1　多粒子系流体解析モデル

1.1　粒子間流体力学相互作用の重要性について

流動層において粒子と流体の相互作用が最も重要であるのは言うまでもない。仮に流体と粒子の相互作用がないとすれば流体は堆積した粒子層の間を通り抜けるだけで, 流動化現象そのものが生じない。また粒子間の斥力ですら流体の効果に比べて2次的な重要性しか持たない。何故なら流体の流線は切断できないために粒子近傍には潤滑力 (lubrication force) と呼ばれる強い斥力が存在する。従って, 少なくとも表面が滑らかな粒子の遅い運動に対しては粒子間の相互作用を導入しなくても粒子が互いに接触することはない。つまり流体効果を考慮した時点で粒子の排除体積効果は組み込まれている。

然るにこれまでの流動層研究は専ら粒子間の接触力をどうモデル化するか, 或は粒子系を一つの連続体として扱い2流体モデルとして構成方程式をどのように作るか, という方向に力を注いで来た様に思える。無論、必要な結果をシミュレーションによって得るという目的にとっては理に叶った研究史であったと思う。一方でモデルが複雑化して直観的な理解が困難であるとか、パラメータが多く、実験結果から逆にパラメータを設定せざるを得ないとか、モデルを設定した状況と、実際にシミュレーションを行なう状況とが一致していないといった諸問題がある。

そうした混乱の結果生じたと思われる誤解の一つとしていわゆる運動論的手法 (kinetic theory) が流動層問題の基礎となる、というものがある1)。この考え方自体は今世紀に入ってから席巻したアトミズムの残しであると言って過言ではない。つまり或る種の剛体球モデルから出発して、その運動論方程式 (ボルツマン (Botzmann) 方程式に対応) を導き、その保存則から流体方程式のようなマクロな運動を議論しようというものである2)。しかしながらあらゆる意味でこの手法は, 流動層に対して, 必ずしも基礎的とは言えない。通常の分子気体に対しても, 剛体モデルの正当性や流体方程式を導く際にマクスウェル (Maxwell) 分布乃至ガウス (Gauss) 分布に対する線形のずれの効果までで切断したことの妥当性も実は自明ではない。それらはさておき、そもそも上記のチャップマン (Chapman) ・エンスコッグ (Enskog) スキーム3)は希薄気体でのみしか成功しておらず、通常、流体をイメージする液体に対してこのスキームは有効ではない。実際、運動論方程式は粒子の衝突項を含むために、1体の分布関数を議論するためには2体の相関関数の情報が必要であり、2体の議論には3体の情報が必要であるといういわゆる BBGKY ヒエラルキー2)をなす。従ってそのままでは分布関数に対して閉じた方程式が得られないので何らかの切断近似が必要になる。粒子分布が希薄である極限ではボルツマン方程式の様に粒子は互いに無相関であるとして衝突項を1体分布関数の積で記述することが可能であるが、高濃度粒子系である液体ではもはやその近似は正当化できない。勿論、液体論は長い歴史を持っているがためにそれなりの処方はあって衝突項に粒子の大きさと衝突確率として平衡の2体相関関数を考慮したエンスコッグ (Enskog) 方程式3,4) と呼ばれる近似的な運動論方程式が存在する。このエンスコッグ方程式の結果そのものは実験からかけ離れたものではないが、あくまで導入に用いた仮定は正当化できず、既にボルツマン方程式が持つ基礎方程式としての立場を放棄せざるを得ない。更にチャップマン・エンスコッグ スキームは非ニュートン (Newton) 流体を記述できないという明白な欠点がある。

ここまでは高濃度とは言っても個々の要素には散逸がなく、系は一様かつ並進対称で全体としては平衡にある系の話しである。しかしながら粉体系では、上に述べた仮定のいずれもが破れてしまう5)。つまり粉体として衝突の際の散逸を導入した途端に系は非一様となり、常に非平衡となるのである。それでも、重力の影響がなく比較的平均粒子濃度が薄く、流体が介在しなければ運動論的手法による興味深い解析が存在する6)。そこではチャップマン・エンスコッグスキームに則った流体力学的記述が有限時間で破綻し、非ガウス性が本質的であることが示される。ここで重力を導入すると尚、運動論的記述は不適切になり、ガラス化、固化という相変化が避けられず、これらの相を運動論で記述することはできない。流動層の問題は最悪と言ってよい。何故なら、流体と粉体という全くスケールの異なった粒子が共存しているからである。共に運動論で記述するのは時間的・空間的に特徴的なスケールが違いすぎて不可能である。仮に流体相に連続体的な記述を用いるとしても、流体と粒子の相互作用という最も重要な部分の記述は運動論の枠内では不可能である。こういう状況で運動論的手法が基礎的であると主張する事は質の悪いジョークでしかない7)。

5.2.4 で紹介された 2 流体モデルは高濃度固気混相流の理論解析の道具として広く使われて来た8)~10)。このモデルでは粒子も連続相として扱い、現象論として粒子相と流体相の間の摩擦を導入する。その際、往々にして運動論によって粉体相の圧力、粘性率などを決定するという書き方がされているが、上記の様に意味の乏しい不正確な表現である8)。またマクロに見た場合のストレステンソルの決定法はあまり明確ではない。特に流動層の様に流体込みの問題では往々にして計測している状況（しばしば粒子のみ）と実際に流動層が実現している状況では異なったものを見ていることになる。その意味で実際の実験で意味があるのは混相流全体の粘性率なり圧力のみであるが、現実のモデルには粉体相の圧力、粘性率等が含まれる。また様々な非ニュートンモデルが可能であるのに対してその任意性を取り除く処方がないと言ってよく、理論解析では明らかに矛盾したことにニュートン的なストレステンソルがしばしば用いられる。しかしながら、既に臨界現象等で知られているように或る相から別の相への転移として現象を捉えられるならば、そうしたモデルの詳細に依存しない一つのユニバーサルなモデルが存在することが期待される11)~14)。少なくとも交通流の問題15,16), 擬一次元的なパイプ流中を落下する粒子17)、及び 1 次元的な流動層9),11),12) は、一様に混合した状態から流体と粉体が分離する転移に関しては明白なスケーリングが存在し、ユニバーサルな数理構造が存在することが明らかになっている16,17)。その雛型を見るために簡単な 2 流体モデルを用いることは無意味ではない。しかしながら、シミュレーションの難しさ、粉体粒子の役割の不明確さ、等から 2 流体モデルを基本的モデルとして捉えてシミュレーション及び解析をするという立場は廃れつつある方法と言えるかもしれない。最近、流動層にも天文学で用いられる SPH(Smoothed Particle Hydrodynamics) 法が導入されつつある。しかしながらこの方法でも基本的に非粘性の天体の問題とは異なり、流動層では構成方程式をどうするか、粒子と流体の摩擦をどう扱うかというモデル化の問題は避けられない。

