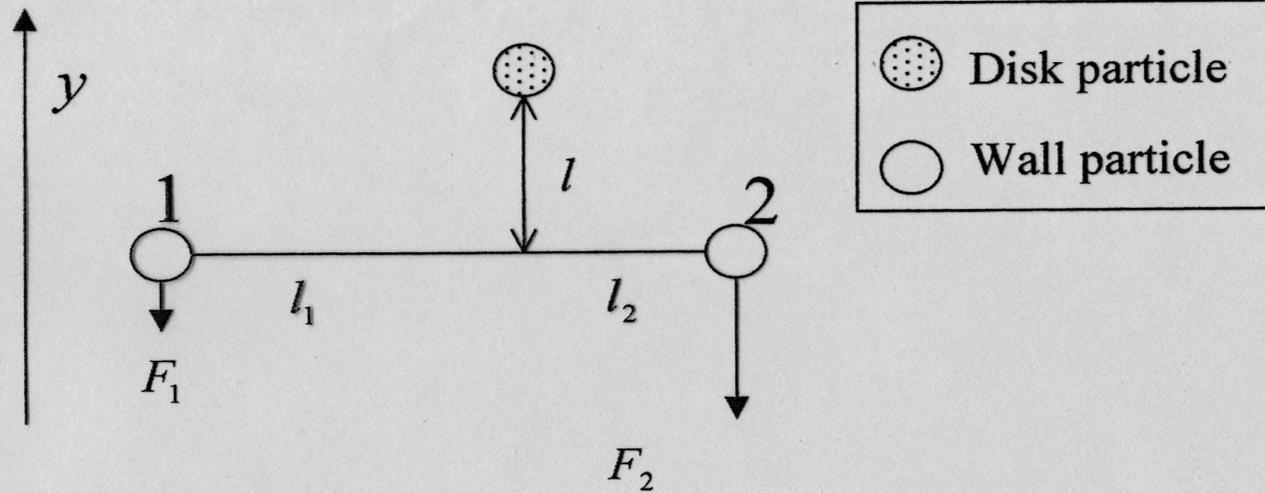
衝突後

モデルの説明

- ランダム格子モデル: 有限サイズで格子配向による異方性を避ける
- 壁は固定境界(横と縦)



円盤と壁の相互作用



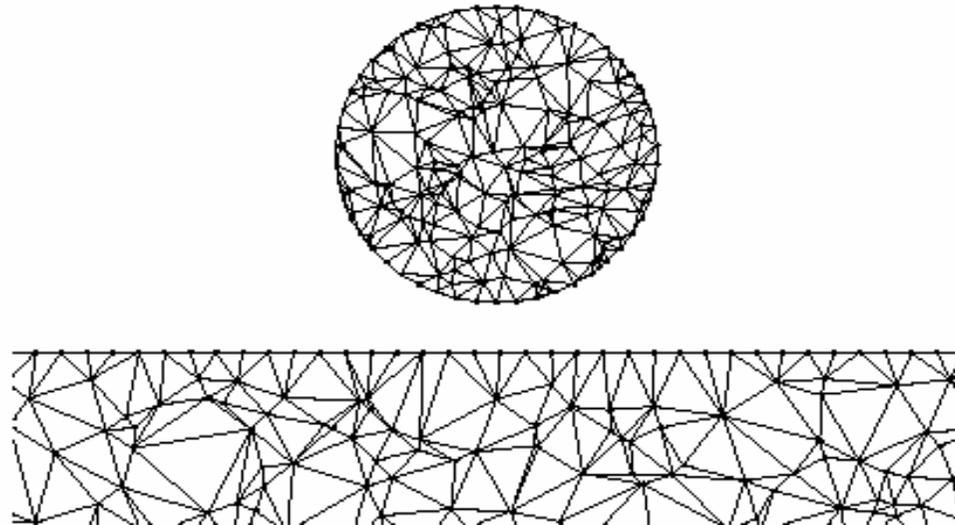
円盤表面の粒子に作用する力

$$F(l) = aV_0 \exp(-al)$$

壁表面の粒子1、および2に作用する力

$$F_1(l) = \frac{F(l)}{1 + \frac{l_1}{l_2}} \quad F_2(l) = \frac{F(l)}{1 + \frac{l_2}{l_1}}$$

表面のroughness



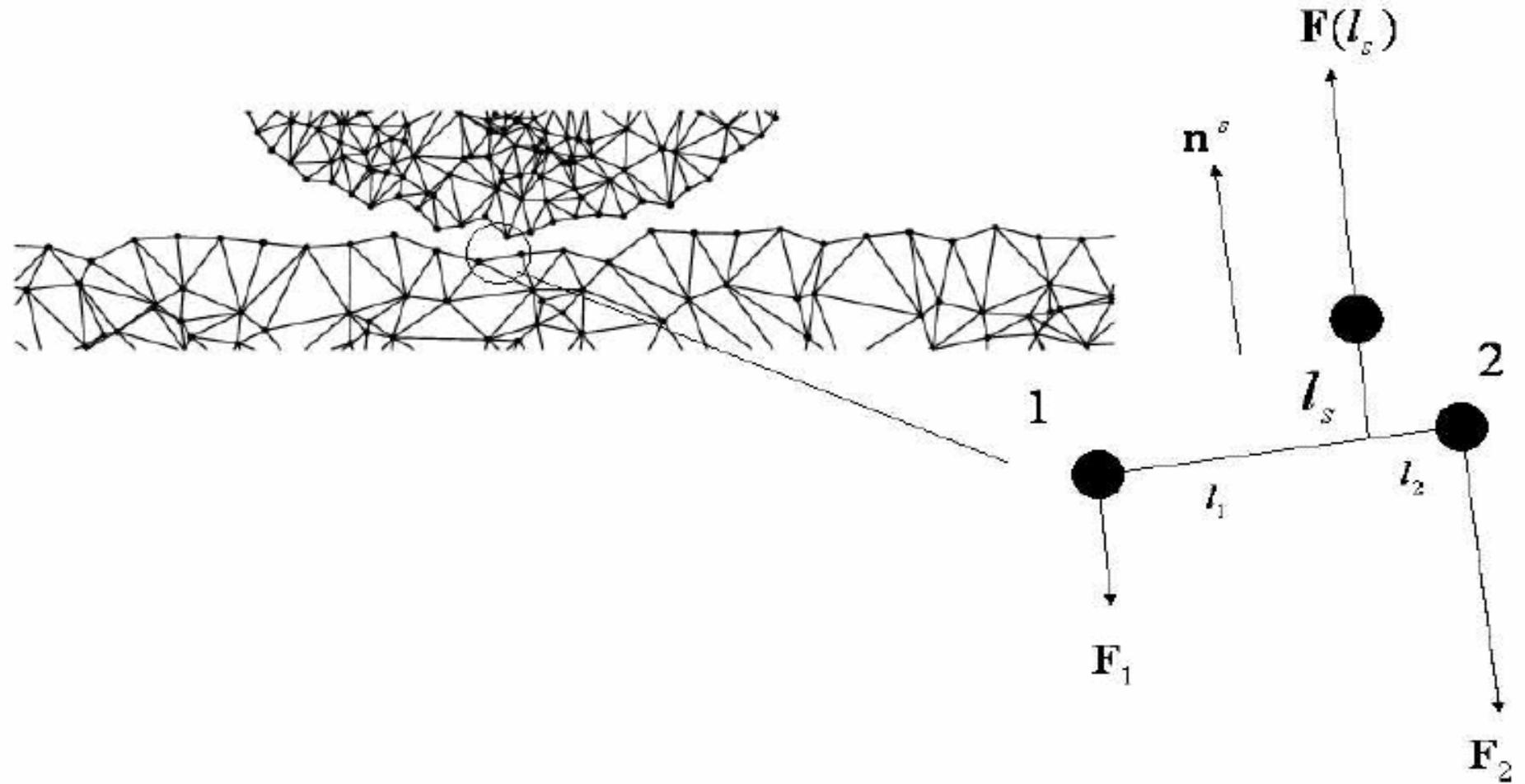
roughnessなし

分散 $\delta = 2.15 \times 10^{-2} R$ で正規乱数 dr_i, dy_j を発生させる
平均は0

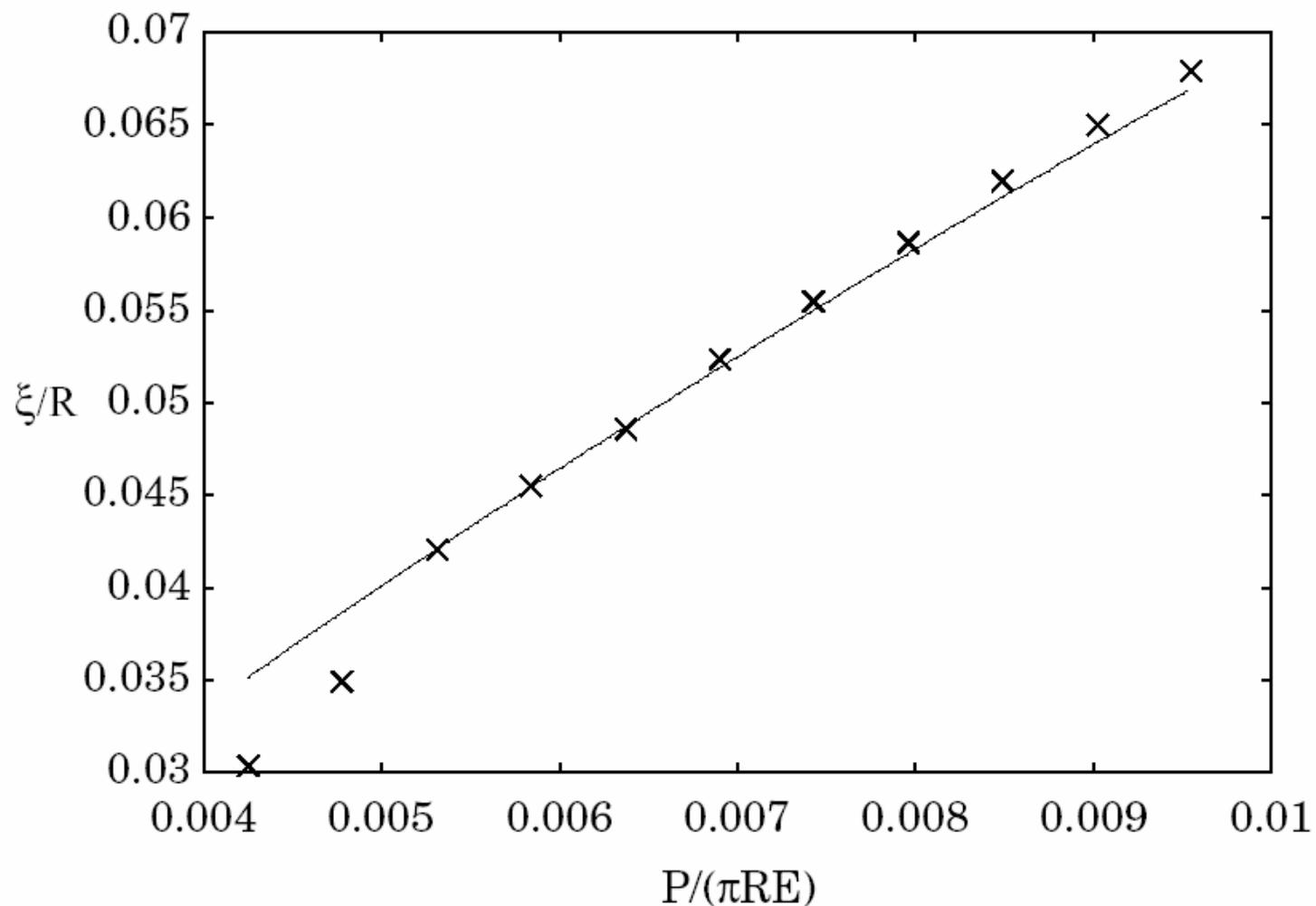
円盤: $(R, \theta_i) \Rightarrow (R + dr_i, \theta_i)$

壁: $(x_j, y_j) \Rightarrow (x_j, y_j + dy_j)$

表面粒子の相互作用のモデル図

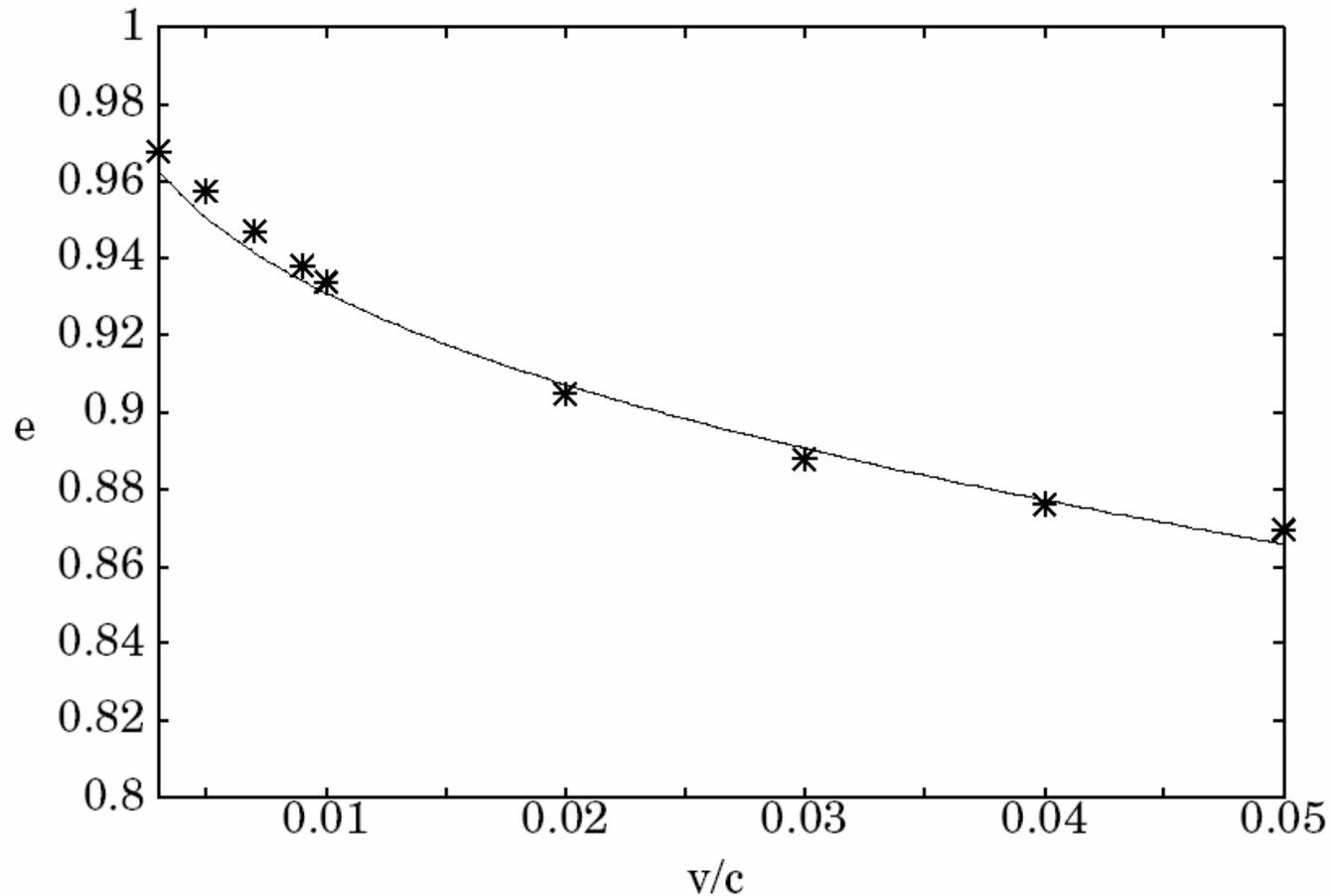


Comparison with Hertzian contact theory



直線は2次元Hertz理論。両者が一致するには散逸が必要

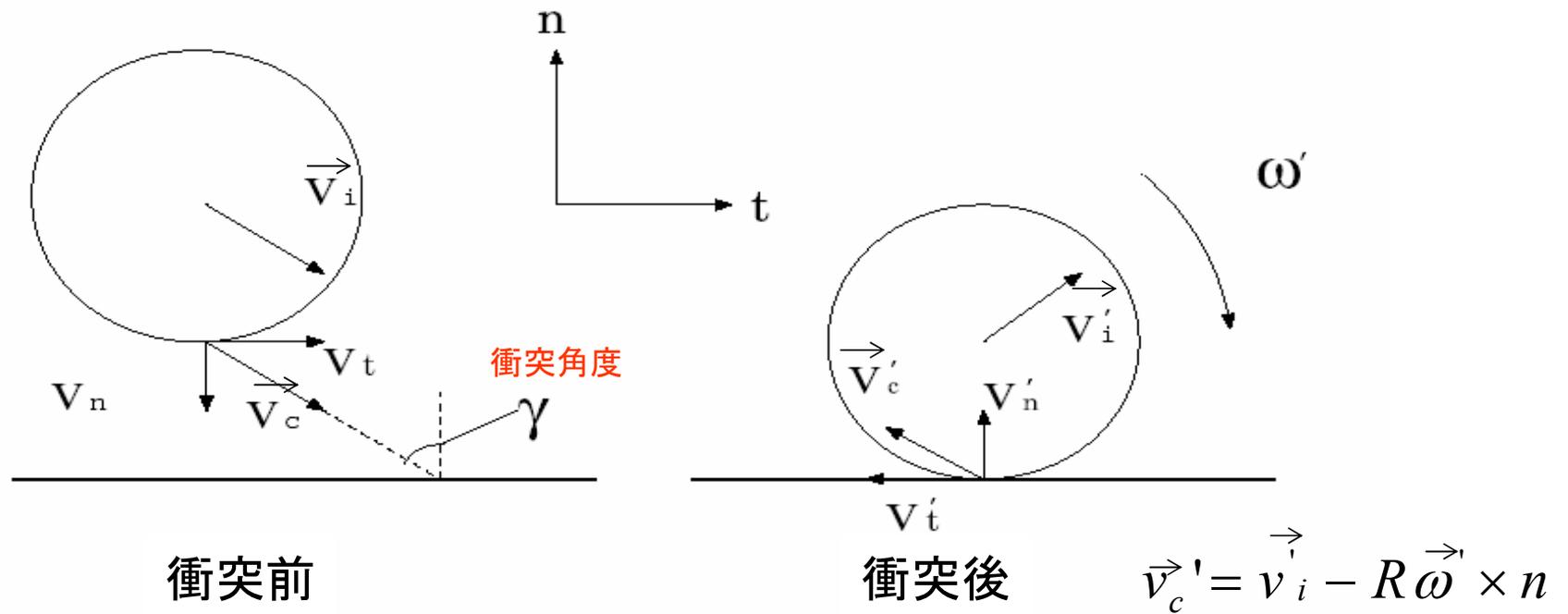
Comparison with quasi-static theory



$$e \simeq d_1 \sqrt{1 - \frac{d_2}{\sqrt{\ln(4c/v)}}}, \quad \text{where } d_1 = 1 \text{ and } d_2 = 2\pi\tau_0 E_*/(\rho R c).$$

d_1 が1になっていない!