いずれにしても、従来の流動層研究では流体力学的相互作用の重要性が不当に軽視されてきており、それに伴って上に述べた様々な技巧的なモデルをいかに判断し正当化できるかが分かりにくい。上記の反省に基づき、改めて流体力学的相互作用を行なう粒子系のダイナミックスについ

て実際にどの程度の事が分かっているのかをまとめておく必要がある[18)]。

流体として空気を想定した場合、非圧縮性か圧縮性かで扱いがかなり異なる。後者ではエネルギー密度の連続の式、状態方程式等が必要となり扱いが面倒である。ところが流動層において空気の流速は典型的には数 m/s であり音速との比であるマッハ (Mach) 数は 10^{-2}のオーダーである。従って空気の圧縮性は流動層では気にしなくてよく、以下では空気を非圧縮流体として扱う。非圧縮流体に対する流体力学の基礎方程式はナビエ ・ストークス (Navier-Stokes) 方程式である。一般にナビエ ・ストークス方程式は流速 $\mathbf{u}$、圧力 Pに対して

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} = \frac{1}{\rho}(-\nabla P + \mu \nabla^2 \mathbf{u}) \tag{1}$$

となる。但しρ,μはそれぞれ流体の密度、粘性率で定数として扱ってよい。ナビエ ・ストークス方程式は非圧縮条件 $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ を課すと粒子表面とそこでの流体の速度が連続であるという粘性境界条件の下で数値的に解くことができる。流速場が解けると粘性境界条件から粒子が流体にひきずられて動き、粒子の運動を追尾することができる。しかし空気の流れは粘性率の大きさによって全く異なったものとなる。粘性が高いときには比較的流速場は簡単な構造をしているが粘性が低い場合には一般に複雑な挙動を示す乱流状態となる。ここで左辺の慣性と右辺第 2 項の粘性の比はレイノルズ (Reynolds) 数 Re で見積もることができ、乱流は $Re \gg 1$ で起きると言ってよい。しかしながら乱流領域のナビエ ・ストークス方程式を複雑な境界条件の下で解くことは大変な作業である。まして粒子配置を時事刻々変えながら任意のレイノルズ数 Re で流体場及び粒子の受ける力を計算することは現在の計算機の能力限界を越えた作業である。従ってここではナビエ ・ストークス方程式が線形化できる場合を考える。この事が可能なのは (1) で $Re \ll 1$ である。また１個の球の無次元化された抵抗係数は $Re \simeq 1$ 程度まで (1) の左辺を無視したストークス (Stokes) 方程式

$$\nabla P = \mu \nabla^2 \mathbf{u}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{2}$$

を用いたストークス近似でよく記述できることも知られている[19)]。ここでストークス近似は流動層に対して決して現実離れした近似ではないことを注意しておく。例えば流体を空気として粒子の質量密度が $2.5\ \mathrm{g{\cdot}cm^{-3}}$とし、代表的な流速を一粒子の平衡沈降速度とすれば $Re = 1$ は粒子直径が 70 μ m 程度である。従って Geldart [20)] の分類でいうところの流動に適した A グループの粒子が受ける流体力学的相互作用はストークス近似による流体の効果を考えれば充分であるということになる。尚、ストークス近似は特に 2 次元問題ではストークスのパラドックスをひきおこし、近似そのものが破綻することを注意しなければならない[19)]。

1.2　ストークス動力学法の基礎

この節では粒子慣性が重要でないコロイド粒子に対するストークス動力学 (Stokesian dynamics) 法の基礎を紹介する[21)]。ストークス方程式の特徴は方程式が線形であり、行列形式で方程式の解が現されることである。つまり粒子が存在するとき、流体の静止したフレームで粒子が流体に及

ぼす力 $\mathbf{F}$ と粒子の速度 $\mathbf{U}$ との間に

$$\mathbf{F}=\mathbf{R}\cdot\mathbf{U},\quad \mathbf{U}=\mathbf{M}\cdot\mathbf{F} \tag{3}$$

という線形の関係が存在する。ここで $\mathbf{M}$ は易動度 (mobility) 行列、$\mathbf{R}$ は抵抗 (resistance) 行列と呼ばれる。従ってストークス方程式を解くということはこれらの行列を構成するということと等価である。

しかしながら (3) の厳密解としては近年ようやく 2 体問題の解が級数解として求まったのみである[22,23]。従って多粒子系のシミュレーションには何らかの意味で近似が必要となる。通常、差分法や有限要素法がすぐシミュレーションとして思い浮かぶが, この問題では境界要素法を用いたシミュレーション法[24]が有効である事が知られている。Brady ら[25,26]によって開発されたストークス動力学法も境界要素法の一種である。この方法の特徴は流体場の情報を捨てて粒子運動に必要な流体力学的情報のみを取り出した点にある。従って流体の情報を必要とする場合には他の方法でシミュレーションを行なう必要がある。

コロイド等、比較的小さくて (粒径が 10 μ m 未満) 移動速度の遅い粒子に対するストークス動力学法では粒子の慣性が効かないために粒子に働く力は常にバランスしている。従って仮に易動度行列なり抵抗行列なりが既知であれば粒子に働く力から粒子の速度が決まる。粒子の速度がわかればそれを時間について積分することで粒子の位置がわかる。しかし既に述べた通り厳密に行列を構成できないのでストークス動力学法ではこの 2 体問題の厳密解を粒子が近接した場合に用い、一方、遠方では易動度行列の多重極展開を行ない、それらの内挿を行なっている。そのために、粒子の回転を無視して、ごく簡単にその 2 つの漸近解の性質を紹介しよう[27]。

2 体の抵抗問題は (3) に従い、3 次元の場合 6 元の連立の式

$$\begin{pmatrix}\mathbf{F}^1\\ \mathbf{F}^2\end{pmatrix}=\mu\begin{pmatrix}\mathbf{A}^{11} & \mathbf{A}^{12}\\ \mathbf{A}^{21} & \mathbf{A}^{22}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\mathbf{U}^1\\ \mathbf{U}^2\end{pmatrix} \tag{4}$$