接線方向のはねかえり係数



$$\beta \equiv -\frac{v_t'}{v_t} = -\frac{\psi_2}{\psi_1}$$

$$\psi_1 = -\frac{v_t}{v_n} = \underline{\underline{\tan \gamma}}$$

$$\psi_2 = -\frac{v_t'}{v_n'}$$

$$-1 \leq \beta \leq 1$$

For β : See Kuninaka and HH, JPSJ 72, 1655 (2003).

Waltonの衝突理論

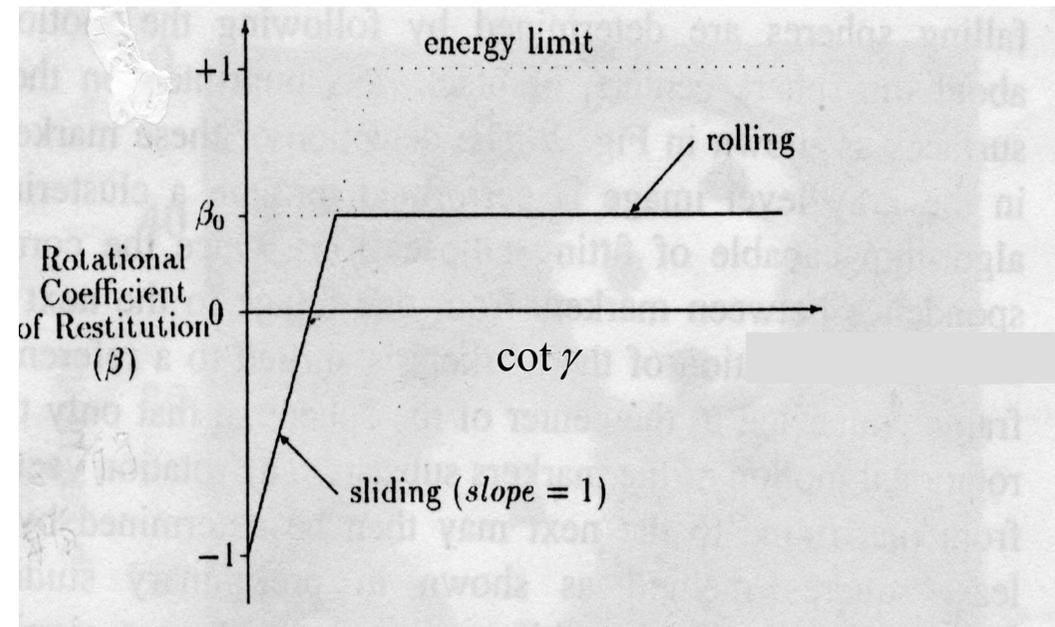
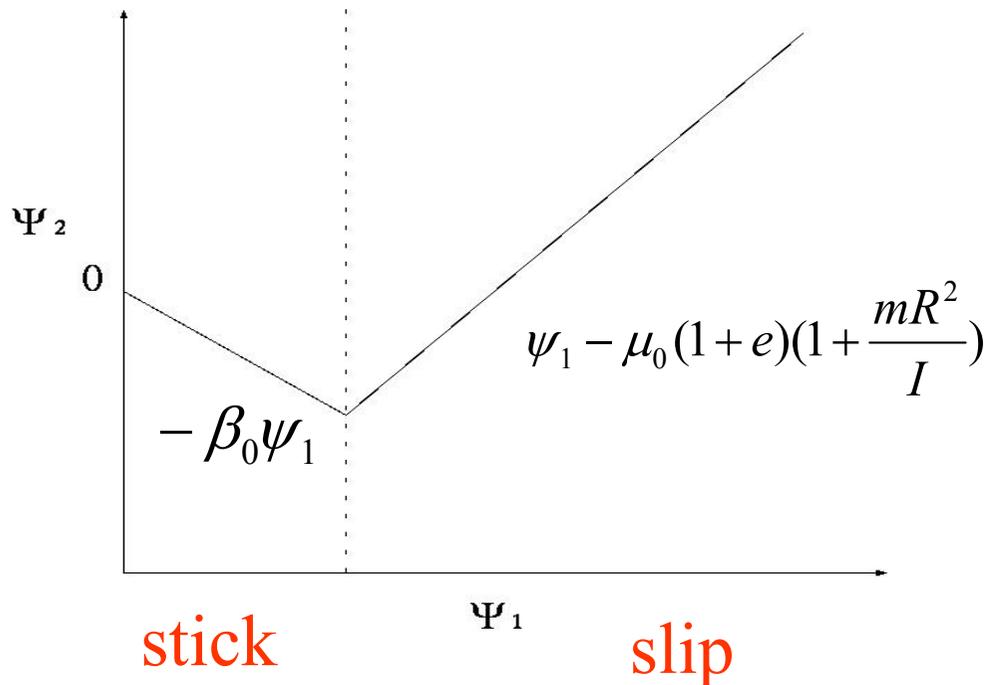
O.R. Walton and R.L. Braun:
J. of Rheol., 30 (1986) 949.

$$\beta \simeq \begin{cases} -1 + \mu_0(1 + e) \cot \gamma \left(1 + \frac{mR^2}{I}\right) & (\gamma \geq \gamma_0) & \text{slip} \\ \beta_0 & (\gamma \leq \gamma_0) & \text{stick} \end{cases}$$

μ_0 : 摩擦係数

e : はねかえり係数

$$1 + \frac{mR^2}{I} \begin{cases} = 3 \text{ (2D)} \\ = 7/2 \text{ (3D)} \end{cases}$$



$\cot \gamma$ VS. β

Outline of derivation of Walton's theory

- 衝撃 $\mathbf{J} = m(\mathbf{v}' - \mathbf{v})$
- トルクの変化 $\xrightarrow{\hspace{2cm}}$ $I(\boldsymbol{\omega}' - \boldsymbol{\omega}) = -\frac{d}{2}(\mathbf{n} \times \mathbf{J})$
- 接点の速度 $\mathbf{v}_c \equiv \mathbf{v} - \frac{d}{2}\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{n}$
- 法線方向の速度変化 $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}'_c) = -e(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_c).$
- 接線方向の速度変化 $(\mathbf{n} \times \mathbf{v}'_c) = -\beta(\mathbf{n} \times \mathbf{v}_c)$
- 滑っているときの摩擦法則 $|\mathbf{n} \times \mathbf{J}| = \mu_0(\mathbf{n} \cdot \mathbf{J})$
- これらに $\cot \gamma = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{J})/|\mathbf{n} \times \mathbf{J}|$ を
- 用いると

$$\mathbf{J} = -m(1+e)(\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_c) + \mu m(1+\beta) \cot \gamma [\mathbf{v}_c - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{v}_c) \mathbf{n}]$$

を得る。そこからWalton則が得られる。

Comparison between Walton's theory and an experiment

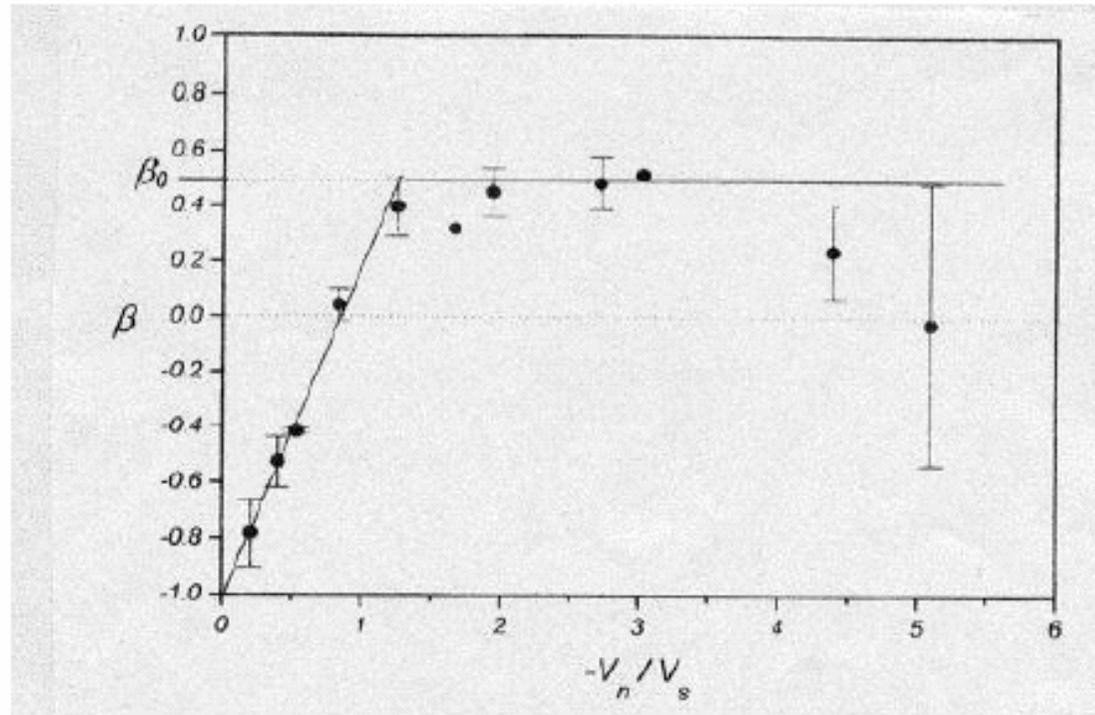
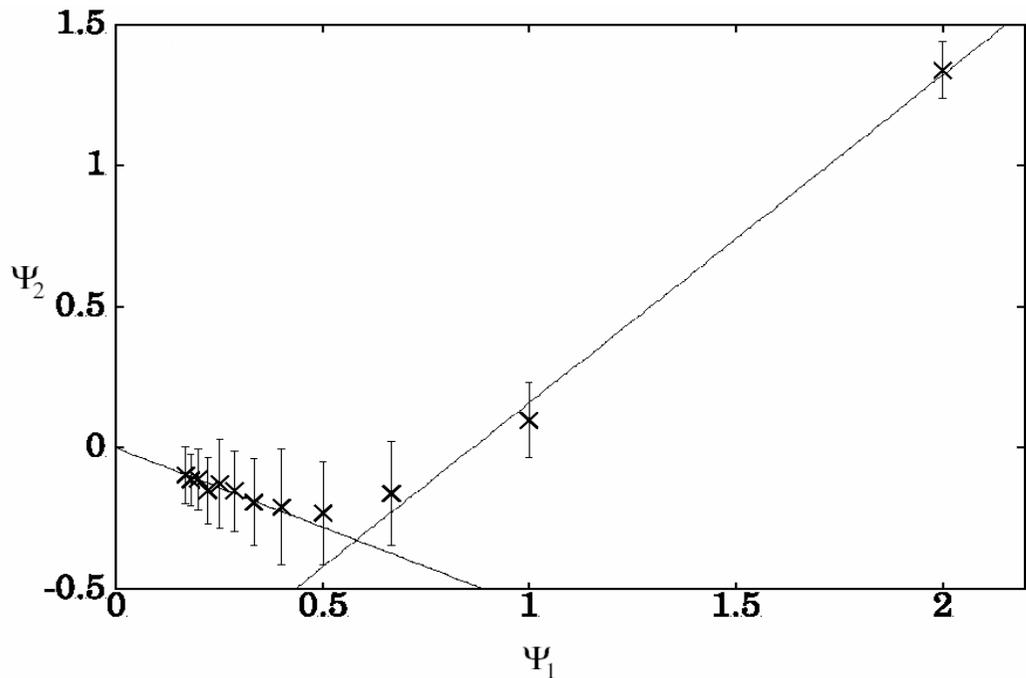


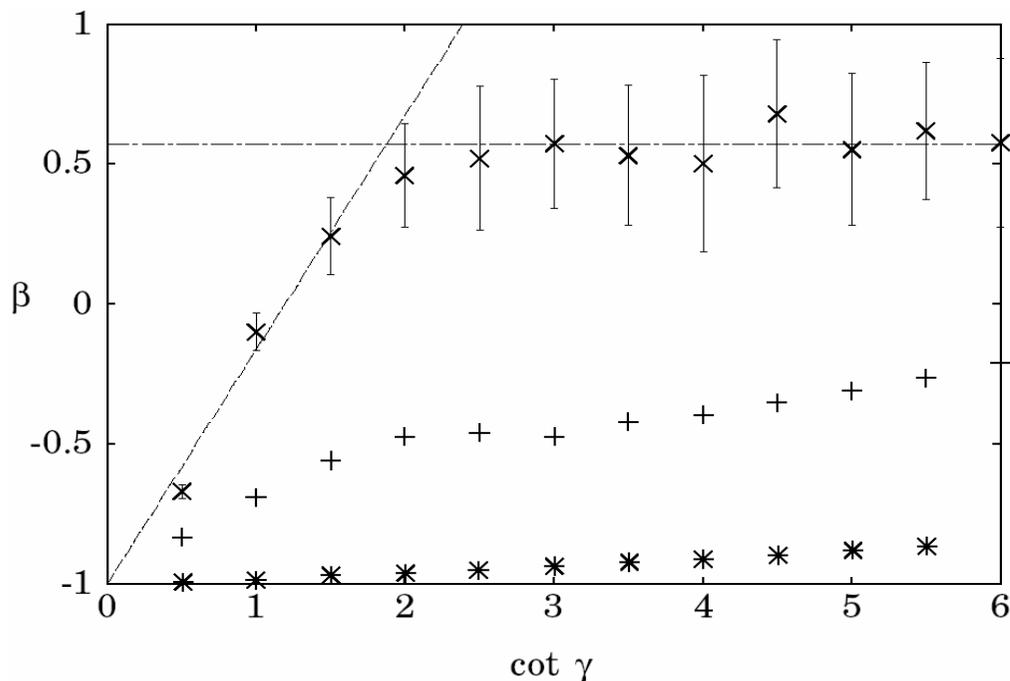
図 2.6: 接線方向のはねかえり係数 β の衝突角度依存性 (L. Labous, A. D. Rosato and R. N. Dave, Phys. Rev. E 56, 5717 (1997)). ここで v_n, v_s はそれぞれ衝突粒子速度の法線成分と接線成分.

図 2.6 は粒径の同じナイロン球の衝突実験から得られた β の衝突角度依存性である. 図から分かる通り上述の経験式はよく成り立っている. 一方で, このような現象論では μ_0, β_0 が何から決まるかについては答えられないし $\gamma \rightarrow 0$ の極限では法線方向の衝突になるので β はうまく定義できない筈である. 実際, 実験でも $\cot \gamma$ の大きなところでデータは β_0 からのずれが大きくなっている.



stick

slip



slip

stick

ψ_1 は $V_n = const.$
にして変化させる

- 実線はWaltonの理論式
- Waltonの理論との比較から、

$$\mu_0 \cong 0.18$$

$$\beta_0 \cong 0.56$$

以下の実験結果に近い値

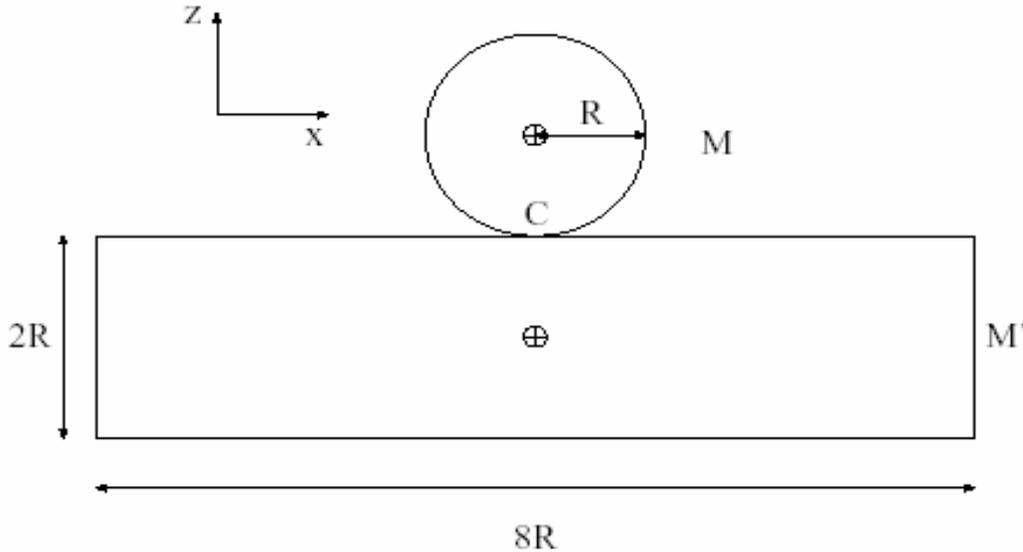
L.Labous et al.:

Phys. Rev. E, 56 (1997) 5717.

- 表面のroughnessが重要である。

Mawらによる衝突理論との比較

*N.Maw, J.R.Barber, and J.N.Fawcett(1976),
W.J.Stronge:ImpactMechanics(2000)*



接触点Cにx,z方向に歪みに比例する力が働く
 (ばね定数) $\frac{x}{z}$ 方向： κ 、 $\frac{z}{x}$ 方向： κ/η^2

ただしz方向には

t	0	→	t_c	→	t_f
stiffness	κ		κ/e^2		

$$\begin{pmatrix} \ddot{u}_x \\ \ddot{u}_z \end{pmatrix} = -m^{-1}\kappa \begin{bmatrix} \beta_x \eta^{-2} & 0 \\ 0 & \beta_z \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_x \\ u_z \end{pmatrix}$$

$$\beta_x = 1 + mr_z^2/M\hat{k}_r^2 + mr_z'^2/M'\hat{k}_r'^2$$

$$\beta_z = 1 + mr_x^2/M\hat{k}_r^2 + mr_x'^2/M'\hat{k}_r'^2$$

$$\beta_x = 3.02, \beta_z = 1$$

m:換算質量
 k_r :慣性半径

$$\Omega \equiv \sqrt{\frac{\beta_z \kappa}{m}} = \pi / 2t_c$$

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{\beta_x \kappa}{\eta^2 m}} = \frac{1}{\eta} \sqrt{\frac{\beta_x}{\beta_z}} \Omega = (\pi / 2\eta t_c) \sqrt{\beta_x / \beta_z}$$

$$\eta = \sqrt{(2-\nu)/2(1-\nu)}$$

ν :ポアソン比

歪の時間発展をx,z方向について解く

$v_z + \dot{u}_z(t) = 0$ とし、 $t_c \leq t \leq t_f$ の範囲でfrequencyが Ω/e になることに注意して、境界条件 $v_z(t_c) = 0$ $v_z(t_f) = -ev_z(0)$ で解くと、

$$v_z(t) = \begin{cases} v_z(0) \cos \Omega t & 0 \leq t \leq t_c \\ e_* v_z(0) \cos\left(\frac{\Omega t}{e_*} + \frac{\pi}{2}(1 - e_*^{-1})\right) & t_c \leq t \leq t_f \end{cases}$$

Z方向の成分

Quantity	Compression ($0 \leq t \leq t_c$)	Restitution ($t_c \leq t \leq t_f$)
Displacement	$u_z(t) = -\Omega^{-1}v_z(0) \sin \Omega t$	$u_z(t) = -e_*^2 \Omega^{-1}v_z(0) \sin\left(\frac{\Omega t}{e_*} + \frac{\pi}{2}(1 - e_*^{-1})\right)$
Velocity	$v_z(t) = v_z(0) \cos \Omega t$	$v_z(t) = e_* v_z(0) \cos\left(\frac{\Omega t}{e_*} + \frac{\pi}{2}(1 - e_*^{-1})\right)$
Force	$F_z(t) = -\frac{m\Omega v_z(0)}{\beta_z} \sin \Omega t \geq 0$	$F_z(t) = -\frac{m\Omega v_z(0)}{\beta_z} \sin\left(\frac{\Omega t}{e_*} + \frac{\pi}{2}(1 - e_*^{-1})\right) \geq 0$
Impulse	$p_z(t) = -\frac{mv_z(0)}{\beta_z} (1 - \cos \Omega t)$	$p_z(t) = -\frac{mv_z(0)}{\beta_z} \left(1 - e_* \cos\left(\frac{\Omega t}{e_*} + \frac{\pi}{2}(1 - e_*^{-1})\right)\right)$

時刻 t_1, t_2, t_3 の導入

γ 大

1. 時刻 $t = 0$ で stick し、 $t = t_1$ で slip し始める。
2. 時刻 $t = 0$ で slip し、 $t = t_2$ で stick するが、 $t = t_3$ で再び slip し始める。
3. ずっと slip。

X方向の成分

$$u_x(t) = u_x(t_2) \cos \omega(t - t_2) - \omega^{-1} v_x(t_2) \sin \omega(t - t_2)$$

$$v_x(t) = \omega u_x(t_2) \sin \omega(t - t_2) + v_x(t_2) \cos \omega(t - t_2)$$

$$F_x(t) = m \beta_x^{-1} \omega^2 u_x(t_2) \cos \omega(t - t_2) - m \beta_x^{-1} \omega v_x(t_2) \sin \omega(t - t_2) \quad t \geq t_2.$$

時刻 t_1, t_2, t_3 の求め方

衝突点 C にかかる力の両成分の比が、摩擦係数に等しくなる時刻を求める。

$$\frac{|F_x(t_1)|}{\mu F_z(t_1)} = \begin{cases} \frac{1}{\eta^2} \frac{v_x(0)}{\mu v_z(0)} \frac{\Omega \sin \omega t_1}{\omega \sin \Omega t_1} = 1 & 0 \leq t_1 < t_c \\ \frac{1}{\eta^2} \frac{v_x(0)}{\mu v_z(0)} \frac{\Omega \sin \omega t_1}{\omega \sin(\frac{\Omega t_1}{e_*} + \frac{\pi}{2}(1 - e_*^{-1}))} = 1 & t_c \leq t_1 < t_f. \end{cases}$$

3つの衝突角度領域の境界

$t_1 > 0$ で $t_1 \rightarrow 0$ の極限をとれば、上の式から、

$$\begin{aligned} \frac{v_x(0)}{v_z(0)} &< \mu \eta^2, \\ &= \tan \gamma \end{aligned}$$

よってこの衝突角度領域で常にstickした状態になる

μ : 摩擦係数	β_x, β_z : 衝突2物体で決まる定数
$\eta = \sqrt{(2-\nu)/2(1-\nu)}$	e : はねかえり係数

Results

(i) $1/\mu\eta^2 < \cot \gamma$:

$$\beta = -\cos \omega t_1 - \mu \frac{\beta_x}{\beta_z} e \left[1 + \cos \left(\frac{\Omega t_1}{e} + \frac{\pi}{2} (1 - e^{-1}) \right) \right] \cot \gamma$$

(ii) $\beta_z/\beta_x\mu(1+e) < \cot \gamma < 1/\mu\eta^2$:

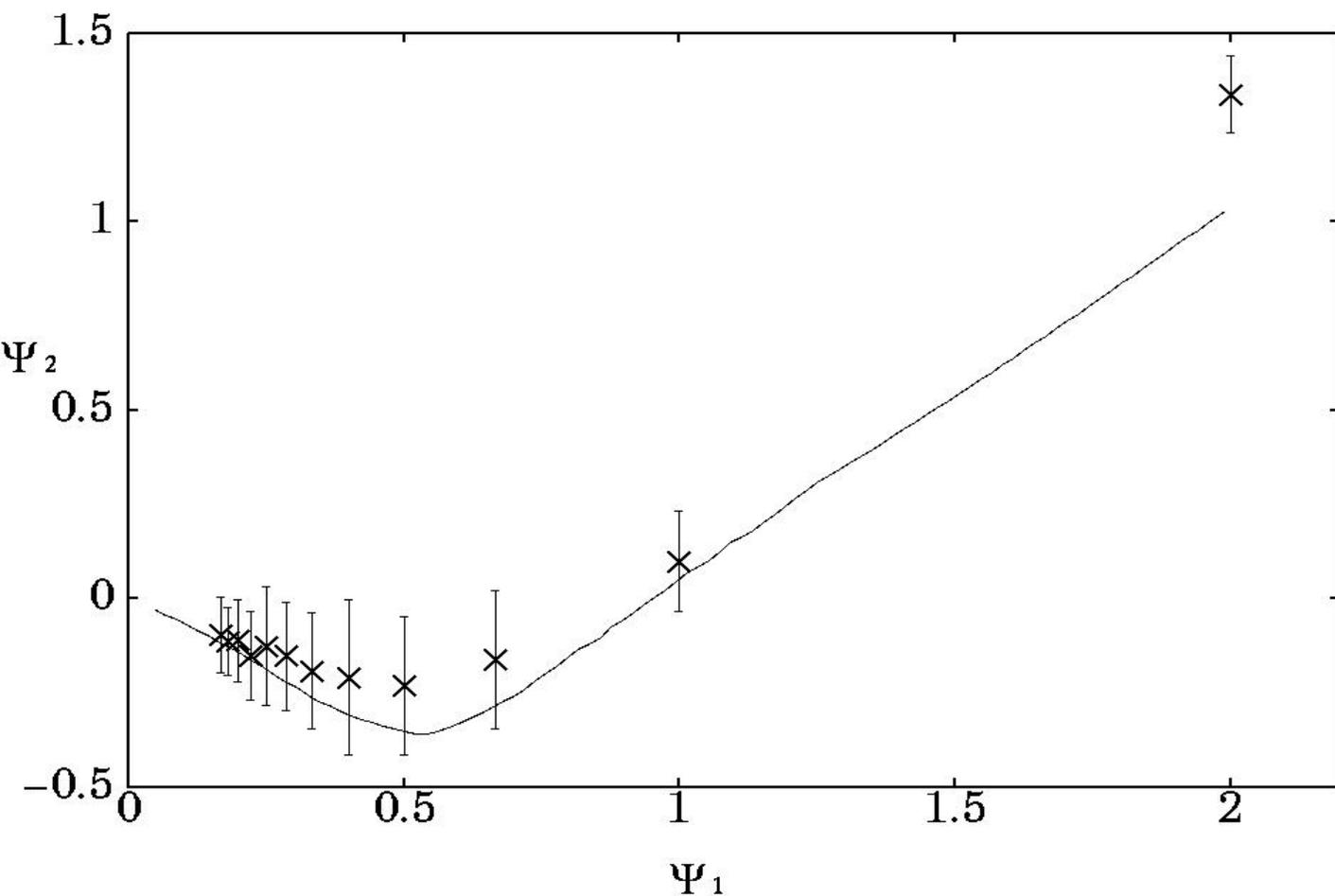
$$\begin{aligned} \beta = & -\cos \omega(t_3 - t_2) - \mu \frac{\beta_x}{\beta_z} [\cos \omega(t_3 - t_2) - \cos \Omega t_2 \cos \omega(t_3 - t_2) \\ & + \frac{\Omega}{\omega} \sin \Omega t_2 \sin \omega(t_3 - t_2) + e + \cos \Omega t_3] \cot \gamma \end{aligned}$$

(iii) $\cot \gamma < \beta_z/\beta_x\mu(1+e)$:

$$\beta = -1 + \mu \frac{\beta_x}{\beta_z} (1+e) \cot \gamma$$

Maw理論との比較

$$\eta \simeq 1.015 (\Leftrightarrow \nu = 0.075), \mu = 0.18$$
$$e = 0.8(\text{fixed value})$$



eは $0 \leq \psi_1 \leq 0.67$ での
平均値を用いた。

μ はWalton理論との
比較から決めた
($\mu = \mu_0$)

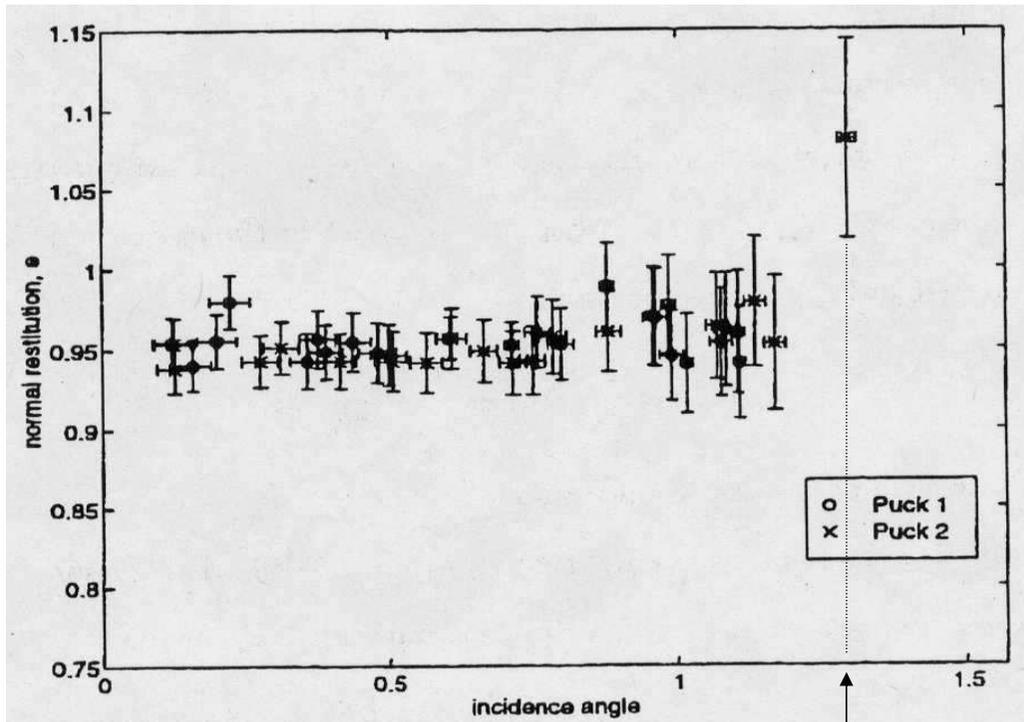
IV-C. Anomalous behavior of $e > 1$

- はねかえり係数が1を越える現象
- 斜め衝突では別に不思議ではない
 - 普遍的な現象(例:水切り)
- ミクロな散逸とマクロな散逸の関係が問題になる。

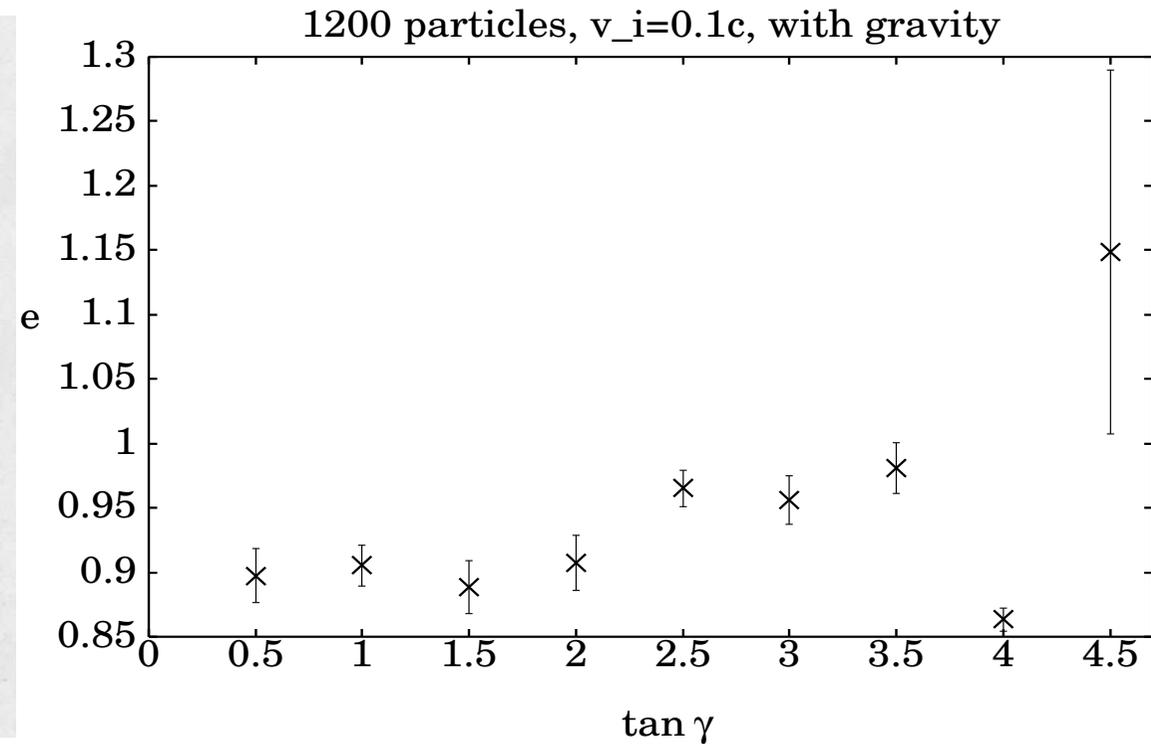
Comparison of 2D simulation and 2D experiment

Calsamiglia et al: J.Appl.Mech. 66 (1999) 146.