となる。ここで上つきの添字は粒子に付随したものである。更に (4) に含まれる $\mathbf{A}^{\alpha\beta}$は 2 粒子の中心間のベクトル $\mathbf{r}$ に依存し, その成分は

$$A_{ij}^{\alpha\beta}=X^{\alpha\beta}e_ie_j+Y^{\alpha\beta}(\delta_{ij}-e_ie_j) \tag{5}$$

というテンソルになる。ここで e_iは単位ベクトル $\mathbf{r}/r$の i 成分である。ここで $X^{\alpha\beta}$,$Y^{\alpha\beta}$は複雑な級数で現されるが、粒子が接触する間際では

$$X^{11}=-X^{12}\simeq\frac{1}{4(s-2)},\quad Y^{11}=-Y^{12}\simeq-\frac{1}{6}\ln(s-2) \tag{6}$$

という具合に発散する。但し $s=r/a$ は粒子半径 a で計った 2 粒子間の距離である。このように粒子の接近は禁止されている。

一方、遠方場に対してはストークス方程式 (2) に $\mathbf{f}\delta(\mathbf{r})$ を付け加えた場合の解

$$\mathbf{u}=\frac{1}{8\pi\mu}\mathbf{J}(\mathbf{r})\cdot\mathbf{f},\quad J_{ij}(\mathbf{r})=\frac{1}{r}(\delta_{ij}+e_ie_j) \tag{7}$$

が基本的な役割を果たす。ここで $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ はオセーン (Oseen) テンソルと呼ばれる。(7) を用いて $\mathbf{r}_0$ にある半径 a の球粒子の存在によって生じる速度場の i 成分は

$$u_i(\mathbf{r}) = -\frac{1}{8\pi\mu}\left(1+\frac{a^2}{6}\nabla^2\right)J_{ij}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)F_j \tag{8}$$

となる。但し力 $\mathbf{F}$ はストレステンソルの球面での積分で求める。ところがファクセン (Faxen) の法則によって $\mathbf{F}$ は流速場から決めることが可能である。ある速度場 $\mathbf{u}'$中に並進速度 $\mathbf{U}$ を持つ粒子を $\mathbf{r}_0$に置いた場合に粒子が流体に及ぼす力 $\mathbf{F}$ が

$$\mathbf{F} = 6\pi\mu a\left(1+\frac{a^2}{6}\nabla^2\right)(\mathbf{U}-\mathbf{u}'(\mathbf{r}_0)) \tag{9}$$

となることがファクセンの法則の表式である。従って (8) の重ね合わせと (9) を組み合わせることで粒子速度 $\mathbf{U}^\alpha$に対して

$$\mathbf{U} = \mathbf{M}^\infty\mathbf{F} \tag{10}$$

を得る。但しテンソルの成分は

$$(\mathbf{M}^\infty)^{\alpha\alpha}{}_{ij} = (6\pi\mu a)^{-1}\delta_{ij}, \quad (\mathbf{M}^\infty)^{\alpha\beta}{}_{ij} = \frac{1}{8\pi\mu}\left(1+\frac{a^2}{6}\nabla^2\right)^2 J_{ij}(\mathbf{r}^\alpha-\mathbf{r}^\beta) \tag{11}$$

を充す。こうやって構成した易動度行列をロトン (Rotne) ・プラガー (Prager) テンソルと呼ぶ。一見、(10) と (11) には近似が含まれていない様に映るがそれは間違いである。実際にはファクセンの法則 (9) で粒子を増やした際に速度場が乱れ、粒子が 1 個少ない場合の $\mathbf{u}'$が元の境界条件を充さなくなる。従って (10) は粒子の希薄極限に対してのみ正しい表式を与える。(11) の特徴は粒子間の距離 rに反比例するテンソルであるという点である。また電磁気学の問題とは異なり遮蔽効果がなく極めて扱いにくい長距離力となっている。25)

Brady 等 [25] はシミュレーションの各ステップで粒子の配置に対して力 $\mathbf{F}$ が加えられたとき、流体の静止したフレームで

$$\mathbf{U} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{F} = \{(M^\infty)^{-1} + R^{lub}\}^{-1}\mathbf{F} \tag{12}$$

という関係式を導入した。但し、(12) は粒子の回転を無視した表式になっているが、彼らはより複雑な粒子回転を考慮したモデルを専ら解析に用いている。この式を適当な時間間隔で積分を行なうことで粒子の時間発展が追える。但しここでは $\mathbf{U}$ は粒子系の速度ベクトルであり、M^∞はロトン ・プラガー テンソルである。R^{lub}は 2 体での抵抗行列 R_{2B}から ${R^{lub}}_{2B} = R_{2B} - ({M^\infty}_{2B})^{-1}$ で構成した行列を全ての可能なペアについて足し合わせたものである。二体の抵抗行列は粒子が相互接触をするときに発散するので既に述べた様に (12) 式は境界層問題で遠方での主要項 M^∞と近接した場合の主要項 R^{lub}を内挿した形になっている。既述の様に遠方場 M^∞は粒子間距離 rに対して $1/r$という依存性を持つテンソル力でその長距離力に対して遮蔽はないとされている。そのため境界条件には重力やクーロン力でよく知られた周期境界に対するエヴァルト（Ewald）の和を取る28)。具体的な表式は複雑なので省略をする。周期境界条件は非現実的であるが現実の壁な

どが存在する場合にどのような境界条件を課すべきかはまだ未解決の問題となっている。尚、壁等の存在を近似的に現すためには空間上に固定された粒子をおき、その存在による流体場の乱れを計算すればよい。

ストークス動力学法では粒子速度を求めるのに遠方場の影響を易動度行列として求め、近接場の影響を2体の抵抗行列の重ね合わせから決めて、2つの影響を抵抗行列として足し合わせて計算を行なっている。これは一見作為的に映るが様々なテストによって非常に精度の高い手法であることが確認されている。その理由は抵抗に対する潤滑力の寄与が濃度に対してほぼ線形に増加することと遠方場には易動度形式による記述が適当であることをうまく組み合わせたためであると考えられる。その理由は一つには遠方場と近接場の級数解のマッチングになっているためであり、もう一つは以下の様な物理的要請によるものである。まず現実的な粒子分布において近接力である潤滑力の寄与は粒子濃度の増加につれ増大する。一方、粒子の動きやすさである易動度が濃度に比例して減小すると、ある濃度以上で負になってしまいナンセンスである。従って潤滑力の寄与を抵抗行列として足し合わせる。一方、遠距離の効果は易動度行列の多重極展開として考えるのが自然である。両者の寄与を足し合わせるには抵抗行列問題としないと再び負の易動度の問題に直面する。実際、易動度行列のランダムな配置に対する平均というのは平衡沈澱速度そのものであるがそのまま易動度形式で足し合わせる手法では低濃度極限29)ではうまくいっても高濃度領域では負になるというパラドックス30)が知られていた。最近、この矛盾は(12)式と同様のアイデアを用いると実験結果と近い沈澱速度となることが示され31)、本質的に解決された。