Our result



tan 4.5 くらい

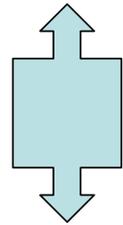


$$k_1^{\text{壁}} = 10 \times k_1^{\text{円盤}}$$

壁が硬いと表面突起に散乱され $e>1$ となりうる

☆ $e > 1$ のシミュレーション(2)

$k_1^{\text{壁}} = 10^{-2} \times k_1^{\text{円盤}} \dots$ 壁の方を軟らかくする。



(cf. 実験に対応)

衝突速度 $V = 0.1c$ に固定して、 ψ_1 を変化させる。

ただし 実験より遙かに高速衝突

壁の底面は固定境界

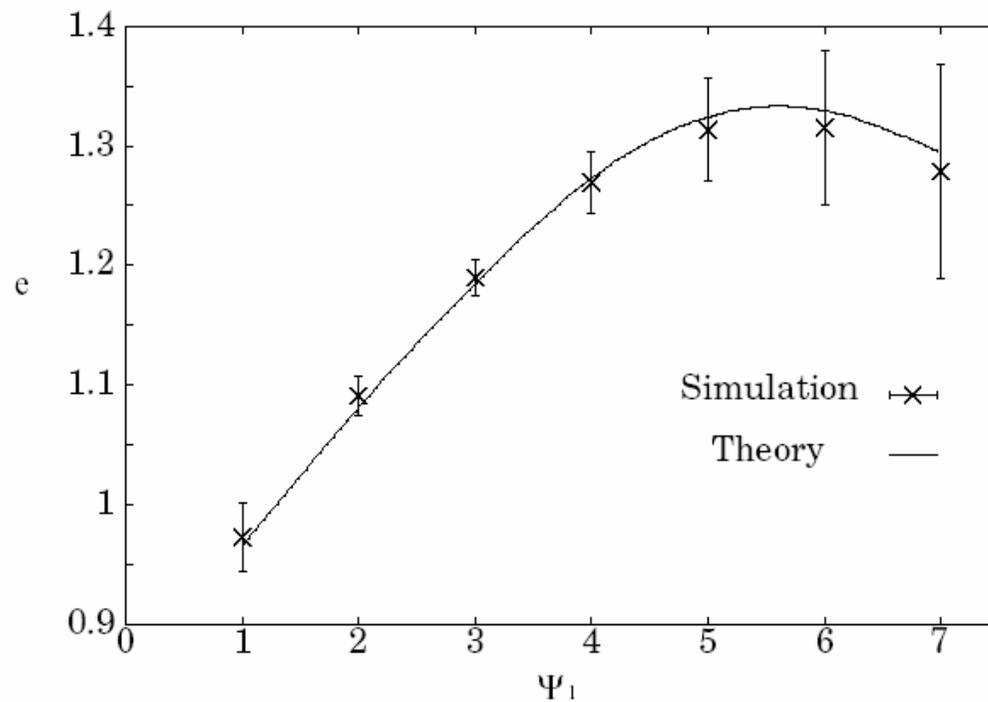
重力はなし

シミュレーション結果

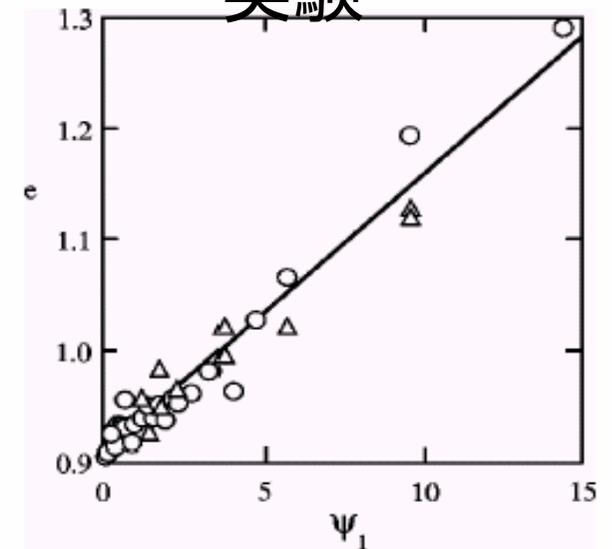
円盤と壁の密度比を1にして計算を行った。

ρ_d : diskの密度 ρ_w : 壁の密度

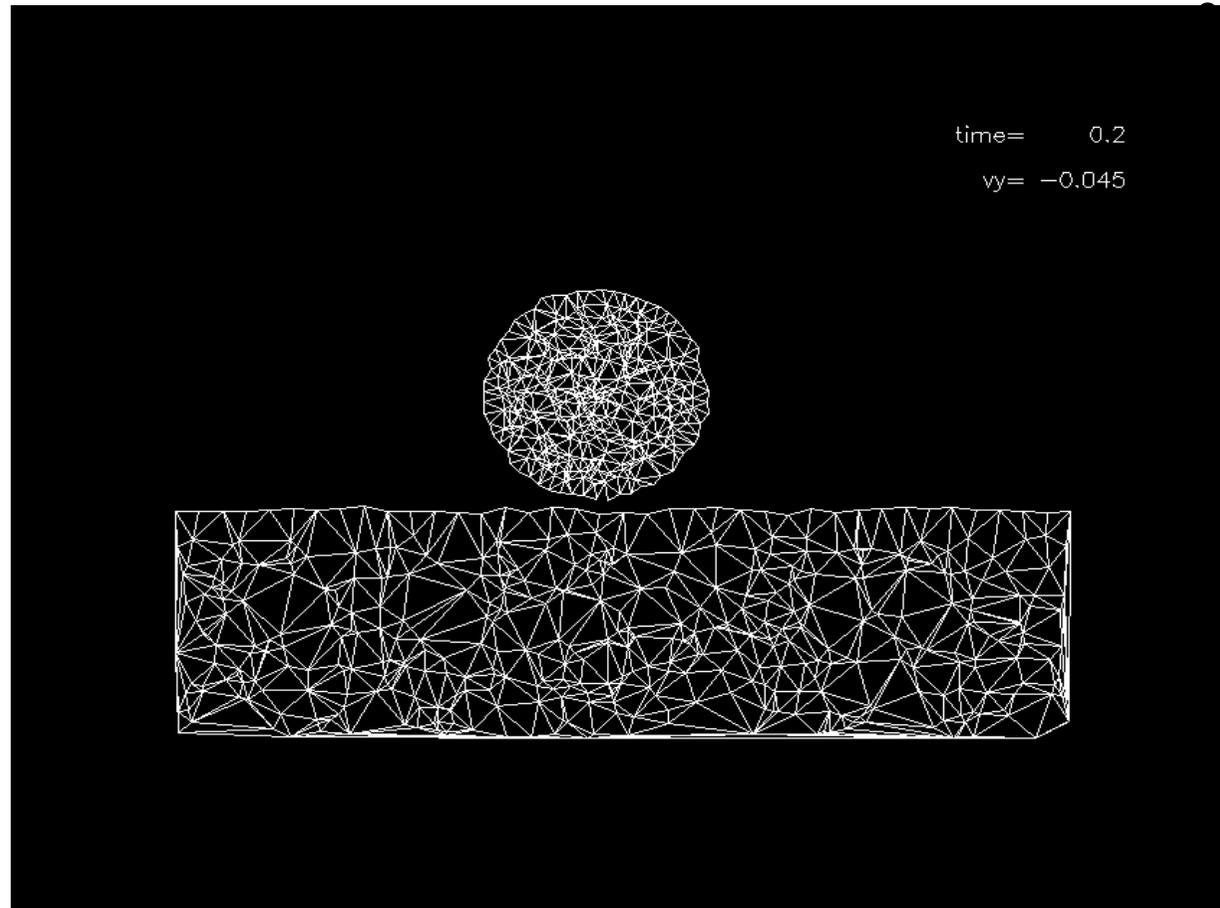
シミュレーション



実験

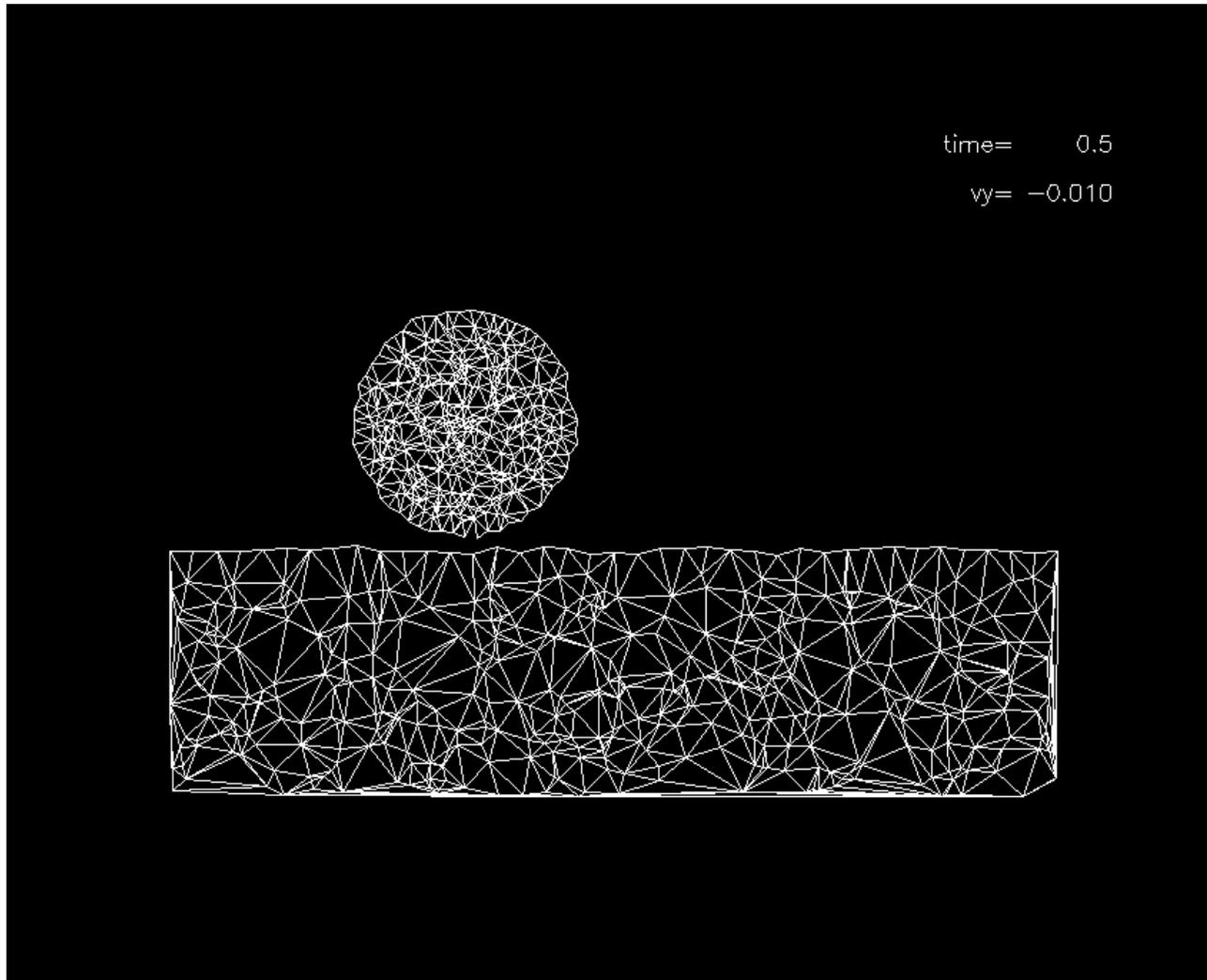


Impact with intermediate γ ($\tan \gamma = 2$)



The disk is bounded on a soft wall. It is just like an impact of a stone on water surface.

Impact with large γ ($\tan \gamma = 10$)



- Disk slips on a wall. No reflection for normal direction.

解析

- 重要だと思われる要因:

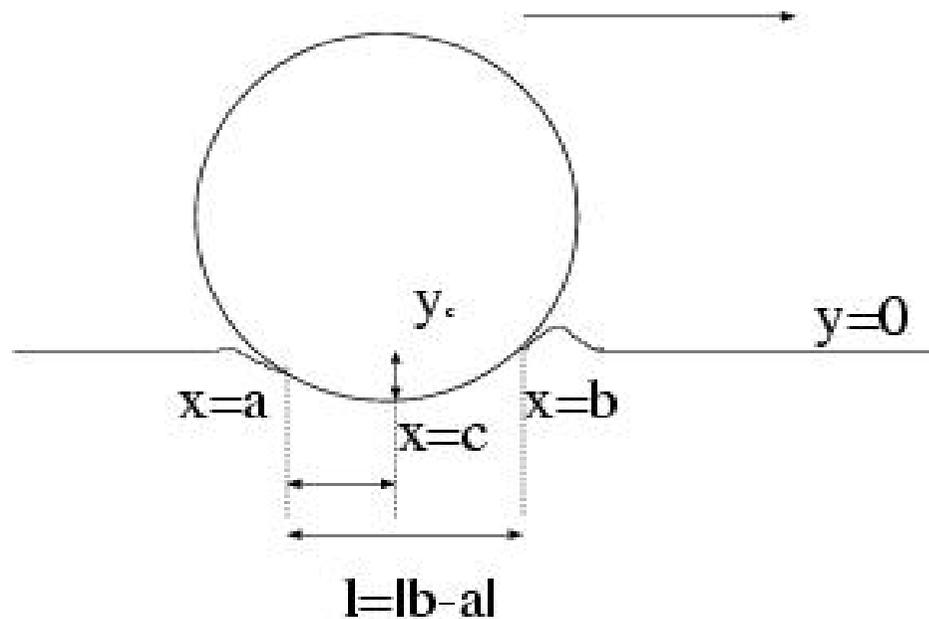
壁の局所的な変形と、それに伴うはねかえり係数の補正

- 弾性理論に基づいて壁の局所変形を記述し、それによるはねかえり係数の補正を考える。

壁の局所変形

D. A. Hills *et al.*: Mechanics of Elastic Contacts、ガーリン『弾性接触論』

$f(x)$ で表される円盤下半分が半平面に押し付けられた
ときの接触面両端の座標 $\rightarrow x=a, b$



c : 頂点の x 座標

diskは2次関数で近似

$$f(x) = \frac{(x-c)^2}{2R} + \delta h$$

$$\frac{c}{l} = 1 - \frac{1}{\pi} \tan^{-1} \frac{1-2\nu}{\mu(2-2\nu)}$$

ν : ポアソン比

μ : 摩擦係数

$$\tan \alpha \equiv \frac{f(b) - f(a)}{l}$$

と定義する。 α は摩擦によって変形した壁の有効傾き α による e の補正は、

$$e = \frac{e^\alpha + \Psi_2^\alpha \tan \alpha}{1 - \Psi_1^\alpha \tan \alpha}, \quad \text{となる。ただし} \quad e^\alpha = -u_n^{\alpha'} / u_n^\alpha,$$

また座標変換から $\Psi_1^\alpha = (\Psi_1 - \tan \alpha) / (1 + \Psi_1 \tan \alpha)$, $\Psi_2^\alpha = \Psi_1^\alpha - 3(1 + e^\alpha)\mu^\alpha$

c はシミュレーションのデータから、 $c \sim 0.56R$

さらに $\mu = |\mathbf{n} \times \mathbf{J}| / (\mathbf{n} \cdot \mathbf{J}) = |J_t| / |J_n|$ に注意して