1.3 ストークス動力学法の流動層への適用とその問題点

コロイド系と流動層系での最も重要な違いは粒子に慣性があることである。つまり、一粒子の平均沈降速度u_0, 粒径d_p, 粒子質量密度ρ_p及び流体の粘性率μに対してストークス数$St_0=\rho_p d_p u_0/(9\mu)$が有限であれば流動層、0であればコロイドと言い替えてもいい。実はこの問題に粒子の慣性の影響を組み込むのは容易ではない。何故ならばハードコア粒子が近接すると潤滑力が働くために決して衝突できないからである。この記述は現実に空気中で粒子が衝突する事実と明らかに矛盾している。この矛盾は比較的最近認識された問題でまだ本質的な解決はされていない。今の処、ハードコアそのものが近似的な概念であるとし、粒子が接近するにはカットオフがありその長さで粒子が跳ね返るして32,33)その場を凌いでいる。むしろ、カットオフの導入で発散を押えるという発想そのものが繰り込みの考え方と適合している。従って繰り込み群の処方によってカットオフ依存性を消すというのが現実的に目指すべき方向であると思われる。しかしながら現状では誰もその繰り込みに成功していない。

もう少しプラクティカルな次の様なシミュレーション法も存在する34)。それは粒子の速度と(12)式で決まる終端速度の差に比例する摩擦力を粒子が受けるモデルである。慣性のないときに決まる粒子系の終端速度を$\mathbf{V}$としよう。重力$\mathbf{F}_g$及び流体の流入速度$\mathbf{U}^\infty$を用いて終端速度は

$$\mathbf{V}=\mathbf{u}^\infty+\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F}_g \tag{13}$$

となる。但し、抵抗行列$\mathbf{R}$は前節で述べた近似的手法(12)によって粒子配置の関数として構成

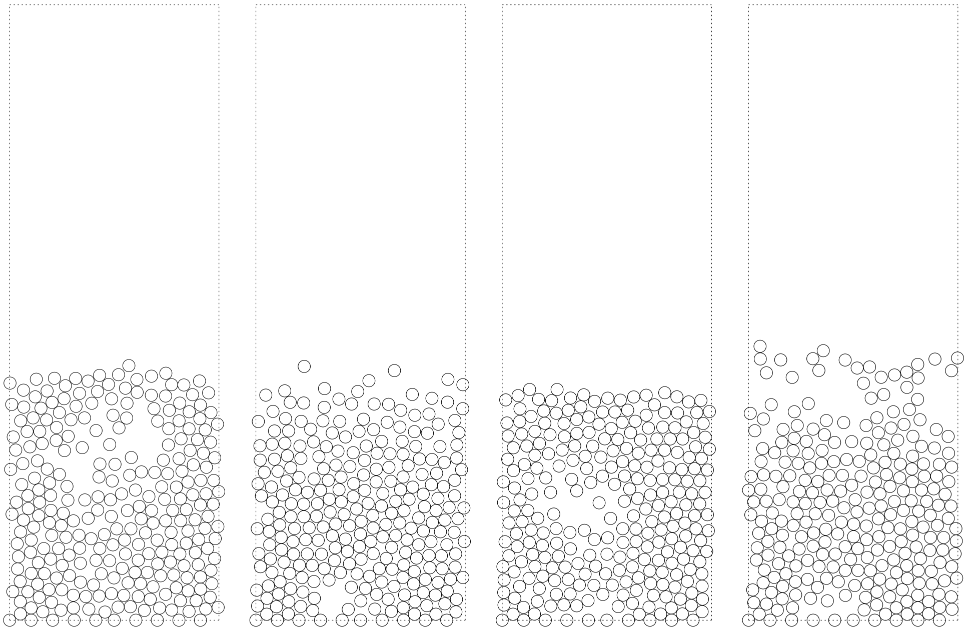

図 1: 粒子数 $N = 266$, $St = 10$, ガス流速 $u^{\infty} = 0.3u_0$ での気泡流動の例。但し u_0 は 1 粒子平衡沈降速度。図は左から右へ時間発展する。

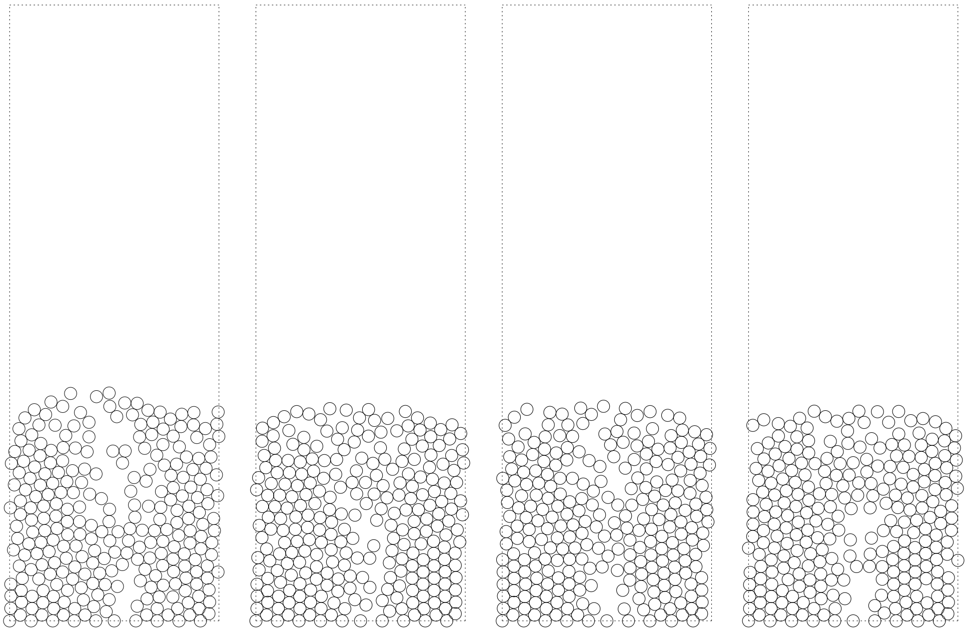

図 2: $St = 0.5$ でのチャンネル状態の計算例。

される。このモデルでは有効質量 m^*を用いて

$$m^* \frac{d\mathbf{U}}{dt} = -6\pi\mu a(\mathbf{U} - \mathbf{V}) + \mathbf{F}_c \tag{14}$$

とするのが粒子の時間発展を記述する方程式である。ここで $\mathbf{F}_c$は粒子間の衝突を現す。(14) では無次元化すると有効ストークス数 $St = {\rho_p}^* d_p u_0/(9\mu)$ がコントロールパラメータとなっている。但し $m^* = \frac{4\pi}{3}{\rho_p}^* a^3$ という関係がある。

このモデルでは粒子の速度は時間的に変化するので粒子配置を固定して短い時間間隔で粒子の運動をルンゲ (Runge) ・クッタ (Kutta) 法により積分し、その間に粒子が接触すれば弾性散乱を行なうというルールを定めている。その意味で実際のシミュレーションでは (14) の $\mathbf{F}_c$を陽に用いていない。時間積分の後、再び、粒子配置に基づき抵抗行列を計算し直して更にルンゲ・クッタ法による時間積分をするという操作を繰り返す。勿論、ここで用いた近似は正当化できないものではあり、粒子衝突に関する矛盾を何一つ解決していないが、時間積分の間隔が短ければそれほど実害はない事が期待される。少なくとも従来の慣性が重要である固気混相流でのシミュレーションでは流体の効果は粒子の存在によって一様に抵抗を受けるとだけとした非常に粗い記述よりは充分基礎的な取り扱いである。しかしこのモデルでは、ストークス数（或は有効質量）がどのように変更を受けるかわからないので全てのパラメータを任意性なく決めることはできない。またシミュレーションできる粒子数は離散要素法等のものと 3 桁程違い、工学的にはこの方法は使い物にならない。それだけでなく一様流動相が再現できていない、等といった問題点が解決されていない。従って実用的な観点に興味を持つ読者は 6 章を参考にすべきである。しかしながらこの方法に基づいて流体力学の基礎的な問題をあぶり出して来た事、及び、プロセスを押えながらモデルを構成しているために工学的モデルのどの点が問題であり、どの点を改善すべきかが明確になるので、今後の基礎理論の発展が期待される。

この方法を用いて、シミュレーションを行なうと、現実の固気混相流で観測される気泡の生成や、一次元的な粒子配置ではスラグと呼ばれる空隙の出現を再現している$^{34)}$。ここではストークス動力学法に慣性を導入したモデルを用いたシミュレーションの例として図 1 に気泡流動の図、図 2 にチャンネルと呼ばれる空気の流路が形成される状態の図を載せている。逆に言うと流動層の現象において少なくとも気泡流動やスラグの生成では流体の慣性は重要ではないし、粒子数の問題もそれほど気にしなくていい事になる。

1.4 流動層における統計法則

ストークス動力学法によるシミュレーションから観測できた統計量に関する幾つかの特徴的な結果を取り出して説明する$^{35)}$。この結果はシミュレーション法に依存しないし、実験でも一部報告されているので今後、他の方法でより詳細に研究される必要がある。

ここで紹介したストークス動力学法によるシミュレーションでは固定層からの流動化の転移を表現し得、その臨界流速は粒子の慣性とは無関係である。この事実は従来、流動層に対して用いられた Ergun による流動化開始速度の理論$^{36)}$とも一致するし、この場合、沈降速度が粒子の濃度にの

みに依存するという事実31)とも合致する。この場合は後者の描像に基づいて計算した方がより近い流動化開始速度を得る。即ちガス流速と共に動く座標系において粒子は常に沈澱を行なっているので、ほぼ充填された濃度での沈降速度を越えるガス流速を流すと流動化すると考えるのである。このモデルでは流体はストークス方程式に従うので近似の性格のはっきりしない Blake-Kozney 方程式 (Ergun 方程式の低レイノルズ数極限) よりもいい結果を与えるのは不思議ではない。実際に与えられた粒子配置で沈降速度 u と一粒子の沈降速度 u_0 の比を計算してみると $u/u_0 = 0.106$ となり、図３、６から推定された流動化開始速度と極めて近いことをコメントしておく。

一方、一旦、流動化するとその挙動はストークス数に大きく依存してある臨界値より大きいストークス数では気泡流動（図１）が得られ、ストークス数が臨界値以下ではチャンネルと呼ばれる流体が粒子を避けて決まった道筋を通る状態（図２）が得られる。実験的にはチャンネルの場合に極端な圧力降下が得られることが知られている。

次に全時間で平均した粒子の持つ単位質量当たりの平均運動エネルギー $\bar{E}$ が空塔速度 u_0 に対して極めて広い範囲で

$$\bar{E} = A_E(u^\infty - u_{mf}), \qquad (u^\infty > u_{mf}) \tag{15}$$

という連続転移で記述できる事がシミュレーションによって確認された（図３参照）。ここで u_{mf} は流動化開始速度に他ならない。この式は実験的にはかなり前に古川・大前37)の実験によって見い出された式であり、西村・前野38) の流動状態での雪の実験でも同様の関係式が見い出されている。従って、ガス流速が流動化転移の際の重要なコントロールパラメータとなっている。一見、(15) は流動化転移は不連続転移であるという報告39)と矛盾している様に見えるが、彼らの報告の詳細を見ると Geldart のグループ B の場合は不連続転移かつ (15) と違った表式であるがグループ A の結果は連続転移であり、また転移点近傍では (15) と似た関係式に従うという報告がある40)。また (15) は一見、等分配則を破っている様で不思議に思えるが、単に平均すれば粒子群がガス流速と釣り合って動いているという事実を物語っているに過ぎない。このようにストークス動力学法のシミュレーションは設定された通り Geldart のグループ A の記述に適切であるということになる。しかしながらグループ A で当然あるべき一様流動層がストークス動力学法では再現できていない。この欠陥は或は粒子間の接触力をモデルに導入していないためであるかもしれない41)。