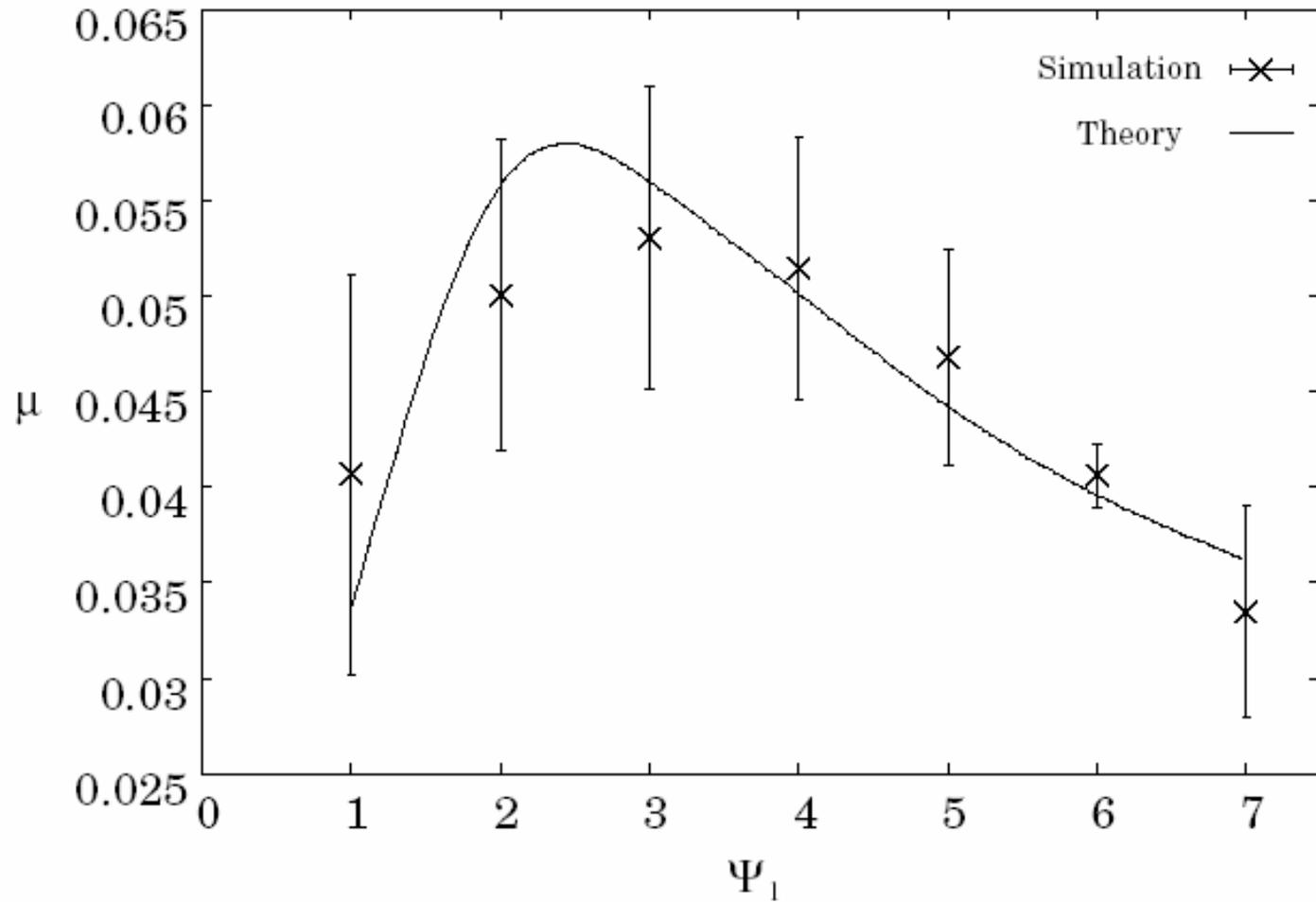
$$\tan \alpha = \frac{1 - 2\theta}{2 - 2\theta} \frac{|x_c - x_a|}{R}, \quad \mu = \frac{\mu^\alpha - \tan \alpha}{1 + \mu^\alpha \tan \alpha}$$

を用いている。ここで

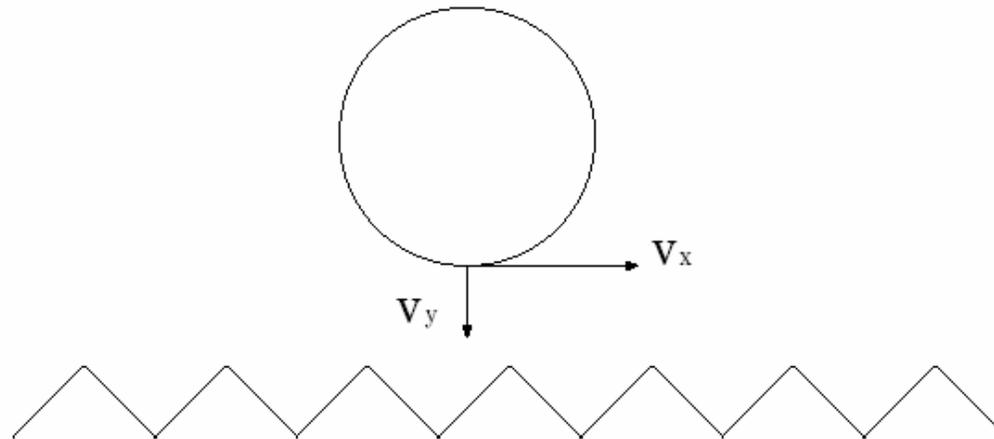
μ^α は掘り起こしが無いときの摩擦係数。

Ψ_1 vs. μ

$\mu = |\mathbf{n} \times \mathbf{J}| / (\mathbf{n} \cdot \mathbf{J})$ で計算可能



Ψ_1 vs. μ のメカニズム



- 突起と円盤が衝突した際にエネルギーロスがある。
- エネルギーロス/元のエネルギーは突起に衝突する毎に一定->何回衝突するかでロスが分かる。
- ロスから横方向の衝撃が分かり、そこから摩擦係数が
- 分かる。

Phenomenology (1)

We assume that the tangential velocity $v_t^{(i-1)}$ changes to $v_t^{(i)} = (1 - \eta)v_t^{(i-1)}$ when the disk hit the i -th asperity. Thus, if the disk contact N asperities during the impact, the tangential speed at the release point becomes $v_t(\tau_c) = v_t^{(N)} = (1 - \eta)^N v_t(0)$. Here we estimate the number of contacted asperities during the collision as $N = \rho l_{sl}$, where ρ is the number of the asperities in a unit length on the surface and l_{sl} is the length of sliding which can be evaluated as $l_{sl} = v_t(0)\tau_c$ with $\tau_c = \pi(R/c)\sqrt{\ln(4c/v_n(0))}$ [6]. Thus, the tangential impulse $J_t \equiv \mathbf{J} \cdot \mathbf{t}$ is approximated by

$$J_t = M\{(1 - \eta)^{\rho l_{sl}} - 1\}v_t(0) \simeq -\eta M \rho l_{sl} v_t(0) \quad (10)$$

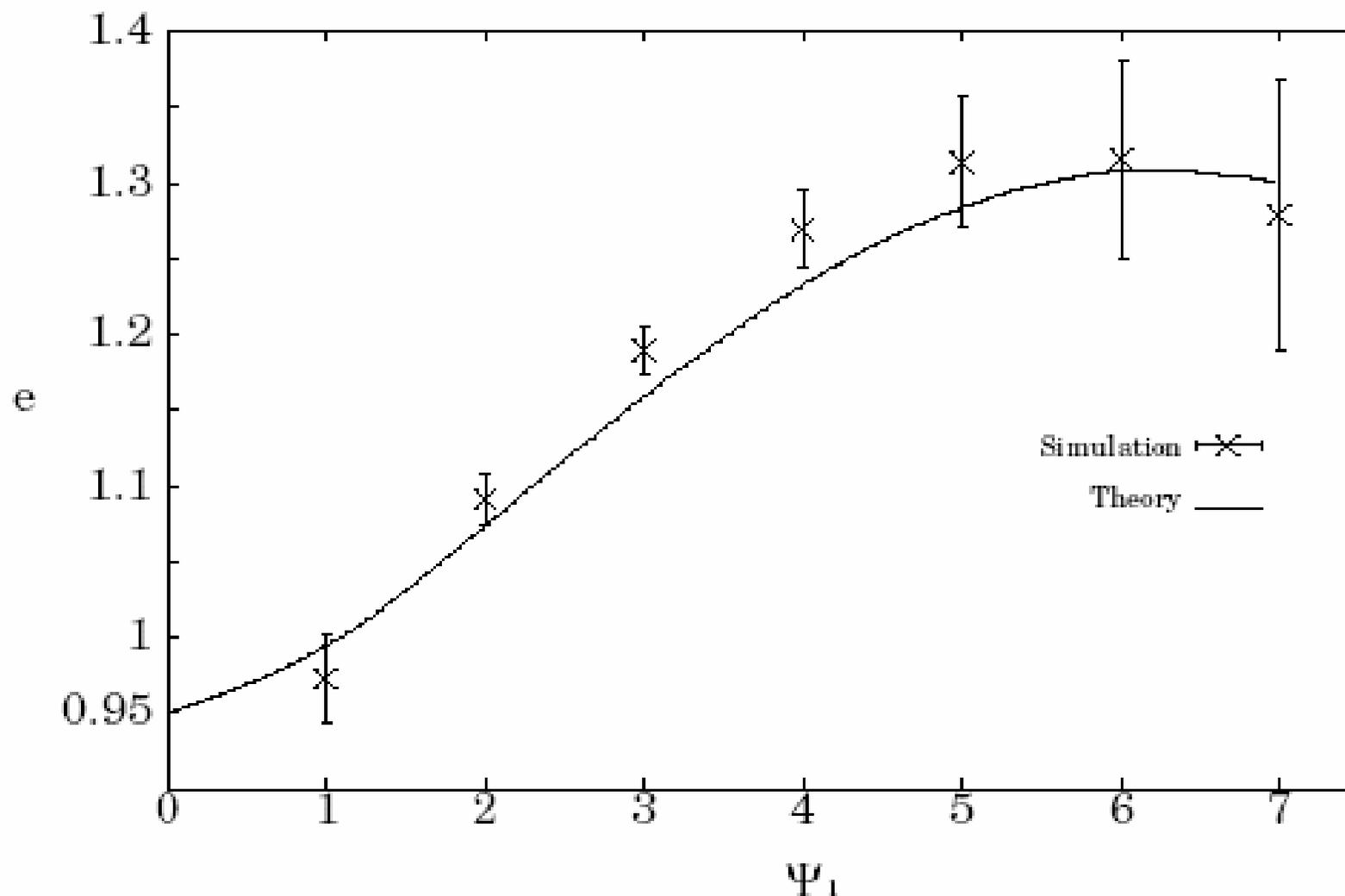
Phenomenology (2)

where we assume small η . Now, we should answer the question how to determine η . When the impact velocity is large enough, η becomes smaller, because the asperities are broken down when the disk hit them. Therefore we may assume the form $\eta = \eta_0 / (1 + \beta v_t^2(0) / v_n^2(0)) = \eta_0 / (1 + \beta \Psi_1^2)$ with the introduction of the dimensionless parameters η_0 and β . Taking into account $J_n \equiv \mathbf{J} \cdot \mathbf{n} = -M(1 + e)v_n(0)$ and the definition of $\mu = J_t / J_n$ we obtain

$$\mu = \frac{\pi \eta_0 \rho R}{1 + e} \frac{\Psi_1}{1 + \beta \Psi_1^2} \sqrt{\frac{\Psi_1^2}{1 + \Psi_1^2} \ln \left(40 \sqrt{1 + \Psi_1^2} \right)} \frac{|\mathbf{v}(0)|}{c}. \quad (11)$$

Here we use $\cos \gamma = \sqrt{1 / (1 + \Psi_1^2)}$, $\sin \gamma = \sqrt{\Psi_1^2 / (1 + \Psi_1^2)}$. We adopt numerical results for the value

Ψ_1 vs. e (跳ね返り係数)



現象論で結果を再現



メカニズムの本質は把握できた

Discussion

- Static theory of elasticityが有効か？を現在チェック中
- 内部散逸の効果： 何故バネビーズモデルでは散逸をとらえきれないのか。当然という気もするが、物足りない。
- 初速の効果。実験に比べて速い衝突である。そのためにはねかえり係数のピークが出る。遅い衝突ではピークがlarge γ にずれる。定量的な見積もりはまだ。
- 3次元効果。シミュレーションはできなくはないが大変。
- 当初の目的に比べてOutputが物足りない。

非弾性衝突のまとめ

ランダム格子による衝突モデルで、2次元の斜め衝突シミュレーションを行った。

ランダム格子による衝突モデルでも、衝突角度と、円盤と壁の硬さの比によっては、はねかえり係数は1を超えることがある。

→ただし実験の様に線形には増加しない

→衝突角度が大きいと壁が円盤を表面でキャッチできない

弾性論から壁の局所変形による、衝突角度補正を考えた

→はねかえり係数の補正式に代入

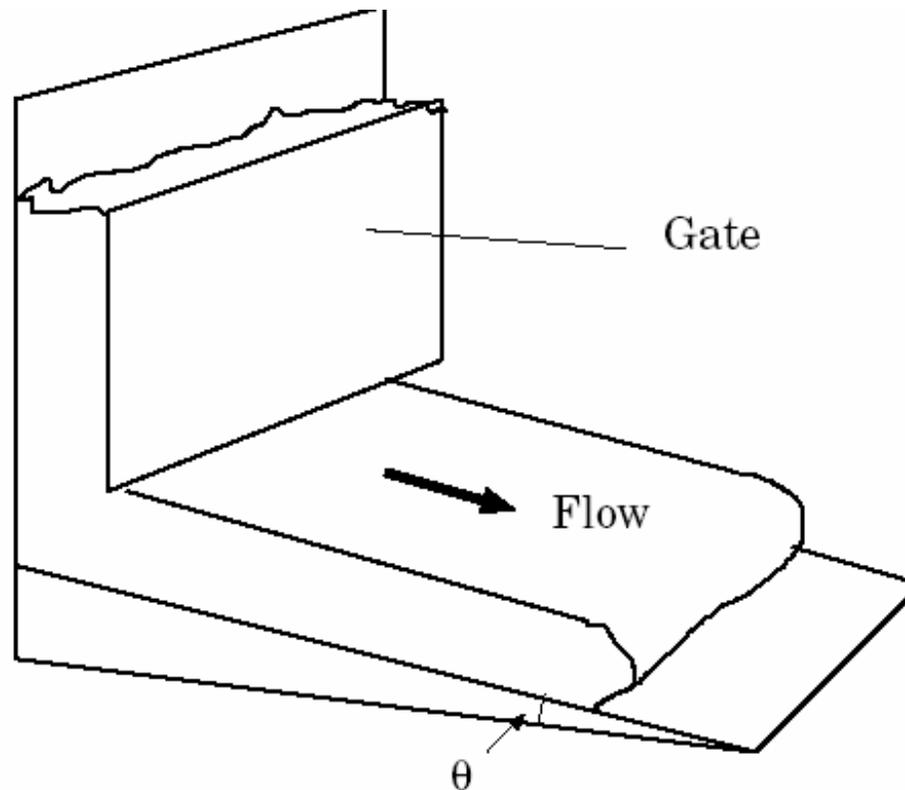
→1を越える e の定性的振る舞いは再現

3日目の概要

- 非弾性衝突の項目は思いの外早く紹介が終わった。
- 非弾性気体も同様
- より粉体らしい現象の紹介も必要
- 遅い流れと静力学の問題を紹介する。

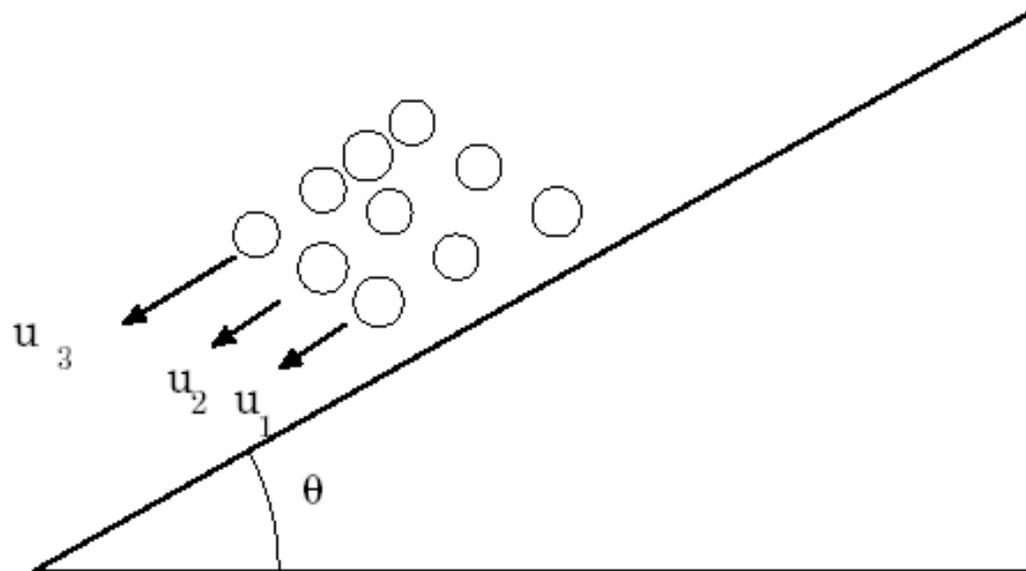
遅い流れ

- 斜面上の流れでは粒子が互いに接触しながらゆっくりと流れる。
- 粒子は流れ方向に拘束されて準1次元的な流れとなっている。
- そこではNavier-Stokes流体とは大きく異なる性質を持つ。