一方、$\bar{E}$ は有効ストークス数の変化に対して一つのピークを持つ（図４参照）。そのピークがほぼチャンネル相から気泡流動相への転移に相当している。その転移自体は粒子相の層高がどれだけ有効ストークス数と共に変化するかということで見積もることができる。また着目すべきは図５に示した有効 Stokes 数と平均層高の関係である。Stokes 数は粒子ダイナミックスの時間スケールを決める事、及び、図中の C_H がガス流速と流動化開始速度の差に比例する傾向がある事、D_H は Stokes 数１での層高に他ならない点などを加味すると系の特徴的時間 τ が

$$\tau \sim \exp\left(\frac{C\delta H}{u^\infty - u_{mf}}\right) \tag{16}$$

と書ける事を意味する。但し δH は層高の増加である。この結果は系の流動は粒子間に隙間を作る過程で決まり、その空孔の生成確率はガラス転移の問題と同様に有効温度 u^∞ のフォーゲル・フルチャー (Vogel-Fulcher) 則で表現できる事を意味している。

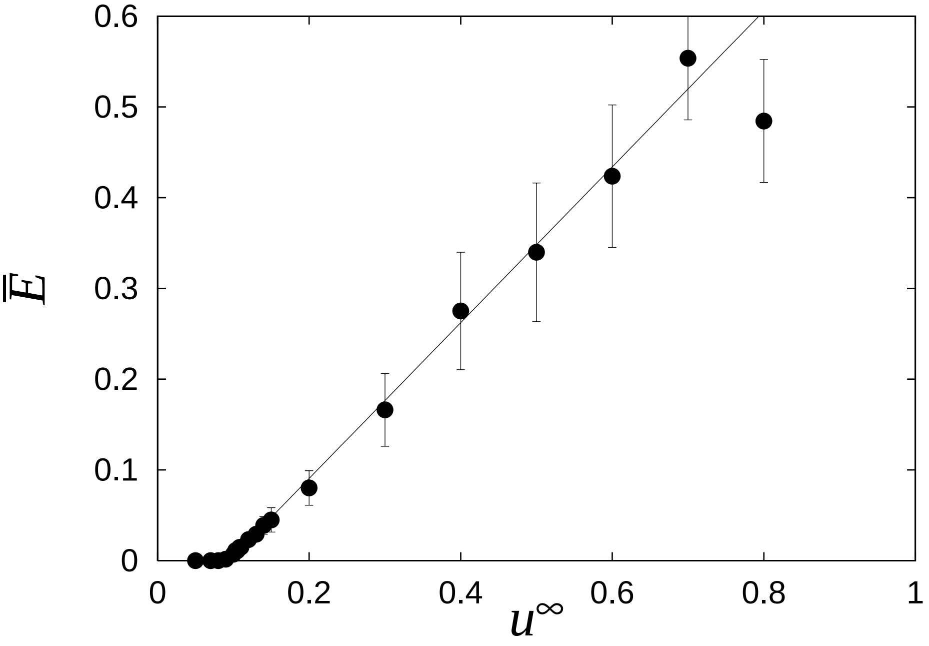

図 3: 平均運動エネルギーの流入ガス流速依存性。$N = 266$,$St = 10$, $A_E = 0.80$, $u_{mf} = 0.092u_0$.
但し u_0は一粒子の平衡沈降速度。

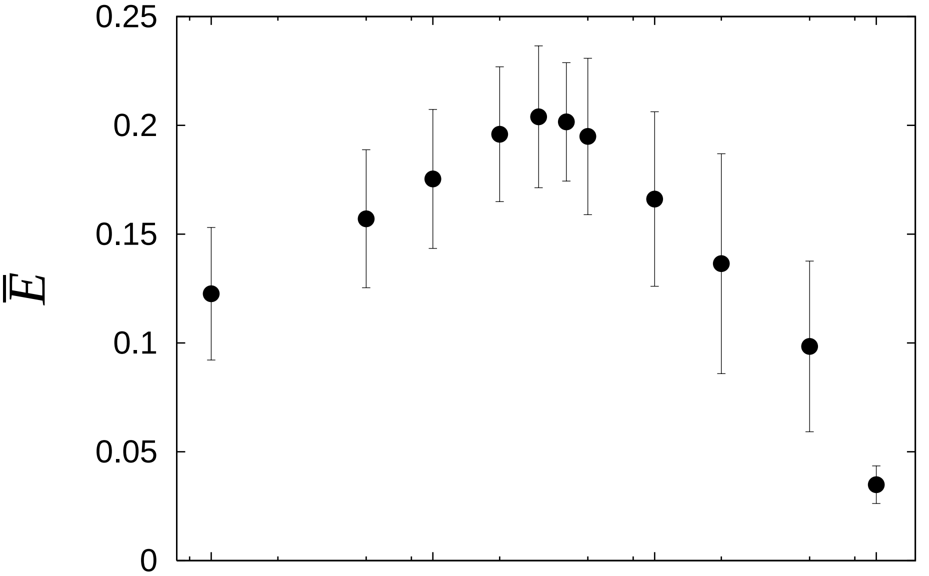

図 4: $\bar{E}$の St 依存性 ($u^\infty = 0.3u_0$)。

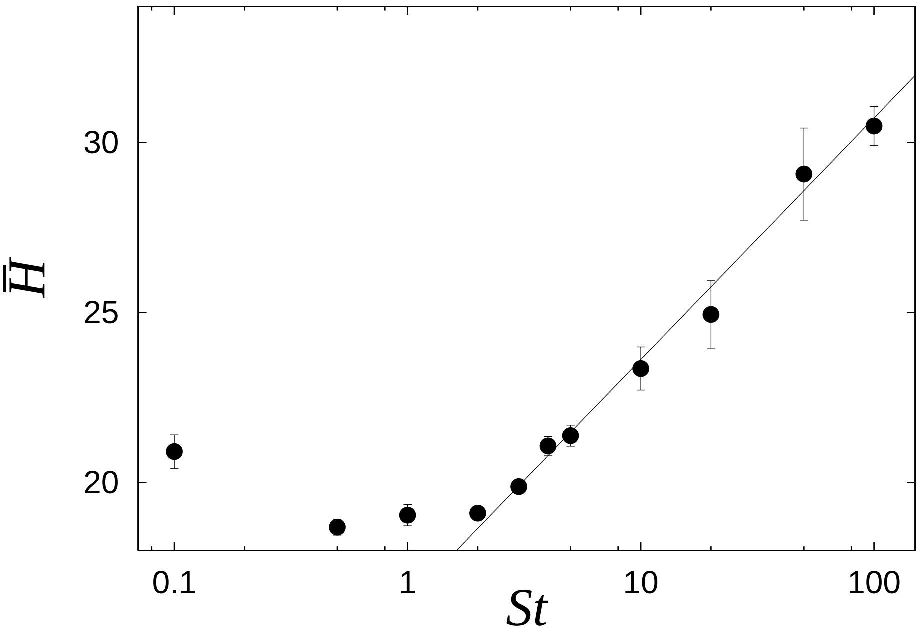

図 5: 流動層の平均重心$\bar{H}$の St 依存性 $(N = 266, u^\infty = 0, 3u_0)$. 直線は$\bar{H} = C_H \ln(St) + D_H$ であり, $C_H = 3.1 \pm 0.6$,$D_H = 16.5 \pm 0.1$ である。