Bagnold's scaling

このような流れを実現するために実験的では表面が粗い斜面を用意して、粒子をゲートでせきとめておく。その状態で図4.1のようにゲートを開き、一挙に斜面上に粒子を流す。このとき傾斜角がきつすぎるとどんどん粒子は加速していくが傾斜角が浅すぎると粒子の流れは止まってしまう。中間的な傾斜角で粒子が定常的に流れる。斜面の上流側にホッパーを置き、そこから粒子を流す方法は工業的にもよく用いられるが、その場合は流れている領域と静止している領域に分離するので話が複雑になる。一方、ゲートを用いた方法では粒子が流れる場合は全て流れ、静止している場合は全て止まる。その点でゲートを用いることで理想化された状況を作り出した事になる。尚、全ての粉体層が流れるということは斜面と粉体層の底に破断面があるということの意味する。この事実は後で説明する現象論の理解の助けになる。



Bagnold's scaling (2)

壁と粒子の衝突による衝撃は

$$J_t = \mu_0 m (1 + e) \cot \gamma (u_{i+1} - u_i)$$

接線応力は単位面積あたりに働く力だから τ は速度差に反比例するので

$$\sigma_{xz}(z) \simeq \mu_0 d^2 n(z) m (1 + e) \cot \gamma \left(\frac{du(z)}{dz} \right)^2$$

(4.3) 式で求めた構成方程式を積分してみよう. σ_{xy} は粒子がない表面 $z = h$ ではゼロになるので, 密度を $z < h$ で一定とすると $\sigma_{xy} = \rho g \sin \theta (h - z)$ となる. ここで $\rho = nm$ は質量密度である. この式と (4.3) 式を等しく置くことで

$$\left(\frac{du(z)}{dz} \right)^2 \simeq \frac{g \sin \theta \tan \gamma}{\mu_0 (1 + e) d^2} (h - z) \quad (4.4)$$

を得る. この式を n を定数と置き $z = 0$ で速度 $u = 0$ の境界条件下で積分すると

$$u(z) = \frac{2}{3} \left(\frac{g \sin \theta \tan \gamma}{\mu_0 (1 + e) d^2} \right)^{1/2} h^{3/2} \left[1 - \left(\frac{h - z}{h} \right)^{3/2} \right] \quad (4.5)$$

Scaling in surface flow profile

$$\frac{u}{\sqrt{gh}} = \frac{h}{h_0(\theta)} \quad (4.6)$$

となっている. ここで $h_0(\theta) = \frac{3d}{2} \sqrt{\mu_0(1+e)/\sin\theta \tan\gamma}$ である. 後述のように (4.6) 式はポルキン (Pouliquen) [23] の報告した実験式と同じ恰好をしている.

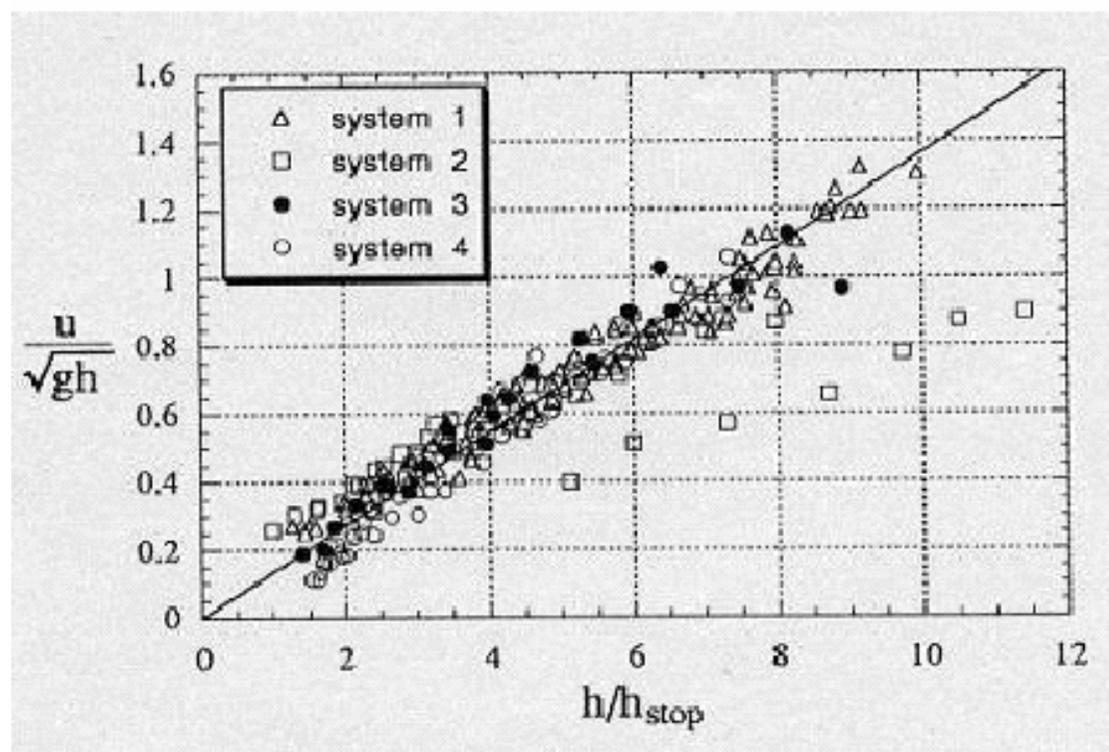


図 4.3: 文献 [23] による層高と速度のスケーリングプロット. 粒径や傾斜角に依存せずほぼ (4.7) 式が成立する.

4.2 安息角

(Angle of repose)

図 4.3 に示す様にボルキンは、彼自身の実験データから (4.6) 式のかわりに

$$\frac{u}{\sqrt{gh}} = \beta \frac{h}{h_{stop}(\theta)} \quad (4.7)$$

を得た. ここに現われた $h_{stop}(\theta)$ は角度 θ を固定したときに斜面上に流れが起きない最大の層高であり, β は傾斜角度 θ と粒径に依存しない定数で実験では 0.136 という値が報告されている. 彼はこの $h_{stop}(\theta)$ を決める実験式として

$$\tan \theta = \tan \theta_b + (\tan \theta_s - \tan \theta_b) \exp\left[-\frac{h_{stop}(\theta)}{d\delta}\right] \quad (4.8)$$

を提唱している. ここで θ_s, θ_b はそれぞれ $h_{stop}(\theta) \rightarrow \infty$ と $h_{stop}(\theta) = 0$ となるときの傾斜角 θ であり, $\tan \theta_s, \tan \theta_b$ はそれぞれ表面とバルク領域の静止摩擦係数を表している. また δ は粒径に依存した 1-3 程度の無次元数である. またシミュレーションによると高さ z の位置の粉体層内部の静止摩擦係数 $\mu \equiv \tan \theta$ は $\mu_b \equiv \tan \theta_b, \mu_s \equiv \tan \theta_s$ を用いて

$$\mu = \mu_b + (\mu_s - \mu_b) \exp\left[-\frac{h_{stop}(\theta) - z}{d\delta}\right] \quad (4.9)$$

と表現できる事を示唆している. また粒子を流した状態から静止状態が得られることからここで観測された角度 θ は層高 $h_{stop}(\theta)$ のときの安息角といえる.

The critical line between no flow region and flow region

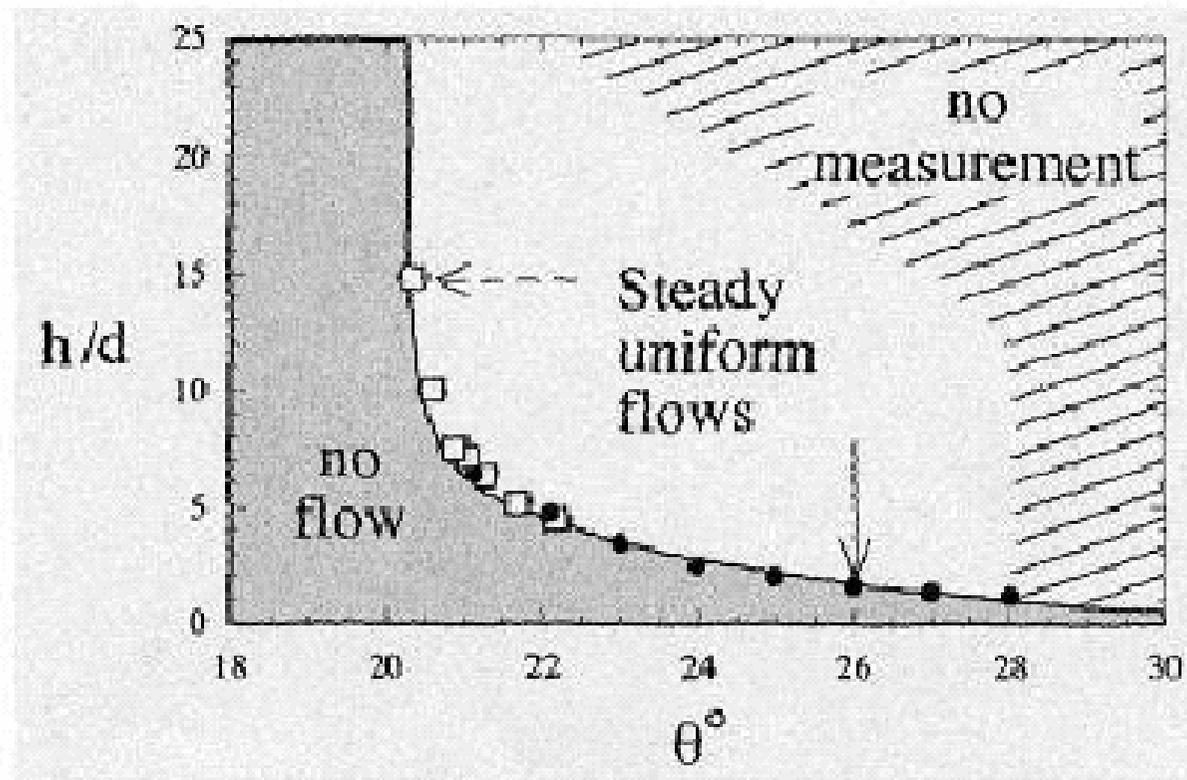


図 4.4: ポルキンの実験による最大静止層高と角度の関係 [24]. 実線が (4.8) 式を表す.

Pouliquenの実験の解釈

に働く最大静止摩擦係数に他ならない. そこで表層からの深さを $H \equiv h_{stop}(\theta) - z$ とおき境界条件を $H = 0$ で $\mu = \mu_s$ と仮定して (4.9) 式を H で微分してみる. すると

$$\frac{d\mu}{dH} = \frac{1}{d\delta}(\mu_b - \mu) \quad (4.10)$$

を得る. この式は最大静止摩擦係数 μ が一層のときの最大値 μ_s から深くなるにつれて μ_b に近付くことを表現している.

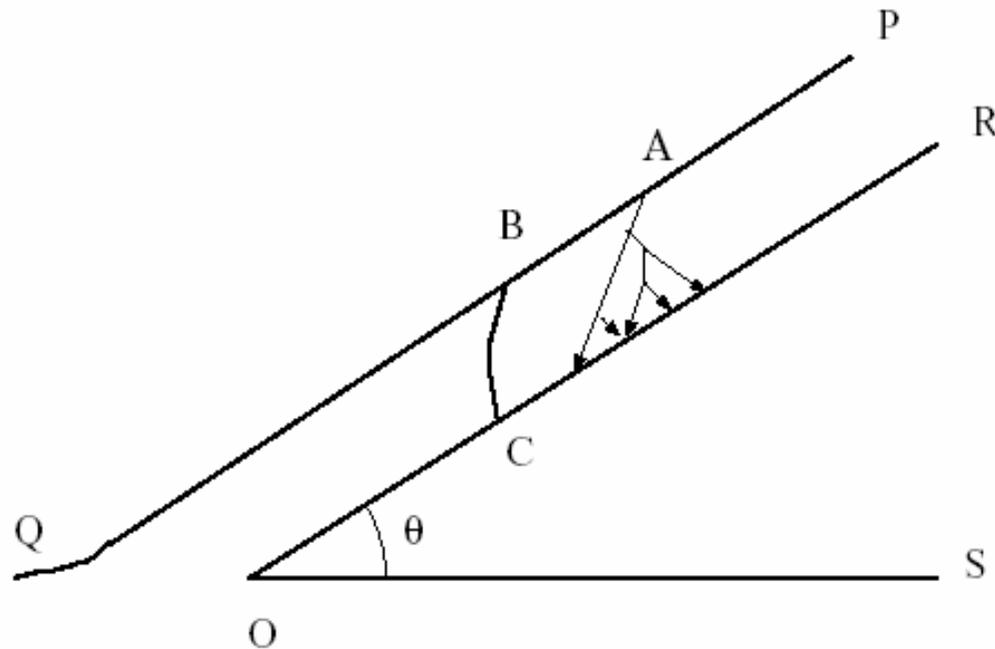


図 4.5: 応力鎖による摩擦の概念図. ROSは斜面, PQは粉体層表面を表す. Aにおかれた粒子から応力鎖は枝状に発達する. その平均が主軸と考えられBCのように主軸は曲がる.

解釈(2)

- 破断しやすい方向は斜面上では斜面に沿ってであり、応力鎖が分裂したときに斜面に沿った方向に分裂すると破壊限界を越えるので斜面が崩落する。したがって主軸が曲がる。
- 摩擦係数の低下は応力主軸が曲がることで理解できる。
- と考えている。

VI. 静力学

- 応力鎖の統計力学は重要。粉体らしさが最も顕著に現れる。
- 横壁との摩擦も重要。(Janssen's law)

壁面と粉体との摩擦係数を μ_w とすれば, $\sigma_{zx} = \mu_w \sigma_{xx} = \mu_w K_a \sigma_{zz}$ であるから
さ h での鉛直圧 $p_v (= \sigma_{zz})$ および水平圧 $p_h = \sigma_{xx}$ は

$$p_v = \frac{\rho g W}{2\mu_w K_a} \left[1 - \exp\left(-\frac{2\mu_w K_a}{W} h\right) \right] + p_0 \exp\left(-\frac{2\mu_w K_a}{W} h\right), \quad p_h = K_a p_v$$

応力分布は非自明

- 砂山の頂点の直下が圧力の極大とは限らない。
- 履歴依存

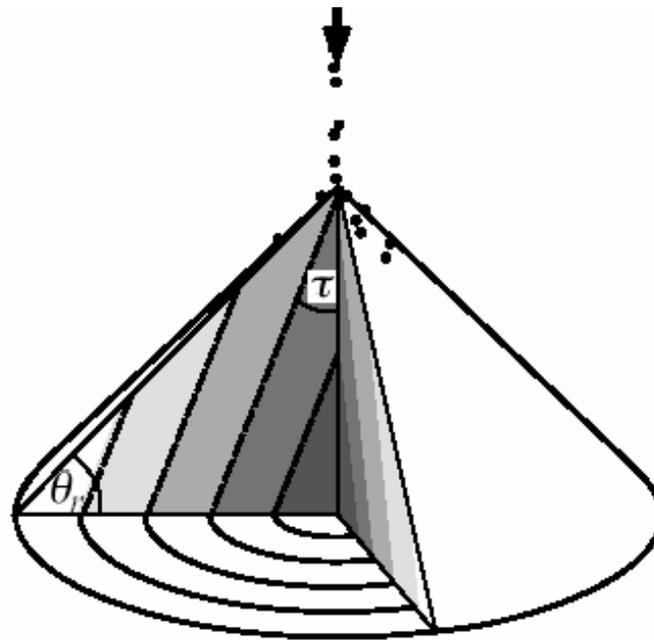


図 8: エドワーズモデルと FPA モデルの概念図 [38, 39]. 点線は, エドワーズモデルでは重さの伝わる方向, FPA モデルでは応力テンソルの主軸の方向を表す. 点線の傾き τ は, エドワーズモデルでは不定だが, FPA モデルでは, 応力のバランスの式と表面での限界応力状態の仮定を用いて, $\tau = (\pi - 2\theta_r)/4$ となる. ただし, θ_r は, 安息角である.

FPA model and dip

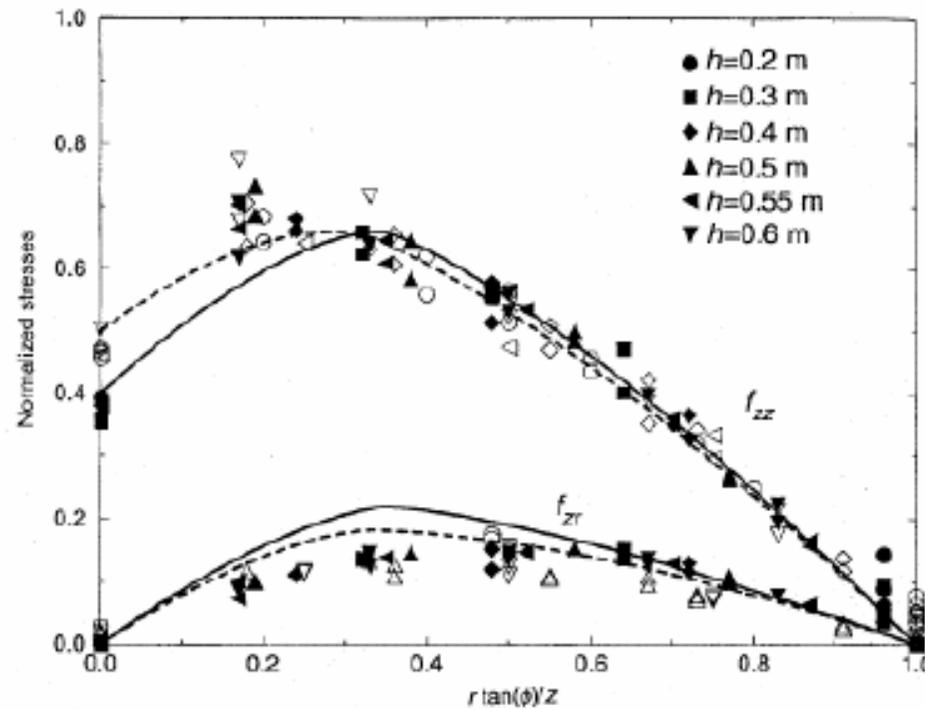
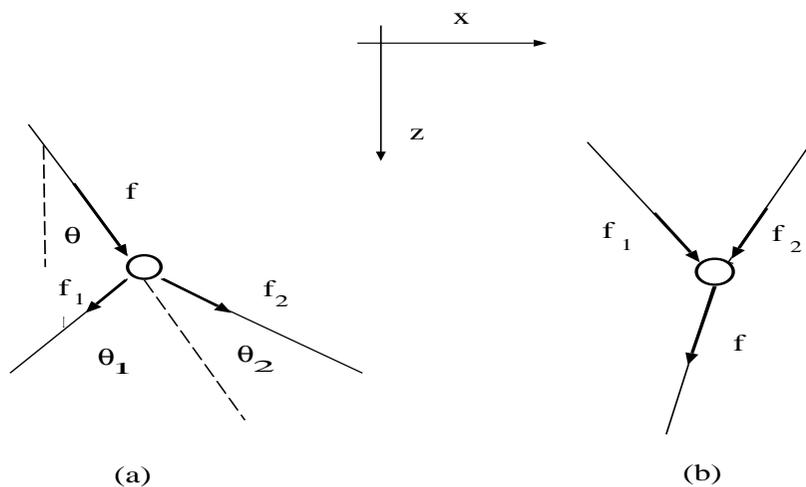


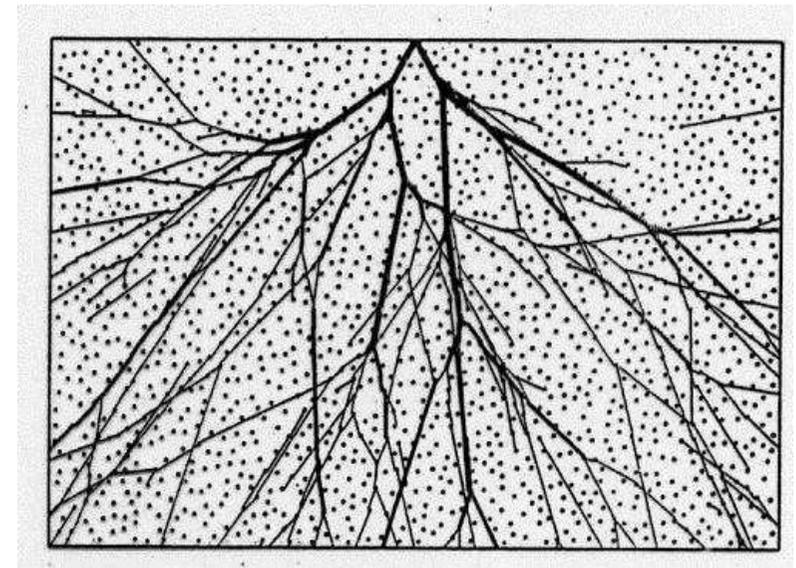
図 9: FPA モデルより得られた砂山底面での力の分布 [39]. 実線は第 2 構成方程式として $\sigma_{\phi\phi} = \sigma_{rr}$ を用いた場合, 点線はハル-フォン・カルマンの関係式 $\sigma_{\phi\phi} = (\sigma_{rr} + \sigma_{zz})/2 - [(\sigma_{zz} - \sigma_{rr})^2/4 - \sigma_{zr}^2]^{1/2}$ を用いた場合の結果である. シンボルは実際の砂山底面での力の分布 [29] を表す.

粉体は塑性体か弾性体か？

- 塑性体：力はまっすぐ伝わる。破壊寸前（伝統的な見方。境界条件をつけられない）：双曲型
- 弾性体：安定性あり。（境界条件に依存）：楕円型



応力鎖の散乱ルール



数値モデルから再構成した応力鎖

塑性論から弾性論へそしてまた弾性論へ

- 応力鎖のBoltzmann方程式(分裂のみ)

$$P(f, \mathbf{n}, \mathbf{r} + \mathbf{n}dr) = \left(1 - \frac{dr}{l}\right) P(f, \mathbf{n}, \mathbf{r}) + \frac{2dr}{l} \int d\Omega' \int df' P'(f', \mathbf{n}', \mathbf{r}) \Psi(\mathbf{n}', \mathbf{n}) \delta\left(f - \frac{f'}{2 \cos \theta}\right)$$

l: 応力鎖の平均自由行程 f: 応力鎖の強度, n: 方向ベクトル

Boltzmann equation for the stress field

ここで

$$F(\mathbf{n}, \mathbf{r}) = \int df f P(f, \mathbf{n}, \mathbf{r}) \quad (5.5)$$

を導入して (5.4) 式に f をかけて f で積分すると

$$l\mathbf{n} \cdot \nabla F(\mathbf{n}, \mathbf{r}) = -F(\mathbf{n}, \mathbf{r}) + \int d\Omega' \frac{F(\mathbf{n}', \mathbf{r})}{\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'} \Psi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') + \frac{l}{a_d} \mathbf{n} \cdot \mathbf{F}_0(\mathbf{r}) \quad (5.6)$$

となる. 但し \mathbf{F}_0 は (5.4) 式には含まれていなかった重力などの外力を表している.
 F の角度積分をすることでマクロ変数を

$$p(\mathbf{r}) = a_d \int d\Omega F(\mathbf{n}, \mathbf{r}) \quad (5.7)$$

$$J_\alpha = a_d \int d\Omega n_\alpha F(\mathbf{n}, \mathbf{r}) \quad (5.8)$$

$$\sigma_{\alpha\beta} = a_d D \int d\Omega n_\alpha n_\beta F(\mathbf{n}, \mathbf{r}) \quad (5.9)$$

と導入できる. ここで p は圧力, \mathbf{J} は局所平均された応力鎖の強度であり $\sigma_{\alpha\beta}$ はストレステンソルである. 更に $Tr\sigma = Dp$ というストレステンソルの対角和と圧力との間の関係式も容易に確認できる.

Chapman-Enskog method for stress chains

- We can obtain a static equation for stress balance.

$$\nabla_{\beta} \sigma_{\alpha\beta} = F_{0\alpha}$$

を得る. (5.16) 式で $\alpha \neq \beta$ とすると

$$\sigma_{\alpha\beta}|_{\alpha \neq \beta} = \frac{lD^2 K_1}{\left(\frac{Da_2 - a_0}{D-1} - 1\right)} (\nabla_{\alpha} J_{\beta} + \nabla_{\beta} J_{\alpha}) \quad (5.20)$$

を得る. また対角項は

$$\sigma_{xx} = \frac{lD}{\left(\frac{Da_2 - a_0}{D-1} - 1\right)} \left[2DK_1 \nabla_x J_x + \left(DK_1 - \frac{a_0 - a_2}{(D-1)(a_0 - 1)} \right) \nabla \cdot \mathbf{J} \right] \quad (5.21)$$

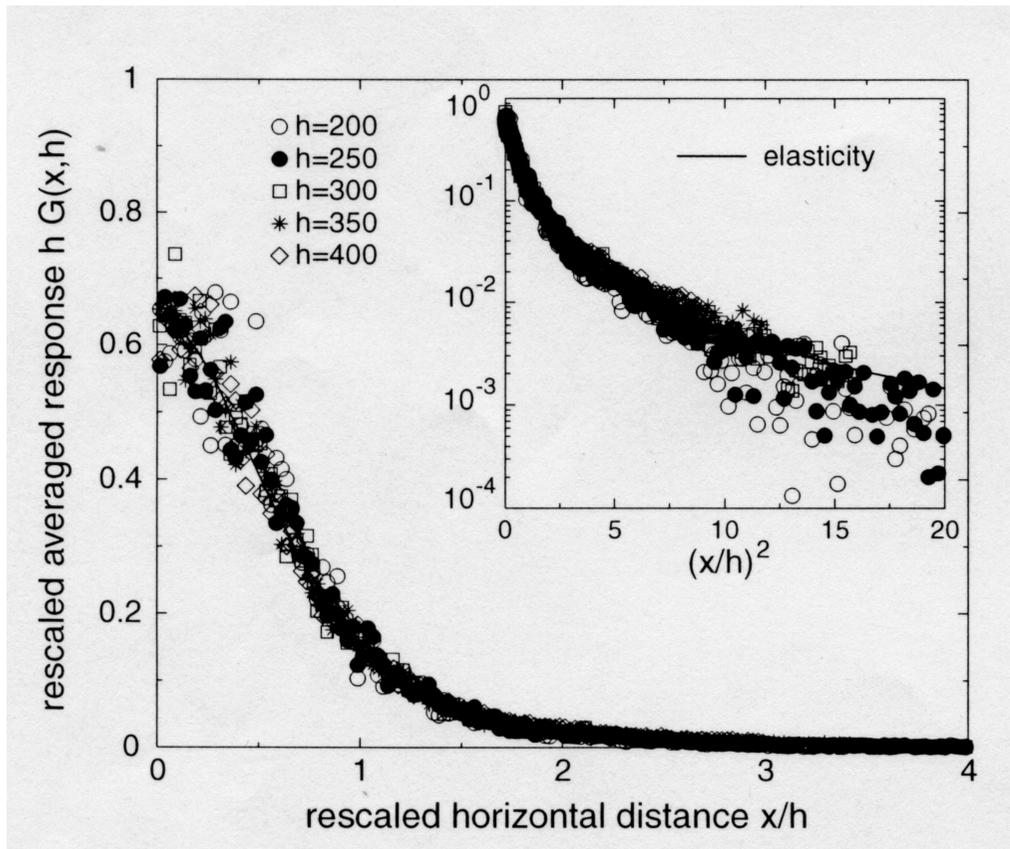
等となる. ここで応力鎖の強度 \mathbf{J} は変位そのものではないが同じ役割を果たす. 従って (5.20), (5.21) 式は線形弾性論の構成方程式と完全に対応したものである. このようにして図 5.3, 図 5.4 で報告された弾性論の回復が理論的に示されたことになる.

線形弾性論の構成方程式が与えられた場合に「ヤング率」と「ポアソン比」を求めることができる. 付録 B に記した計算によればヤング率は $l / \left(\frac{Da_2 - a_0}{D-1} - 1\right)$ に比例することが分かり, ポアソン比は

$$\sigma_0 = \frac{1}{D-1} \frac{D-1 + 3a_0 - (D+2)a_2}{D+1 + a_0 - (D+2)a_2} \quad (5.22)$$

弾性論の回復

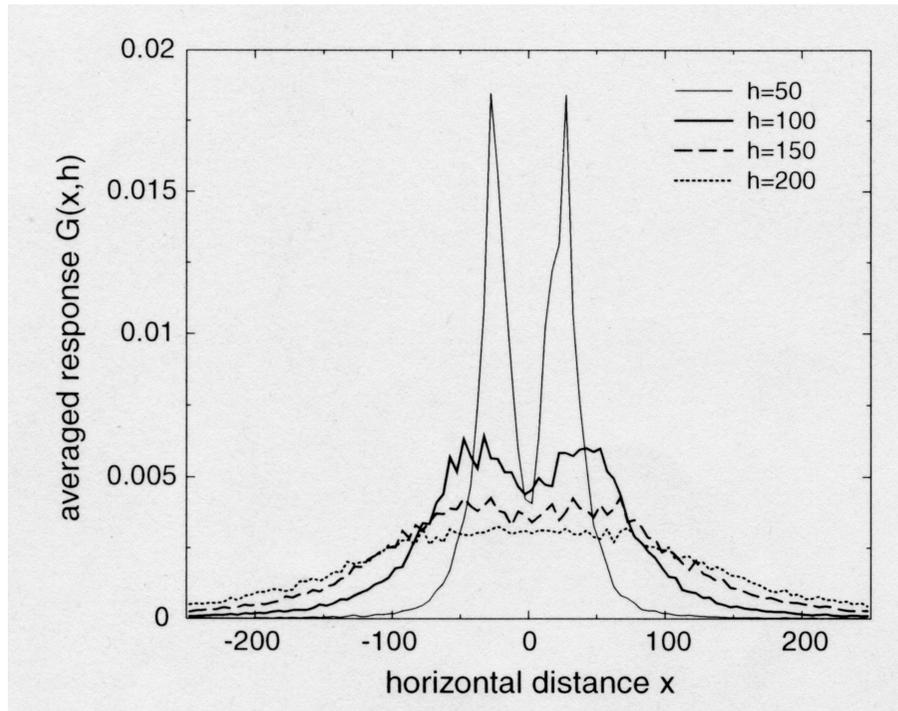
弾性論的ストレステンソルと弾性率を決定可能。Poisson比は熱力学的安定性を満たさない。



深さ h での垂直応力の応答。
実線は弾性論による計算
(弾性率に依存しない)。

$$G_e(x) = \frac{2}{\pi h} \frac{1}{[1 + (x/h)^2]^2}$$

塑性論から弾性論、そして更に弾性論



- 左図： 粉体の一点からの刺激がどのように伝播するか（ダブルピークからシングルピークへ）
- ダブルピーク： 塑性論的（直線的）応答
- シングルピーク： 弾性論的（拡散的）応答
- 更に応力鎖の融合を考慮すると深い極限で塑性論的応答が回復する。

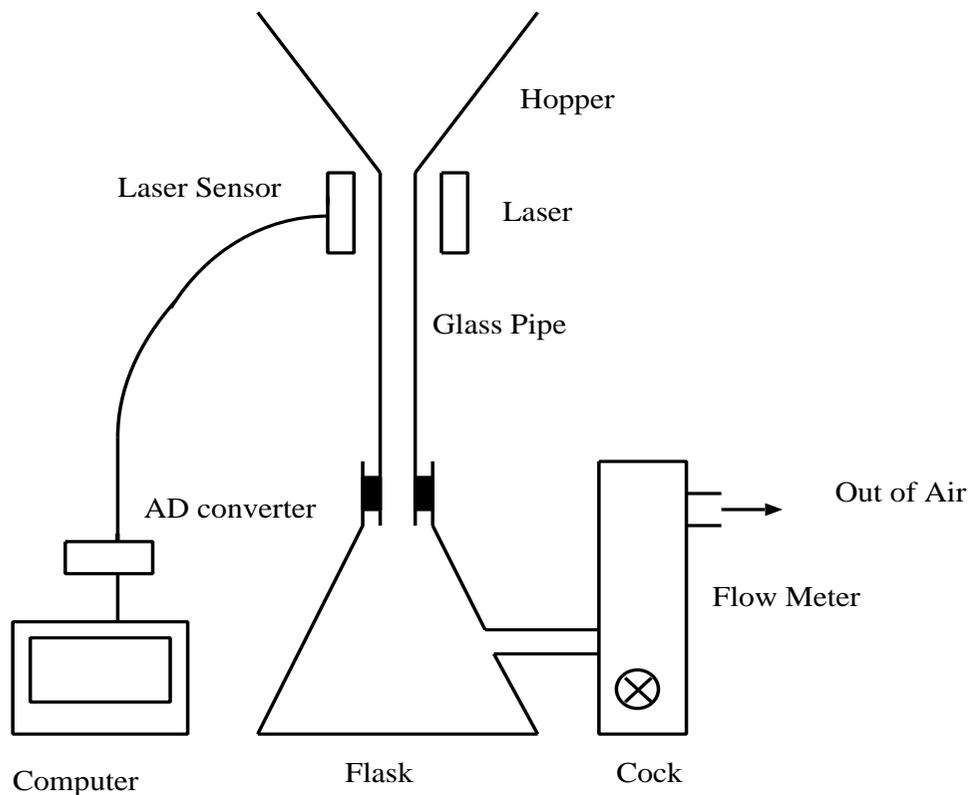
Fluctuations in granular flows

- Study of Granular Flow (Solid-Gas Mixtures) 1991 —
- Experiments by Matsushita's group : At the same time
 - They are interested in power spectra.

$$P(f) \sim f^{-a} \quad 1 < a < 2$$

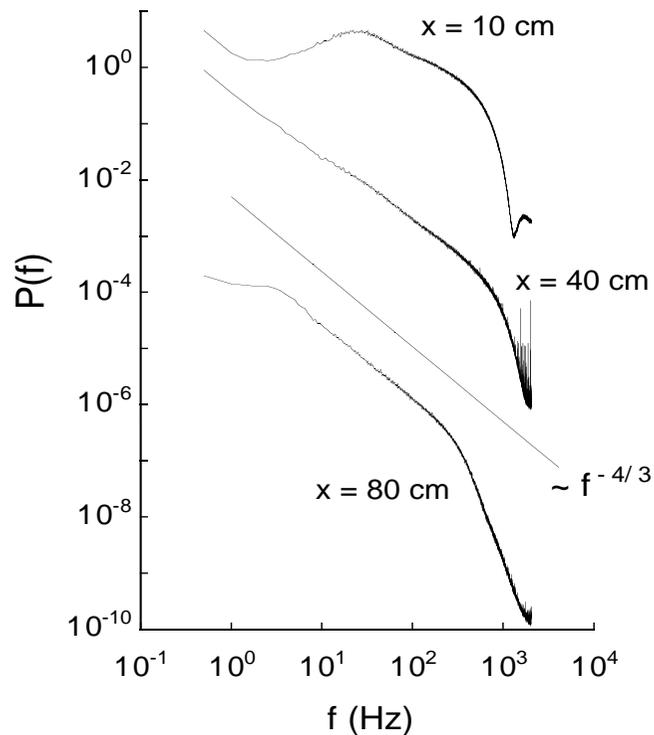
- Exp. at initial stage $a=1.5?$, Peng and Herrmann $a=4/3$, My prediction: $a=4/3$ (1996)
- The experiments by Matsushita's group confirms $a=4/3$.