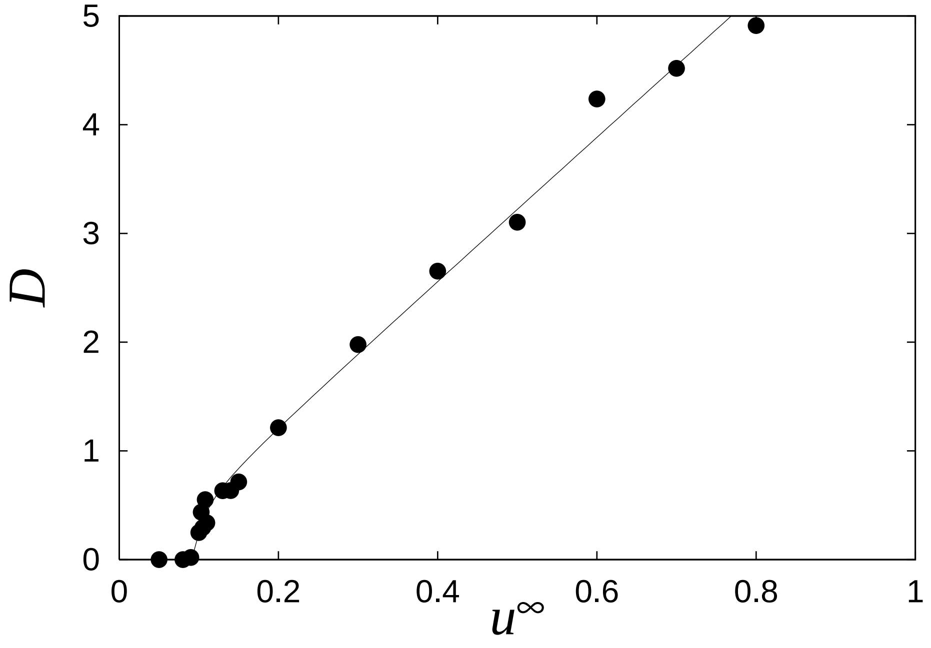

図 6: 拡散係数の流入ガス流速依存性 $(St = 10)$. 但し $A = 6.6 \pm 0, 1$,$B = (1.2 \pm 0.5) \times 10^{-2}$, $u_{mf} = (8.6 \pm 0.7) \times 10^{-2} u_0$.

更に図 6 のようにシミュレーションで計算した拡散係数 Dは

$$D = Au^{\infty}\exp[-\frac{B}{u^{\infty} - u_c}] \tag{17}$$

で表される。u_cは (15) で決定した流動化開始速度 u_{mf}とは若干異なるが, 本来 u_{mf}と同一の意味を持つべき量である。ここで紹介した (17) 式は平衡濃厚液体の粘性率等の説明のために導入された自由体積（或は空孔）理論によって解釈が可能である35,42)。

ここで得られた結果を整理すると、時間平均した量に対して

(i) ガス流速 u^{∞}を有効温度と見做す事が可能で、流動化開始速度 u_{mf}でガラス転移（固化）をする。

(ii) 平衡液体論で得られた空孔理論が有効であり、系の流動は熱励起に似た過程で生じている。

という事になる。これらの結果は最近の振動層の研究で発見された濃度の上昇は対数的に時間発展をする事43)や、2 次元振動層で対流を抑えると底の層から振動の位相によらずユニバーサルな濃度関数を持つという事44)~46)と共通している。従って粉体の最も大事な性質は排除体積効果に伴う、疑似熱力学的な過程であると表現できるかもしれない。

しかしながら平衡系と同じ様な結果が得られた事自体驚異的であるという事は強調して構わないであろう。何故ならばまず気泡流動の場合に観測された通り、基本モードは振動運動であり、2 相共存のダイナミックスであるからである。また、それに伴って揺らぎは平衡系に比べて極めて大きい。実際、流体乱流とサスペンションダイナミックスの類似性は注目に値する。つまり流体との境界条件から粒子は散逸的な運動をし、その配置空間における分布が非一様というだけでなく、速度分布もガウス分布から大きくずれて巾的になる場合があり、エネルギースペクトルもコルモゴロフ (Kolmogorov) のスケーリングに従うかの様に振舞う34)。従ってサスペンションの流動状態では流体乱流の備えている特徴の幾つかを示しているのである。同様の事は流体が介在していない散逸粒子系のシミュレーションでも観測されており47)~49)、また既に述べた様に運動論的手法による解析ではどんなに散逸が小さくともそれが含まれるなら速度分布に巾的なテールが現れるとの指摘がある6)。実験的にも振動層での速度分布が指数分布に近いものであることは確認されている50)。これらの乱流的な特徴は平衡粒子系とは全く異なる散逸粒子系の定常状態に共通するものと期待されており、平均量に対して平衡系とのアナロジーが成立する点と著しい対比をなしている。これらの相互の関係を理解するための今後の一層の研究が待たれる所である。

参考文献

[1] 粉体への運動論の適用として先駆的なのは S.B.Savage, D.J.Jeffrey, J.Fluid Mech. **110**, 255 (1981); J.T.Jenkins, and S.B.Savage, J.Fluid Mech. **130**, 187 (1983). これらの文献はそれなりに自己の方法へ懐疑的であり適用範囲も明確に述べている。

[2] 例えば、ランダウ = リフシッツ理論物理学教程、物理的運動論 (東京図書 1982).

[3] S. Chapman and T.G.Cowling, The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases; Third Edition (Cambridge Univ. Press 1970). ところで彼の Chapman(1888-1970) 氏はむしろ地球物理屋として有名らしい。特に地球磁場や磁気嵐、月や太陽の大気流などの研究として知られている from, Twentieth Century Physics Vol.III edited by L.M.Brown, A.Pais and B.Pippard (IOP Publ, 1995).

[4] D. Enskog, K. Sven. Vetenskapsaked, Handl. **63**, 4 (1922). see also, J.A.McLennan, Introduction to Non-Equilibrium Statistical Mechanics (Prentice Hall 1989).

[5] H.Hayakawa, H.Nishimori. S.Sasa and Y-h.Taguchi, J.J.Appl.Phys **34**, 397 (1995): H.M.Jaeger, S.R.Nagel, and R.B.Behringer, Rev.Mod.Phys. **68**, 1259 (1996).

[6] J.J.Brey, F.Moreno and J.W.Dufty, Phys.Rev.E **54**, 445 (1996): J.J.Brey, M.J.Ruitz-Montero and D.Cubero, Phys.Rev.E **54**, 3664 (1996).

[7] S.B. Savage, in Multiphase Flows '91-Tsukuba vol.3 edited by G.Matsui, A.Serizawa and Y.Tuji が当時の基本的諸問題をまとめた正直な review である。現時点でもその諸問題は解決されていない。

[8] D.Gidaspow, Multiphase Flow and Fluidization (Academic, Lomdon 1994).

[9] G.K.Batchelor, J.Fluid Mech. **193**, 75 (1988).

[10] D.D.Joseph and D.G.Schaeffer edit, Two Phase Flows and Waves (Springer, Berlin 1990).

[11] S. Sasa and H. Hayakawa, Europhys. Lett. **17**, 685 (1992):

[12] T. S. Komatsu and H. Hayakawa, Phys. Lett. A **183**, 56 (1993):

[13] H. Hayakawa, T. S. Komatsu, and T. Tsuzuki, Physica A **204**, 277 (1994).

[14] M. F. Göz, Phys.Rev.E **52**,3697 (1995).

[15] T. S. Komatsu and S. Sasa, Phys.Rev. E **52**,5597 (1995).

[16] H.Hayakawa and K.Nakanishi, Phys.Rev.E (to be published): patt-sol/9707002.

[17] O.Moriyama, N.Kuroiwa, M.Matsushita, and H.Hayakawa, preprint. see also H.Hayakawa and K.Nakanishi, Prog.Theor.Phys.Suppl. (to be published).

[18] 早川尚男、エアロゾル研究、**11**, No.4, 319 (1996). 早川尚男・市來健吾、ながれ, **16**, 238 (1997).

[19] 例えば、巽友正、流体力学 (培風館,1982).

[20] D.Geldart, Powder Technol. **7**, 285 (1973).

[21] 手頃な解説書として、神山新一、佐藤明、流体ミクロシミュレーション (分子シミュレーション講座 3, 朝倉書店 1997).

[22] D.J.Jeffrey and Y.Onishi, J.Fluid Mech. **139**, 261 (1984).

[23] S.Kim and R.T.Mufflin, Phys.Fluids **28**, 2033 (1985).

[24] C.Pozrikidis, Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow (Cambdrige UP, 1991).

[25] J.F.Brady and G.Bosis, Ann.Rev. Fluid Mech. **20**, 111 (1988) and references therein.

[26] A.J.Ladd, Phys.Fluids, A **5**, 299 (1993) and references therein.

[27] J.Happel and H.Brenner, Low Reynolds number hydrodynamics (Martunus Nihhoff, Dordrecht, 1973); S.Kim and S.J.Karrila, Microhydrodynamics (Butterworth-Heinemann, Boston, 1991).

[28] C.W. Beenakker, J.Chem.Phys.**85**, 1581 (1986).

[29] G.K.Batchelor, J.Fluid Mech. **52**, 245 (1972).

[30] J.F.Brady and L.J.Durlofsky, Phys.Fluids **31**, 717 (1988).

[31] H.Hayakawa and K.Ichiki, Phys.Rev.E **51**, R3815 (1995).

[32] R.R. Sundararajakumar and D.L.Koch, J.Fluid Mech, **313**, 283 (1996).

[33] A.S.Sangani, G.Mo, H-W.Tsao and D.L.Koch, J.Fluid Mech. **313**, 309 (1996).

[34] K.Ichiki and H.Hayakawa, Phys.Rev.E **52**, 658 (1995).

[35] 市來健吾、博士論文 (東北大学 1997) 及び K.Ichiki and H.Hayakawa, Phys.Rev.E (to be published): cond-mat/9704208.

[36] S. Ergun, Chem. Eng. Progr. **48**, 89 (1952). see also R.B.Bird, W.E.Stewart, and E.N.Lightfoot, Transport Phenomena, (J.Wiley & Sons, New York, 1960).

[37] J.Furukawa and T.Omae, Ind.Eng.Chem, **50**, 821 (1958).

[38] 西村浩一、前野紀一 流動状態の雪の研究 II 低温科学 物理編 **36**, 93 (1978): N.Maeno and K.Nishimura, Cold Reg. Sci and Tech. **1**, 109 (1979). see also K.Nishimura, Cold Reg.Sci.Tech. **24**, 117 (1996).

[39] A.Lippert, Chem.Ind.Tech. **38**, 350 (1966).

[40] G.D.Cody, D.J.Goldfarb, G.V.Storch.Jr, A.N.Norris, Powder Technol. **87**, 211 (1996).

[41] S.C.Tsinontides and R.Jackson, J.Fluid Mech. **225**, 237 (1993).

[42] 戸田盛和、松田博嗣、樋渡保秋、和達三樹、液体の構造と性質 (岩波書店、1976) .

[43] J.B.Knight, C.G.Fandrich, C.N.Lai, H.M.Jaeger and S.R. Nagel, Phys.Rev. E **51**, 3957 (1995).

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

[45] J.A.C. Gallas, H.J.Herrmann, and S.Sokolowski, Physica A **189**, 437 (1992).

[46] H.Hayakawa and D.C. Hong, Phys.Rev.Lett. **78**, 2764 (1997).

[47] Y-h. Taguchi, J. Phys.II (Paris) **2**, 2103 (1992).

[48] Y-h. Taguchi, Europhys.Lett. **24**, 203 (1993).

[49] Y-h. Taguchi and H.Takayasu, Europhys.Lett. **30**, 499 (1995).

[50] 田中英俊、修士論文 (東北大学 1996) 及び佐野雅己 :私信.