Experimental Setup of Granular Flow in a Pipe



- From laser sensor, they observe the time evolution of density fluctuation.
- The effect of air is crucial to produce power laws. So they control the air flow.
- The paper is published in PRL (Moriyama et al. 1998).

Results and interpretation

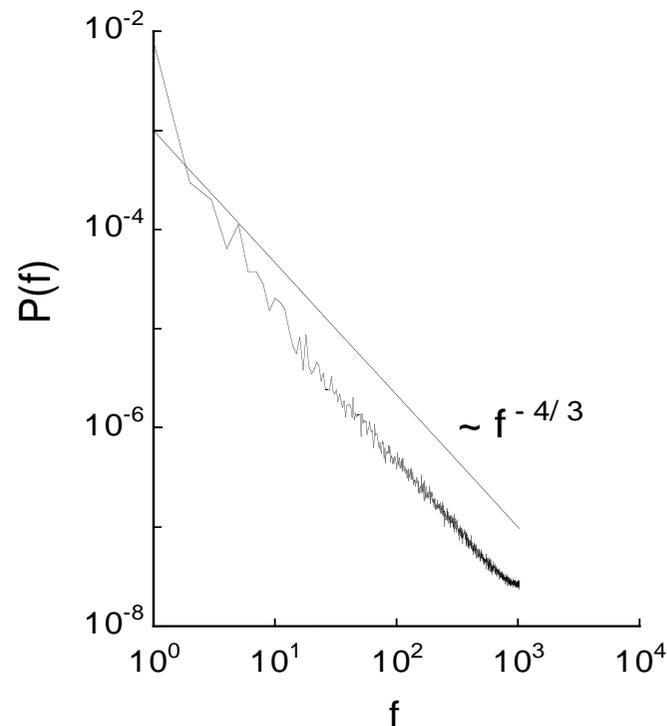


- They have confirmed that the exponent is $a=4/3$.
- I reproduce the result from the simulation of a nonlinear Langevin equation.

Analysis Based on Langevin Equation

$$\ddot{r}_n + \zeta[\dot{r}_n - W(r_n)] = F(r_n) + f_n(t) \quad (1)$$

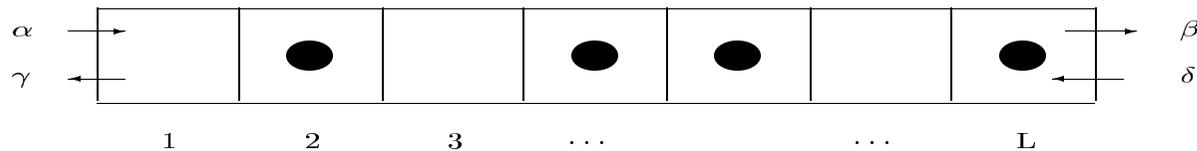
where $r_n = x_{n+1} - x_n$, $W(r_n)$ is the optimal velocity function, $F(r_n)$ is the repulsive force, and $f_n(t)$ is noise.



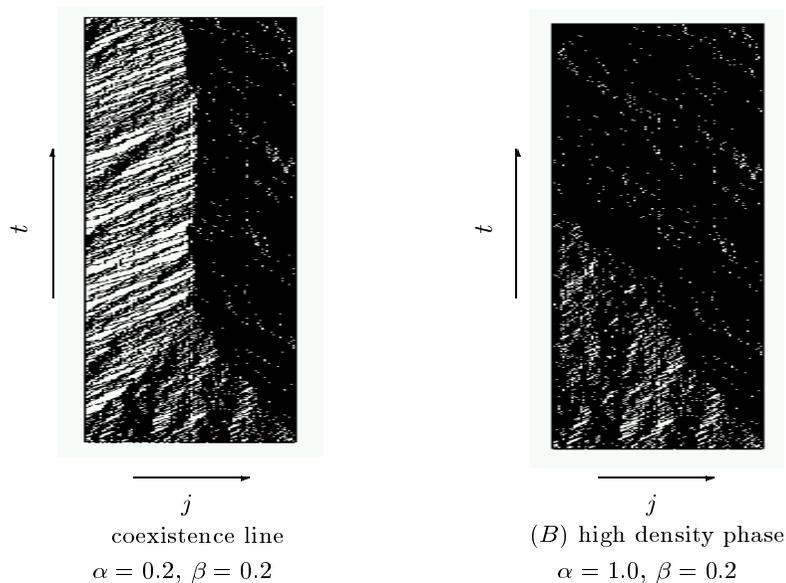
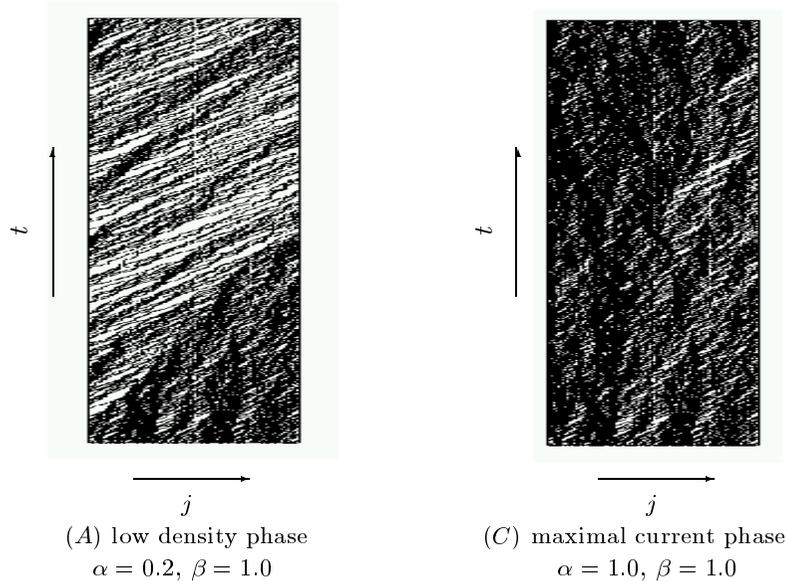
- From the relaxation theory of local fluctuation we can derive $a=4/3$ for weakly stable region.
- But, theory is unsatisfied.

Application of ASEP to granular flows

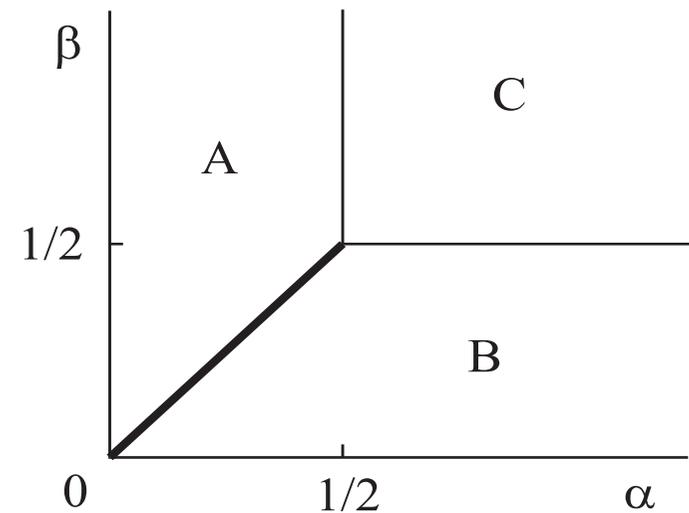
- ASEP (asymmetric simple exclusion process) is an exactly solvable model but I feel that the model contains some reality. At least, the model is regarded as a simple one for traffic flows and granular flows.



Simulation of ASEP

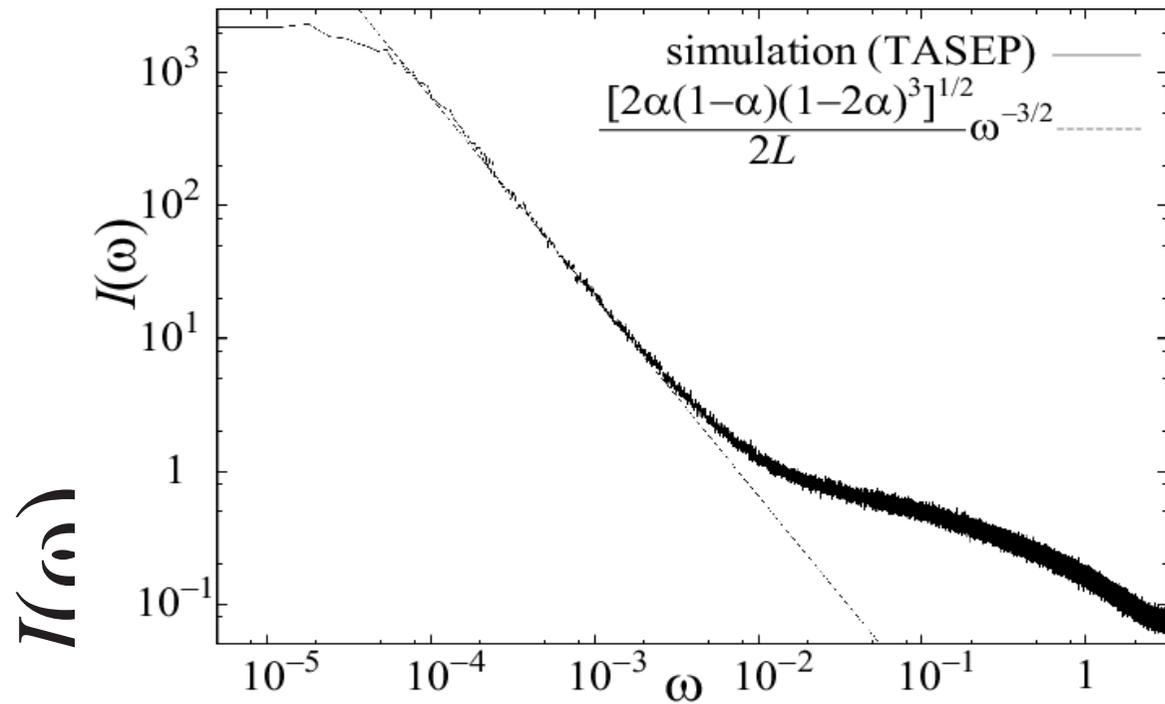


- Depending on α and β there are four phases.
- The exact phase diagram (see below).



Domain wall theory of ASEP on the coexistence line

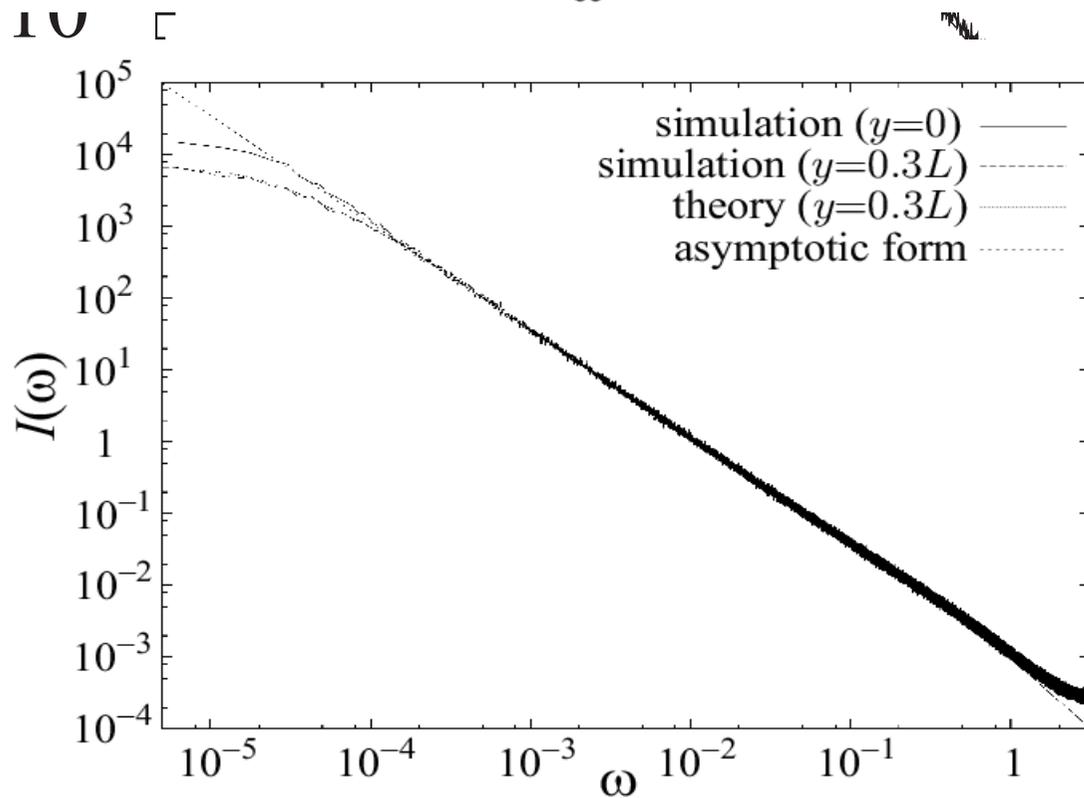
- S. Takesue, HH and T. Mitsudo (PRE68-015103R) demonstrate that power spectrum on the coexistence line can be explained by the domain wall theory.
- On the line, the density is saturated near the exit, but it is almost zero near the entrance. So the random walk of the domain wall is essential.



DW theory predicts
 $\alpha = 3/2$ for the power
 spectrum!

- The upper figure shows comparison of DW theory and simulation of ASEP for power spectrum.

- The lower figure shows the comparison of DW simulation and analytic expression.



From a toy model to a realistic model

- ASEP is exactly solvable but it is too simple. Analysis of DW theory is just like exercise.
- If we introduce multi-lanes for flows, the model may become realistic. If the rule of lane change is not complicated, we may keep most of good properties of ASEP.

Multi-lane ASEP by T. Mitsudo and HH(in progress)

- The rule of lane-change: if a vehicle exists in front of the moving vehicle, it prefers changing the lane.
- The external field can be added.
- The result is similar to granular flow on a slope.
- The velocity obeys an exponential function of depth.



結論

- 非弾性衝突の常識には嘘が多い。研究は黎明期にある。はねかえり係数は1を越える。
- 気体力学は基本的なことが分かっていない。
- 非弾性気体の統計力学は応用上も重要で概念的にも重要
- 粉体流の問題ではNewton流体とBagnold流体の遷移がよく分かっていない。実際の流れは混合的である。

結論(2)

- 粉体は静力学においても双曲的、楕円的な性質を併せ持つ。
- その静力学の性質が動力学でも重要。摩擦だけでなくundulationをはじめとする様々なパターン形成で本質的
- ASEPなどの新しい非平衡統計力学の手法を使って揺らぎの解析が可能。

まとめ

- 粉体は非平衡物理のスタンダードかつオーソドックスな対象である
- 気体物理の自然な延長に非弾性ガスの統計力学がある
- 非弾性衝突の物理はまだ発展途上にある。